



**UNAP**



**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**TESIS**

**DISEÑO DE UN MODELO PARA CUANTIFICAR  
LAS EMISIONES DE DIÓXIDO DE CARBONO  
EN LA QUEMA DE COMBUSTIBLES**

**PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE  
INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTADO POR:**

**RAUL SANTIAGO CASTRO GONZALES**

**DANIEL ELISEO CÓRDOVA NÚÑEZ**

**ASESOR:**

**Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.**

**IQUITOS, PERÚ**

**2021**



# UNAP

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA AMAZONIA PERUANA  
Facultad de Ingeniería Química

UNIVERSIDAD  
**LICENCIADA**  
RESOLUCIÓN N° 012-2019-UNAP



### ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS N° 005-CGT-FIQ-UNAP

En Iquitos, a los veinte y seis días del mes de octubre del dos mil veinte y uno, a horas doce horas, se dio inicio a la sustentación pública de la Tesis titulada: "DISEÑO DE UN MODELO PARA CUANTIFICAR LAS EMISIONES DE DIÓXIDO DE CARBONO EN LA QUEMA DE COMBUSTIBLES", aprobado con Resolución Decanal N° 179-2021-FIQ-UNAP, presentado por los Bachilleres: **Raúl Santiago Castro Gonzales y Daniel Eliseo Córdova Núñez**, 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. N° 105-2021-FIQ-UNAP está integrado por:

Ing. MARITZA ECHEVARRIA ORDOÑEZ DE ARAUJO, Dra.	Presidenta
Ing. HUGO EMERSON FLORES BERNUY, Dr.	Miembro
Ing. LUIS GÓMEZ TUESTA	Miembro

Luego de haber escuchado con atención y formulado las preguntas necesarias, las cuales fueron respondidas: SATISFACTORIAMENTE

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

La sustentación pública y la tesis ha sido: APROBADA con la calificación BUENA; estando los bachilleres aptos para obtener el Título Profesional de Ingeniero Químico. Siendo las doce con cincuenta horas, se dio por terminado el acto de SUSTENTACIÓN.

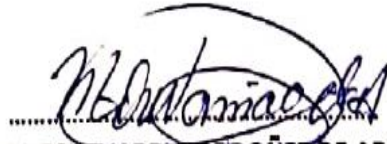
Ing. MARITZA ECHEVARRIA ORDOÑEZ DE ARAUJO, Dra.  
Presidenta de Jurado

Ing. HUGO EMERSON FLORES BERNUY, Dr.  
Miembro

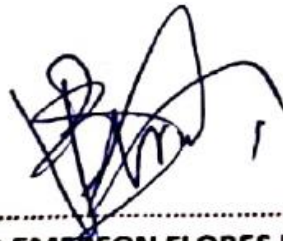
Ing. LUIS GÓMEZ TUESTA  
Miembro

Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.  
Asesor

**JURADO Y ASESOR**



.....  
**Ing. MARITZA ECHEVARRIA ORDÓÑEZ DE ARAUJO, Dra.**  
**Presidenta de Jurado**



.....  
**Ing. HUGO EMERSON FLORES BERNUY, Dr.**  
**Miembro**



.....  
**Ing. LUIS GÓMEZ TUESTA**  
**Miembro**



.....  
**Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.**  
**Asesor**

## **DEDICATORIA**

Dedico mi tesis de manera muy especial a mis padres, por el apoyo incondicional, sus consejos, el sacrificio que hicieron durante todos los años de mi carrera, no fue fácil, pero estuvieron siempre motivándome en cada momento de mi formación profesional.

**Raúl Santiago Castro Gonzales**

Dedico este logro a mis padres Hitler Córdova García y Clara Otilia Núñez Mori por sus incondicional apoyo, constantes esfuerzos y sacrificios a lo largo de toda mi formación profesional. A mi esposa Carito Irene Jaramillo Macuyama y a mi hijo Bastián Daniel Córdova Jaramillo por el amor y cariño brindado a lo largo de mi vida de quienes he tenido que estar distanciado para cumplir mis metas y nuestros sueños. A mi hermana Clara Angélica Córdova Núñez por su apoyo y continuar este apoderamiento de conocimientos. A mis demás familiares y amigos que también han contribuido de diferente manera al alcance de este gran logro.

**Daniel Eliseo Córdova Núñez**

## **AGRADECIMIENTO**

En primera instancia agradecemos a cada docente que tuvimos como formador en cada etapa de nuestra vida universitaria, personas de grandes conocimientos, que nos brindaron las enseñanzas para encontrarnos en el punto que nos encontramos en la actualidad. A todos ellos, nuestro más sincero agradecimiento, de una forma u otra formaron parte de esta meta lograda.

# ÍNDICE DE CONTENIDO

	Pág.
PORTADA	I
ACTA DE SUSTENTACIÓN	II
JURADO Y ASESOR	III
DEDICATORIA	IV
AGRADECIMIENTO	V
ÍNDICE DE CONTENIDO	VI
ÍNDICE DE TABLAS	VIII
RESUMEN	X
ABSTRACT	XI
INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO	3
1.1. Antecedentes	3
1.2. Bases teóricas	5
1.2.1. Estequiometría	5
1.2.2. Composición química	7
1.3. Definición de términos básicos	7
1.3.1. Combustible	7
1.3.2. Quema de combustible	8
1.3.3. Factor de emisión del dióxido de carbono	8
CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES	9
2.1. Formulación de la hipótesis	9
2.2. Variables y su operacionalización	9
CAPÍTULO III: METODOLOGÍA	11
3.1. Tipo y diseño	11
3.2. Diseño muestral	12
3.3. Procedimientos de recolección de datos	13
3.4. Procesamiento y análisis de datos	14
3.5. Aspectos éticos	14
3.6. Diseño del modelo	14
CAPÍTULO IV: RESULTADOS	17
CAPÍTULO V: DISCUSIÓN	34
CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES	35
CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES	36
CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN	37

ANEXOS	38
Anexo 1. Matriz de consistencia	39
Anexo 2. Hojas de cálculo para las mezclas de hidrocarburos	40
Anexo 3. Hojas de cálculo para las mezclas de alcoholes	41
Anexo 4. Hojas de cálculo para las mezclas de ésteres	42
Anexo 5. Esquema de simulación en Aspen HYSYS V8.8	43

## ÍNDICE DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
<b>Tabla 1.</b> Operacionalización de las variables.	10
<b>Tabla 2.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 1 de hidrocarburos.	17
<b>Tabla 3.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 1 de hidrocarburos.	17
<b>Tabla 4.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 2 de hidrocarburos.	17
<b>Tabla 5.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 2 de hidrocarburos.	18
<b>Tabla 6.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 3 de hidrocarburos.	18
<b>Tabla 7.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 3 de hidrocarburos.	18
<b>Tabla 8.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 4 de hidrocarburos.	19
<b>Tabla 9.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 4 de hidrocarburos.	19
<b>Tabla 10.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 5 de hidrocarburos.	19
<b>Tabla 11.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 5 de hidrocarburos.	20
<b>Tabla 12.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 6 de hidrocarburos.	20
<b>Tabla 13.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 6 de hidrocarburos.	20
<b>Tabla 14.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 7 de hidrocarburos.	21
<b>Tabla 15.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 7 de hidrocarburos.	21
<b>Tabla 16.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 8 de hidrocarburos.	21
<b>Tabla 17.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 8 de hidrocarburos.	22
<b>Tabla 18.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 1 de alcoholes.	22
<b>Tabla 19.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 1 de alcoholes.	22
<b>Tabla 20.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 2 de alcoholes.	23
<b>Tabla 21.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 2 de alcoholes.	23
<b>Tabla 22.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 3 de alcoholes.	23
<b>Tabla 23.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 3 de alcoholes.	24
<b>Tabla 24.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 4 de alcoholes.	24
<b>Tabla 25.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 4 de alcoholes.	24
<b>Tabla 26.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 5 de alcoholes.	25
<b>Tabla 27.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 5 de alcoholes.	25
<b>Tabla 28.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 6 de alcoholes.	25
<b>Tabla 29.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 6 de alcoholes.	26
<b>Tabla 30.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 7 de alcoholes.	26



<b>Tabla 31.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 7 de alcoholes.	26
<b>Tabla 32.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 8 de alcoholes.	27
<b>Tabla 33.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 8 de alcoholes.	27
<b>Tabla 34.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 1 de ésteres.	27
<b>Tabla 35.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 1 de ésteres.	28
<b>Tabla 36.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 2 de ésteres.	28
<b>Tabla 37.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 2 de ésteres.	28
<b>Tabla 38.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 3 de ésteres.	29
<b>Tabla 39.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 3 de ésteres.	29
<b>Tabla 40.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 4 de ésteres.	29
<b>Tabla 41.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 4 de ésteres.	30
<b>Tabla 42.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 5 de ésteres.	30
<b>Tabla 43.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 5 de ésteres.	30
<b>Tabla 44.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 6 de ésteres.	31
<b>Tabla 45.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 6 de ésteres.	31
<b>Tabla 46.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 7 de ésteres.	31
<b>Tabla 47.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 7 de ésteres.	32
<b>Tabla 48.</b> Composición química y estequiometría para la mezcla 8 de ésteres.	32
<b>Tabla 49.</b> Factor de emisión del CO <sub>2</sub> para la mezcla 8 de ésteres.	32

## RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo fue: **diseñar un modelo para cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles**, el cual tiene enfoque cuantitativo con nivel de profundización **descriptivo correlacional**. La población de estudio lo representan todos los combustibles y el tipo de muestreo es no probabilístico a criterio de los investigadores, considerándose el tamaño de la muestra un máximo de 24 mezclas (8 de hidrocarburos, 8 de alcoholes y 8 de ésteres). Las fuentes de donde se obtuvieron los datos como masas molares de hidrocarburos, ésteres y alcoholes, fueron tesis de pre y posgrado, internet y el programa Aspen HYSYS V8.8. Los resultados del factor de emisión del dióxido de carbono, obtenidos mediante el modelo, se compararon con los resultados obtenidos mediante las simulaciones en Aspen HYSYS V8.8, obteniéndose de las 24 mezclas analizadas, que el mínimo y máximo porcentaje de error son 0,0039% y 0,0946%, los cuales corresponden a las mezclas 1 y 7 de alcoholes, respectivamente. Esto valida el **modelo para cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles** y a su vez prueba la hipótesis general. En conclusión, también se demostró que existe relación entre el factor de emisión del dióxido de carbono, los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono, las fracciones molares y masas molares de los componentes de un combustible, lo cual prueba cada una de las hipótesis específicas.

**Palabras claves:** factor de emisión del dióxido de carbono, coeficientes estequiométricos, fracciones molares, masas molares.

## ABSTRACT SUMMARY

The main objective of this work was: **Designing a model to quantify the emissions of carbon dioxide in the burning of fuels**, which has address quantitative with level of deepening **descriptive correlational**. The population of study represent it all the fuels and the type of sampling is not probabilistic in the sole discretion of the investigators, being considered the size of the sample a maximum of 24 mixtures (8 hydrocarbon, 8 alcohol and 8 ester). Sources from where they obtained the data like molar masses of hydrocarbons, esters and alcohols, were thesis of pre and postgraduate course, internet and the program Aspen HYSYS V8.8. The results of the factor of emission of carbon dioxide, obtained intervening the model, compared with the results obtained by means of the simulations in Aspen HYSYS V8.8, getting of the 24 analyzed mixtures, that the minimum and maximum percentage of error are 0,0039% and 0,0946%, which correspond to the mixtures 1 and 7 of alcohols, respectively. This validates the **model to quantify the emissions of carbon dioxide in the burning of fuels** and in turn tries the general hypothesis. In conclusion, also it was proven that there is relation between the factor of emission of carbon dioxide, the stoichiometric coefficients of carbon dioxide and molar fractions and molar masses of the components of a fuel, which tries every one of the specific hypotheses.

**Keywords:** factor of emission of carbon dioxide, stoichiometric coefficients, mole fractions, molar masses.

## INTRODUCCIÓN

La gran mayoría de las actividades que realiza el ser humano, como la agricultura, ganadería, producción de energía, sistema alimentario, transporte, industria, consumo de energía en edificios y casas, la respiración, etc., están asociadas en gran medida a la emisión de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), provocando de esta manera el calentamiento global. Muchas de las instituciones, organizaciones y ciudadanía en general, que realizan las diferentes actividades arriba mencionadas, no cuentan con una guía que les permita cuantificar de manera eficiente la cantidad de  $\text{CO}_2$  que emiten por la quema de los combustibles que utilizan, básicamente porque no tienen el debido conocimiento sobre aspectos que estén relacionados a las reacciones de combustión, tales como: balance de materiales, composición química y estequiometría de las reacciones. En consecuencia, la falta de conocimiento de las personas, hace que no sean conscientes del daño que le están haciendo al planeta Tierra y no sean capaces de diseñar sistemas que disminuyan la emisión de  $\text{CO}_2$ . De esta manera, se plantea la siguiente interrogante general: **¿se podría mediante el diseño de un modelo cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles?**

Los problemas específicos de la presente investigación son:

- ¿Cuál es la relación que existe entre el factor de emisión y los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono?
- ¿Cuál es la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las fracciones molares de los componentes de un combustible?
- ¿Cuál es la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las masas molares de los componentes de un combustible?

Los objetivos específicos de la presente investigación son:

- Determinar la relación que existe entre el factor de emisión y los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono.

- Determinar la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las fracciones molares de los componentes de un combustible.
- Determinar la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las masas molares de los componentes de un combustible.

## CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO

### 1.1. Antecedentes

- En el Departamento de Medio ambiente y Política Territorial del Gobierno de Vasco (2013, p. 5), realizaron el trabajo titulado: “7 METODOLOGÍAS PARA EL CÁLCULO DE EMISIONES DE GASES DE EFECTO INVERNADERO”. El objetivo de este trabajo, fue que sea una herramienta de utilidad para las organizaciones interesadas en conocer su contribución al cambio climático de una forma reconocida y con la solvencia técnica necesaria. Así, en el presente documento se recogen las principales certificaciones y metodologías existentes a nivel mundial para el cálculo de las emisiones de GEI (gases de efecto invernadero) asociadas a una organización.

Con el afán de que el documento resulte de la mayor utilidad para las organizaciones, se incluye una comparativa de las diferentes metodologías, así como recomendaciones de uso en función de los objetivos fijados en cada caso.

- En el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (2014, p. 4), realizaron el informe técnico titulado: “FACTORES DE EMISIÓN PARA LOS DIFERENTES TIPOS DE COMBUSTIBLES FÓSILES Y ALTERNATIVOS QUE SE CONSUMEN EN MÉXICO”. El objetivo general de este trabajo, fue determinar los factores de emisión a partir de su contenido de carbono por unidad de energía, de los principales combustibles que se consumen en México en los sectores energético, del transporte, industrial, comercial y residencial, incluyendo: gasolina (magna y premium), diésel (automotriz, industrial y marino), combustóleo (ligero y pesado), intermedio 15, carbón (térmico y siderúrgico), coque de petróleo, coque de carbón, gas natural, gas propano, gas butano, gasóleo, gas residual y gas licuado de petróleo, utilizados en transporte e industria de la aviación.
- Rojas (2017, pp. 1-3), realizó la tesis para optar el grado de Doctoris Philosophiae en Ingeniería y Ciencias Ambientales, la cual se tituló: “MODELACIÓN NUMÉRICA DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS

Y SU RELACIÓN CON LAS CONDICIONES METEOROLÓGICAS EN LIMA METROPOLITANA”. Este trabajo tuvo como objetivo general, modelar numéricamente la concentración del PM10 y PM2.5 y sus relaciones con las condiciones meteorológicas en Lima Metropolitana, usando el modelo CCATT-BRAMS. Para la simulación numérica se utilizó el programa científico de código abierto denominado CCATT-BRAMS, elaborado en fortran 90 con actualizaciones desarrolladas en INPE/CPTEC (Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais/Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos), Brasil. Se han analizado los diferentes códigos de simulación, con la finalidad de adecuar los datos iniciales y de frontera y los enlaces que tienen lugar para simular y alcanzar los resultados esperados. Se han incorporado nuevos indicadores de relaciones de NOx/VOC y CO/COV, medidos y simulados para Lima Metropolitana. Los datos iniciales se obtuvieron de los registros de las variables meteorológicas y las concentraciones de PM10, PM2.5 y gases. Para ello se ha analizado series anuales recientes (2014 al 2015) de datos diarios y horarios tomados de la red de monitoreo de SENAMHI, los cuales se denominarán “datos observados”, obtenidos en distintas estaciones de medida en Lima Metropolitana. Se ha realizado los cálculos de estimaciones de emisiones propias usando los factores de emisión según la EPA, que sirven como dato de entrada al código CCATT-BRAMS y para ello ha sido necesario hacer un análisis propio de variables como clases, tipos y número de vehículos, consumos energéticos locales y nacionales del parque automotor, crecimiento poblacional y número de enfermos por enfermedades respiratorias en los periodos del 2006 al 2013. Adicionalmente se hicieron proyecciones al 2040 mediante un análisis estadístico.

- Zambrano (2017-2018, p. 2), realizó el trabajo titulado: “Análisis de dispersión de contaminantes emitidos por motores que utilizan petróleo crudo como combustible”. El presente trabajo tuvo como objetivo general analizar la dispersión de los contaminantes SO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub> debido a la actividad de una industria petrolera, donde generan energía eléctrica mediante motores que funcionan a petróleo crudo como combustible, en un campo petrolero ubicado en la región amazónica del Ecuador. En este estudio se analizó la dispersión de contaminantes emitidos por seis conjuntos de generadores Hyundai, compuesto por motores de la marca Hyundai HiMSEN, acoplados en una misma estructura de diseño

denominada HYUNDAI HiMSEN H21/32, con 1800 kW de potencia nominal, que utilizan petróleo crudo como combustible en la Central de Generación Oso B, que pertenece a una industria petrolera ubicada en Ecuador, provincia de Orellana y demanda energía eléctrica para abastecer su operación. La metodología de estudio utilizada es el modelo de dispersión de Pluma de Gauss para los contaminantes SO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub>, tomando en cuenta la ubicación del foco emisor, los datos meteorológicos de la provincia de Orellana, la emisión de los contaminantes SO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub> por los motores y las categorías de dispersión de Pasquill-Gifford-Turner; esto con el fin de compararlos con la legislación ecuatoriana de calidad del aire, estipulada en el Acuerdo Ministerial N° 097-A del 30 de julio del 2015.

## 1.2. Bases teóricas

### 1.2.1. Estequiometría

Una reacción química escrita provee de información cualitativa y cuantitativa. Cualitativamente se puede ver qué reactivos interactúan para producir sustancias finales. Cuantitativamente el principio de conservación de la masa puede aplicarse para darnos información cuánto de cada componente está implicado en la producción de los resultados mostrados. La igualación de las ecuaciones para que el mismo número de átomos de cada elemento aparezca a cada lado de la ecuación y el cálculo posterior, que puede ser empleado para determinar la cantidad de cada reactivo, se denomina **estequiometría** (Masters y Ela, 2008, p. 52).

La estequiometría aclara, cuantas moléculas de una especie se formarán durante la reacción química cuando desaparece un número dado de moléculas de otra especie (Fogler, 2008, p. 99). Considerando la siguiente reacción general:



Donde las especies A y B, se denominan reactantes y las especies C y D los productos de la reacción. Los términos *a*, *b*, *c* y *d* se denominan



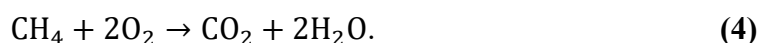
**coeficientes estequiométricos** de las especies A, B, C y D, respectivamente. Si se toma la especie A como base de cálculo, se debe dividir el coeficiente estequiométrico de cada especie de la reacción entre el coeficiente estequiométrico de la especie A, entonces la ecuación (1), queda:



La ecuación (2) puede leerse como: una molécula de A reacciona con  $(b/a)$  moléculas de B para producir  $(c/a)$  moléculas de C y  $(d/a)$  moléculas de D. Por ejemplo, supóngase que se quiera investigar la reacción de combustión del metano ( $\text{CH}_4$ ), el metano se combina con el oxígeno para producir dióxido de carbono y agua, como refleja la siguiente ecuación:



Como puede observarse en la ecuación (3), un átomo de carbono aparece en cada lado, lo que es correcto, pero hay cuatro átomos de hidrógeno a la izquierda y sólo dos a la derecha y hay sólo dos átomos de oxígeno a la izquierda mientras hay tres a la derecha, en consecuencia, la ecuación no está equilibrada. Para que la ecuación esté equilibrada, se debe tener la misma cantidad de átomos de C, H y O a cada lado de la flecha, es decir:



Se puede observar de la ecuación (4), que los coeficientes estequiométricos son: 1 para  $\text{CH}_4$ , 2 para  $\text{O}_2$ , 1 para  $\text{CO}_2$  y 2 para  $\text{H}_2\text{O}$ . Es decir: una molécula de metano reacciona con dos moléculas de oxígeno para producir una molécula de dióxido de carbono y dos moléculas de agua. También, sería bastante común describir la ecuación (4), en términos de la masa de cada sustancia; es decir, cuántos gramos de oxígeno son necesarios para reaccionar con cuántos gramos metano.

### 1.2.2. Composición química

Las propiedades fisicoquímicas de una mezcla dependen en gran medida de la composición de la misma; a continuación, se describen distintos modos de expresar la composición de las mezclas.

#### Moléculas y masa molar

**La masa atómica** de un elemento es la masa de un átomo en una escala que asigna al  $^{12}\text{C}$  (el isótopo del carbono cuyo núcleo contiene 6 protones y 6 neutrones) una masa exacta de 12. **La masa molar** de un compuesto es la suma de las masas atómicas de los átomos que constituyen una molécula del compuesto: el dióxido de carbono  $\text{CO}_2$  tiene una masa molar aproximada de 44, pues la masa de un átomo de carbono es 12 y la masa de dos átomos de oxígeno es 32, entonces la masa molar del  $\text{CO}_2$  se obtiene sumando  $12 + 32 = 44$ . Un g/mol de una especie es la cantidad de esta sustancia cuya masa en gramos es numéricamente igual a su masa molar (Felder y Rousseau, 2004, pp. 48-49).

La masa molar de una sustancia se denota como  $M$  y sus unidades son: g/mol, kg/kmol,  $\text{lb}_m/\text{lbmol}$ . Así, por ejemplo, la masa molar del  $\text{CO}_2$  se puede expresar como: 44 g/mol, 44 kg/kmol, 44  $\text{lb}_m/\text{lbmol}$ .

La **fracción molar** de un componente A de una mezcla, se denota como  $y_A$  y relaciona los moles de A entre los moles de la mezcla (Felder y Rousseau, 2004, pp. 50-51), es decir:

$$y_A = \frac{\text{moles de A}}{\text{moles de la mezcla}} \quad (5)$$

### 1.3. Definición de términos básicos

#### 1.3.1. Combustible

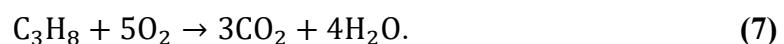
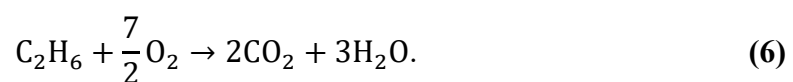
Es cualquier material o mezcla de materiales, capaz de liberar energía cuando se oxida de forma violenta con desprendimiento de calor. Los

combustibles que se queman en los hornos de plantas de energía pueden ser sólidos, líquidos o gaseosos (Felder y Rousseau, 2004, p. 465). Algunos de los más comunes son:

- **Combustibles sólidos:** el carbón es el principal, el coque, la madera y desechos sólidos (basura).
- **Combustibles líquidos:** los hidrocarburos obtenidos por destilación del petróleo crudo, el alquitrán, mezclas de ésteres y mezclas de alcoholes.
- **Combustibles gaseosos:** sobre todo gas natural, los hidrocarburos ligeros obtenidos por tratamiento de petróleo.

### 1.3.2. Quema de combustible

La combustión o quema de un combustible, es la reacción rápida de un combustible con el oxígeno y es quizá más importante que cualquier otra reacción industrial (Felder y Rousseau, 2004, p. 142). En una combustión completa, el combustible reacciona con el oxígeno del aire para dar como productos el dióxido de carbono más vapor de agua. Por ejemplo, para un combustible compuesto por los gases etano ( $C_2H_6$ ) y propano ( $C_3H_8$ ), se tiene las siguientes reacciones de combustión:



### 1.3.3. Factor de emisión del dióxido de carbono

Es la relación entre la masa del dióxido de carbono generado y la masa o volumen del combustible consumido (Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, 2014, p. 7), se denota como  $FE_{CO_2}$  y sus unidades son:

$$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}} \quad \text{o} \quad \frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$$

## CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES

### 2.1. Formulación de la hipótesis

#### a. Hipótesis general

Mediante el diseño de un modelo se podrá cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.

#### b. Hipótesis específicas

- Existe relación entre el factor de emisión y los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono.
- Existe relación entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las fracciones molares de los componentes de un combustible.

### 2.2. Variables y su operacionalización

**Variables independientes:** estequiometría de las reacciones de combustión y composición química del combustible.

**Variable dependiente:** emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.

**Tabla 1.** Operacionalización de las variables.

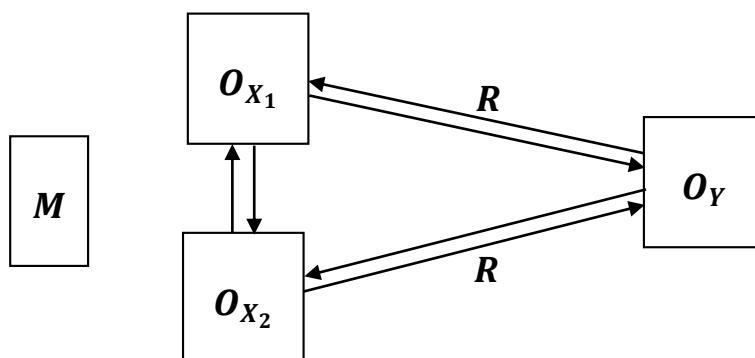
Variables	Indicador	Notación	Definición	Tipo	Unidad de medida
<b>Independientes</b>					
Estequiometría de las reacciones de combustión.	Coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono generado, en la quema de los componentes de un combustible.	$a_1, a_2, a_3, a_4, \dots, a_p$ Para un combustible con $p$ componentes.	Expresan la relación entre la cantidad de moles de dióxido de carbono generado, por cada un mol del componente $i$ de un combustible (Fogler, 2008, p. 99).	Cuantitativa discreta	$\frac{\text{moles de CO}_2}{\text{mol del componente } i}$
Composición química del combustible.	Fraciones molares de los componentes de un combustible.	$y_1, y_2, y_3, y_4, \dots, y_p$	Expresan la relación entre la cantidad de moles del componente $i$ y la cantidad de moles de un combustible (Felder y Rousseau, 2004, pp. 50-51).	Cuantitativa continua	$\frac{\text{moles del componente } i}{\text{moles de combustible}}$
	Masas molares de los componentes de un combustible.	$M_1, M_2, M_3, M_4, \dots, M_p$	Expresan la masa de un mol del componente $i$ de un combustible (Felder y Rousseau, 2004, pp. 48-49).	Cuantitativa continua	$\frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$
<b>Dependiente</b>					
Emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.	Factor de emisión del dióxido de carbono.	$FE_{CO_2}$	Es la relación entre la masa del dióxido de carbono generado y la masa o volumen del combustible consumido (Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, 2014, p. 7).	Cuantitativa continua	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$ $\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$

**Fuente:** Elaboración propia.

## CAPÍTULO III: METODOLOGÍA

### 3.1. Tipo y diseño

El presente trabajo, tiene **enfoque cuantitativo**, porque se determina la relación entre variables cuantitativas. De acuerdo al nivel de profundización en el objeto de estudio, el tipo de investigación es **descriptivo correlacional**, porque tal como el nombre lo dice, se describió en detalle los fundamentos (balance de materiales, estequiometría de las reacciones de combustión y propiedades de los combustibles) que se requieren para diseñar un modelo que permita cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles; en lo cual se buscó relacionar, las variables independientes con la variable dependiente de una misma muestra (véase la figura 1).



**Figura 1.** Esquema del tipo de investigación.

**Fuente:** Elaboración propia.

Donde:

$O_{X_1}$ ,  $O_{X_2}$  y  $O_Y$ , son las observaciones obtenidas en cada una de las tres variables ( $X_1$ ,  $X_2$  e  $Y$ , respectivamente) distintas de la muestra.

$X_1$  : estequiometría de las reacciones de combustión (variable independiente).

$X_2$  : composición química del combustible (variable independiente).

$Y$  : emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles (variable de pendiente).

$M$  : muestra.

### 3.2. Diseño muestral

La población para el presente estudio, lo representan todos los combustibles (población infinita). El tipo de muestreo es no probabilístico a criterio de los investigadores, considerándose el tamaño de la muestra un máximo de 24, la cual estará conformada por los siguientes grupos:

$G_1$ : 8 mezclas de hidrocarburos.

Mezcla 1 de hidrocarburos: metano ( $y_1 = 0,60$ ), etano ( $y_2 = 0,25$ ), propano ( $y_3 = 0,15$ ).

Mezcla 2 de hidrocarburos: metano ( $y_1 = 0,80$ ), etano ( $y_2 = 0,10$ ), propano ( $y_3 = 0,10$ ).

Mezcla 3 de hidrocarburos: metano ( $y_1 = 0,85$ ), etano ( $y_2 = 0,1$ ), propano ( $y_3 = 0,05$ ).

Mezcla 4 de hidrocarburos: propano ( $y_1 = 0,60$ ), butano ( $y_2 = 0,25$ ), pentano ( $y_3 = 0,15$ ).

Mezcla 5 de hidrocarburos: propano ( $y_1 = 0,80$ ), butano ( $y_2 = 0,10$ ), pentano ( $y_3 = 0,10$ ).

Mezcla 6 de hidrocarburos: propano ( $y_1 = 0,85$ ), butano ( $y_2 = 0,10$ ), pentano ( $y_3 = 0,05$ ).

Mezcla 7 de hidrocarburos: metano ( $y_1 = 0,85$ ), propano ( $y_2 = 0,1$ ), butano ( $y_3 = 0,03$ ), pentano ( $y_4 = 0,02$ ).

Mezcla 8 de hidrocarburos: metano ( $y_1 = 0,60$ ), propano ( $y_2 = 0,25$ ), butano ( $y_3 = 0,10$ ), pentano ( $y_4 = 0,05$ ).

$G_2$ : 8 mezclas de alcoholes.

Mezcla 1 de alcoholes: metanol ( $y_1 = 0,60$ ), etanol ( $y_2 = 0,25$ ), propanol ( $y_3 = 0,15$ ).

Mezcla 2 de alcoholes: metanol ( $y_1 = 0,80$ ), etanol ( $y_2 = 0,10$ ), propanol ( $y_3 = 0,10$ ).

Mezcla 3 de alcoholes: metanol ( $y_1 = 0,85$ ), etanol ( $y_2 = 0,10$ ), propanol ( $y_3 = 0,05$ ).

Mezcla 4 de alcoholes: propanol ( $y_1 = 0,60$ ), butanol ( $y_2 = 0,25$ ), pentanol ( $y_3 = 0,15$ ).

Mezcla 5 de alcoholes: propanol ( $y_1 = 0,80$ ), butanol ( $y_2 = 0,10$ ), pentanol

( $y_3 = 0,10$ ).

Mezcla 6 de alcoholes: propanol ( $y_1 = 0,85$ ), butanol ( $y_2 = 0,10$ ), pentanol ( $y_3 = 0,05$ ).

Mezcla 7 de alcoholes: metanol ( $y_1 = 0,85$ ), propanol ( $y_2 = 0,10$ ), butanol ( $y_3 = 0,03$ ), pentanol ( $y_4 = 0,02$ ).

Mezcla 8 de alcoholes: metanol ( $y_1 = 0,60$ ), propanol ( $y_2 = 0,25$ ), butanol ( $y_3 = 0,10$ ), pentanol ( $y_4 = 0,05$ ).

$G_3$ : 8 mezclas de ésteres (biodiésel).

Mezcla 1 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,60$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,25$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,15$ ).

Mezcla 2 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,80$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,10$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,10$ ).

Mezcla 3 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,85$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,10$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,05$ ).

Mezcla 4 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,60$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,25$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,10$ ), metil-laurato ( $y_4 = 0,05$ ).

Mezcla 5 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,70$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,10$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,10$ ), metil-laurato ( $y_4 = 0,10$ ).

Mezcla 6 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,80$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,10$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,05$ ), metil-laurato ( $y_4 = 0,05$ ).

Mezcla 7 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,85$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,10$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,03$ ), metil-laurato ( $y_4 = 0,02$ ).

Mezcla 8 de ésteres: metil-palmitato ( $y_1 = 0,90$ ), metil-oleato ( $y_2 = 0,05$ ), metil-linoleato ( $y_3 = 0,03$ ), metil-laurato ( $y_4 = 0,02$ ).

### 3.3. Procedimientos de recolección de datos

Las fuentes de donde se obtuvieron los datos como masas molares de hidrocarburos, ésteres y alcoholes, fueron tesis de pre y posgrado, internet y el programa Aspen HYSYS V8.8. Para obtener los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono generado, se tiene que hacer la reacción de combustión para cada componente de un combustible.



### 3.4. Procesamiento y análisis de datos

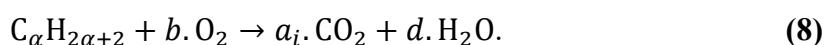
Para el procesamiento y análisis de datos, se elaboró varias hojas de cálculo de Microsoft Excel, programando el mencionado modelo, en las cuales se ingresó toda la información requerida sobre la composición química del combustible y la estequiometría de las reacciones de combustión.

### 3.5. Aspectos éticos

Como tesis y egresados de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, nos comprometemos a respetar la veracidad de los resultados que se obtenga al hacer uso del modelo para cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.

### 3.6. Diseño del modelo

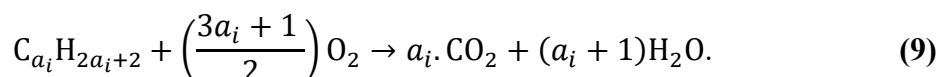
En forma general, la reacción de combustión para un hidrocarburo, se puede expresar mediante la siguiente ecuación:



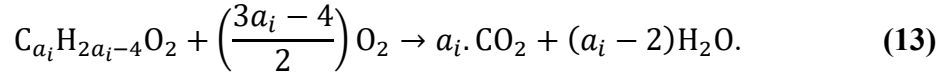
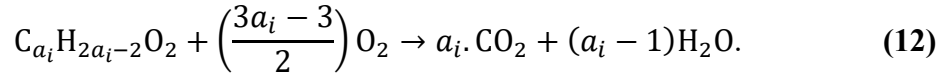
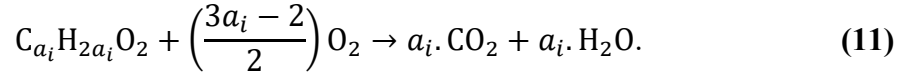
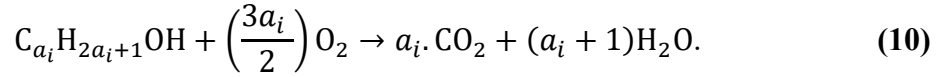
Haciendo un balance atómico, se tiene:

$$a_i = \alpha, \quad 2d = 2\alpha + 2 = 2a_i + 2 \Rightarrow d = a_i + 1.$$
$$2b = 2a_i + d = 2\alpha + d = 2a_i + a_i + 1 \Rightarrow 2b = 3a_i + 1 \Rightarrow b = \frac{3a_i + 1}{2}.$$

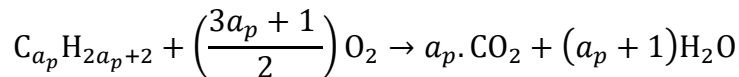
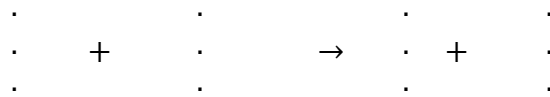
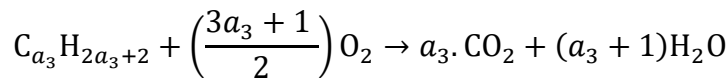
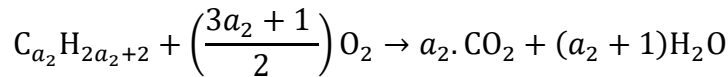
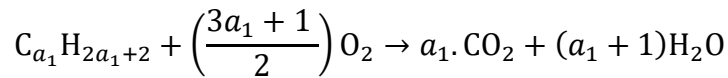
Entonces la ecuación (8), queda:



Procediendo de la misma forma que para un hidrocarburo, se obtiene la reacción general de combustión para el caso de un alcohol en la ecuación (10) y de un éster en las ecuaciones (11), (12) y (13).



Se puede observar en las ecuaciones (9), (10), (11), (12) y (13) que el coeficiente estequiométrico del CO<sub>2</sub>, es igual a la cantidad de átomos de carbono de un componente, ya sea hidrocarburo, alcohol o éster. Considerando ahora, que se tiene un combustible que está formado por  $p$  componentes, se tendrá las siguientes reacciones de combustión:



Si se tiene en cuenta la estequiometria de las  $p$  reacciones de combustión, la masa total del CO<sub>2</sub> generado, al quemarse el combustible de  $p$  componentes, es:

$$m_{CO_2} = (a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) n_{\text{combustible}} \cdot M_{CO_2}. \quad (14)$$

Donde  $m_{CO_2}$  es la masa total del CO<sub>2</sub> generado al quemarse el combustible de  $p$  componentes en kg. Las cantidades  $y_1, y_2, y_3, \dots, y_p$ , son las fracciones molares

de cada uno de los componentes del combustible. El término  $n_{\text{combustible}}$  es la cantidad de moles del combustible en kmol y  $M_{\text{CO}_2}$  es la masa molar del  $\text{CO}_2$  en kg/kmol. La masa del combustible, es:

$$m_{\text{combustible}} = n_{\text{combustible}} \cdot M_{\text{combustible}}. \quad (15)$$

Donde  $m_{\text{combustible}}$  es la masa en kg,  $n_{\text{combustible}}$  es la cantidad de moles en kmol y  $M_{\text{combustible}}$  es la masa molar del combustible en kg/kmol. Entonces, el factor de emisión del dióxido de carbono ( $FE_{\text{CO}_2}$ ), se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$FE_{\text{CO}_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) n_{\text{combustible}} \cdot M_{\text{CO}_2}}{n_{\text{combustible}} \cdot M_{\text{combustible}}}$$

$$FE_{\text{CO}_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{\text{CO}_2}}{M_{\text{combustible}}}. \quad (16)$$

La masa molar del combustible, también se puede expresar en términos de las fracciones molares y las masas molares de cada uno de los componentes, es decir:

$$M_{\text{combustible}} = y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p. \quad (17)$$

Entonces, la ecuación (16), queda:

$$FE_{\text{CO}_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{\text{CO}_2}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p}. \quad (18)$$

Si se desea expresar el factor de emisión como los kilogramos de dióxido de carbono generado, entre los metros cúbicos de combustible quemado, es decir  $\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$ , se puede utilizar la siguiente ecuación:

$$FE_{\text{CO}_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{\text{CO}_2} \rho_{\text{combustible}}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p}. \quad (19)$$

Las ecuaciones (18) y (19), representan el modelo para cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.

## CAPÍTULO IV: RESULTADOS

**Tabla 2.** Composición química y estequiometría para la mezcla 1 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 1 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metano	CH <sub>4</sub>	0,60	16,04	CH <sub>4</sub> + 2O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,25	30,07	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + (7/2)O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,15	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 3.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 1 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	kg de CO <sub>2</sub> kg de combustible	kg de CO <sub>2</sub> m <sup>3</sup> de combustible	kg de CO <sub>2</sub> kg de combustible	kg de CO <sub>2</sub> m <sup>3</sup> de combustible	
0,9929	2,8714	2,8511	2,8713	2,8509	0,0051%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 4.** Composición química y estequiometría para la mezcla 2 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 2 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metano	CH <sub>4</sub>	0,80	16,04	CH <sub>4</sub> + 2O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,10	30,07	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + (7/2)O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,10	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 5.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 2 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
0,8451	2,8255	2,3878	2,8252	2,3876	0,0097%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 6.** Composición química y estequiometría para la mezcla 3 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 3 DE HIDROCARBUROS					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metano	CH <sub>4</sub>	0,85	16,04	CH <sub>4</sub> + 2O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,10	30,07	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + (7/2)O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,05	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 7.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 3 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
0,7862	2,8023	2,2032	2,8037	2,2043	0,0502%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 8.** Composición química y estequiometría para la mezcla 4 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 4 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Propano	$C_3H_8$	0,60	44,10	$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$	3
Butano	$C_4H_{10}$	0,25	58,12	$C_4H_{10} + (13/2)O_2 \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O$	4
Pentano	$C_5H_{12}$	0,15	72,15	$C_5H_{12} + 8O_2 \rightarrow 5CO_2 + 6H_2O$	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 9.** Factor de emisión del  $CO_2$  para la mezcla 4 de hidrocarburos.

Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$				
	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
2,2060	3,0154	6,6520	3,0168	6,6550	0,0464%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 10.** Composición química y estequiometría para la mezcla 5 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 5 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Propano	$C_3H_8$	0,80	44,10	$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$	3
Butano	$C_4H_{10}$	0,10	58,12	$C_4H_{10} + (13/2)O_2 \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O$	4
Pentano	$C_5H_{12}$	0,10	72,15	$C_5H_{12} + 8O_2 \rightarrow 5CO_2 + 6H_2O$	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 11.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 5 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
2,0510	3,0065	6,1662	3,0038	6,1607	0,0885%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 12.** Composición química y estequiometría para la mezcla 6 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 6 DE HIDROCARBUROS					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,85	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butano	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,10	58,12	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> + (13/2)O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentano	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0,05	72,15	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> + 8O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 13.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 6 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
1,9890	3,0025	5,9720	3,0045	5,9760	0,0657%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 14.** Composición química y estequiometría para la mezcla 7 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 7 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metano	CH <sub>4</sub>	0,85	16,04	CH <sub>4</sub> + 2O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,10	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butano	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,03	58,12	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> + (13/2)O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentano	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0,02	72,15	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> + 8O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 15.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 7 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	kg de CO <sub>2</sub> kg de combustible	kg de CO <sub>2</sub> m <sup>3</sup> de combustible	kg de CO <sub>2</sub> kg de combustible	kg de CO <sub>2</sub> m <sup>3</sup> de combustible	
	0,8863	2,8399	2,5170	2,8408	

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 16.** Composición química y estequiometría para la mezcla 8 de hidrocarburos.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 8 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metano	CH <sub>4</sub>	0,60	16,04	CH <sub>4</sub> + 2O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,25	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butano	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,10	58,12	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> + (13/2)O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentano	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0,05	72,15	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> + 8O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.



**Tabla 17.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 8 de hidrocarburos.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
1,2600	2,9273	3,6884	2,9262	3,6870	0,0381%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 18.** Composición química y estequiometría para la mezcla 1 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 1 DE ALCOHOLES					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metanol	CH <sub>3</sub> OH	0,60	32,04	CH <sub>3</sub> OH + (3/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	0,25	46,07	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH + 3O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,15	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 19.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 1 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
787,70	1,7158	1351,56	1,7159	1351,58	0,0039%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 20.** Composición química y estequiometría para la mezcla 2 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 2 DE ALCOHOLES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metanol	CH <sub>3</sub> OH	0,80	32,04	CH <sub>3</sub> OH + (3/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	0,10	46,07	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH + 3O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,10	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 21.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 2 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
789,30	1,5783	1245,78	1,5785	1245,92	0,0106%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 22.** Composición química y estequiometría para la mezcla 3 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 3 DE ALCOHOLES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metanol	CH <sub>3</sub> OH	0,85	32,04	CH <sub>3</sub> OH + (3/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	0,10	46,07	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH + 3O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,05	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 23.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 3 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
791,70	1,5156	1199,89	1,5148	1199,25	0,0517%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 24.** Composición química y estequiometría para la mezcla 4 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 4 DE ALCOHOLES					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,60	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butanol	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	0,25	74,12	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH + 6O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentanol	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	0,15	88,15	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH + (15/2)O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 25.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 4 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
805,20	2,3039	1855,13	2,3051	1856,03	0,0506%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 26.** Composición química y estequiometría para la mezcla 5 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 5 DE ALCOHOLES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,80	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butanol	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	0,10	74,12	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH + 6O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentanol	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	0,10	88,15	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH + (15/2)O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 27.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 5 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
794,50	2,2584	1794,32	2,2592	1794,91	0,0340%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 28.** Composición química y estequiometría para la mezcla 6 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 6 DE ALCOHOLES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,85	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butanol	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	0,10	74,12	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH + 6O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentanol	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	0,05	88,15	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH + (15/2)O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 29.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 6 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
790,80	2,2388	1770,46	2,2375	1769,42	0,0591%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 30.** Composición química y estequiometría para la mezcla 7 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 7 DE ALCOHOLES					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metanol	CH <sub>3</sub> OH	0,85	32,04	CH <sub>3</sub> OH + (3/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,10	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butanol	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	0,03	74,12	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH + 6O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentanol	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	0,02	88,15	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH + (15/2)O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 31.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 7 de alcoholes.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
791,18	1,6195	1281,29	1,6210	1282,48	0,0946%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 32.** Composición química y estequiometría para la mezcla 8 de alcoholes.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 8 DE ALCOHOLES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metanol	CH <sub>3</sub> OH	0,60	32,04	CH <sub>3</sub> OH + (3/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,25	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3
Butanol	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	0,10	74,12	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH + 6O <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O	4
Pentanol	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	0,05	88,15	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH + (15/2)O <sub>2</sub> → 5CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O	5

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 33.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 8 de alcoholes.

Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$				
	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	kg de CO <sub>2</sub> / kg de combustible	kg de CO <sub>2</sub> / m <sup>3</sup> de combustible	kg de CO <sub>2</sub> / kg de combustible	kg de CO <sub>2</sub> / m <sup>3</sup> de combustible	
794,50	1,9106	1518,00	1,9099	1517,45	0,0384%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 34.** Composición química y estequiometría para la mezcla 1 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 1 DE ÉSTERES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,60	270,45	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (49/2)O <sub>2</sub> → 17CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	17
Metil-oleato	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	0,25	296,50	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub> + 27O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 18H <sub>2</sub> O	19
Metil-linoleato	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,15	294,50	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (53/2)O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	19

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 35.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 1 de ésteres.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
877,10	2,7921	2448,95	2,7924	2449,26	0,0109%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 36.** Composición química y estequiometría para la mezcla 2 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 2 DE ÉSTERES					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,80	270,45	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (49/2)O <sub>2</sub> → 17CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	17
Metil-oleato	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	0,10	296,50	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub> + 27O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 18H <sub>2</sub> O	19
Metil-linoleato	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,10	294,50	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (53/2)O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	19

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 37.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 2 de ésteres.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
877,10	2,7800	2438,32	2,7804	2438,73	0,0150%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 38.** Composición química y estequiometría para la mezcla 3 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 3 DE ÉSTERES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	$C_{17}H_{34}O_2$	0,85	270,45	$C_{17}H_{34}O_2 + (49/2)O_2 \rightarrow 17CO_2 + 17H_2O$	17
Metil-oleato	$C_{19}H_{36}O_2$	0,10	296,50	$C_{19}H_{36}O_2 + 27O_2 \rightarrow 19CO_2 + 18H_2O$	19
Metil-linoleato	$C_{19}H_{34}O_2$	0,05	294,50	$C_{19}H_{34}O_2 + (53/2)O_2 \rightarrow 19CO_2 + 17H_2O$	19

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 39.** Factor de emisión del  $CO_2$  para la mezcla 3 de ésteres.

Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$				
	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
876,80	2,7761	2434,11	2,7774	2435,21	0,0459%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 40.** Composición química y estequiometría para la mezcla 4 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 4 DE ÉSTERES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	$C_{17}H_{34}O_2$	0,60	270,45	$C_{17}H_{34}O_2 + (49/2)O_2 \rightarrow 17CO_2 + 17H_2O$	17
Metil-oleato	$C_{19}H_{36}O_2$	0,25	296,50	$C_{19}H_{36}O_2 + 27O_2 \rightarrow 19CO_2 + 18H_2O$	19
Metil-linoleato	$C_{19}H_{34}O_2$	0,10	294,50	$C_{19}H_{34}O_2 + (53/2)O_2 \rightarrow 19CO_2 + 17H_2O$	19
Metil-laurato	$C_{13}H_{26}O_2$	0,05	214,34	$C_{13}H_{26}O_2 + (37/2)O_2 \rightarrow 13CO_2 + 13H_2O$	13

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.



**Tabla 41.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 4 de ésteres.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
884,20	2,7848	2462,34	2,7851	2462,58	0,0101%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 42.** Composición química y estequiometría para la mezcla 5 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 5 DE ÉSTERES					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,70	270,45	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (49/2)O <sub>2</sub> → 17CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	17
Metil-oleato	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	0,10	296,50	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub> + 27O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 18H <sub>2</sub> O	19
Metil-linoleato	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,10	294,50	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (53/2)O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	19
Metil-laurato	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	0,10	214,34	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub> + (37/2)O <sub>2</sub> → 13CO <sub>2</sub> + 13H <sub>2</sub> O	13

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 43.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 5 de ésteres.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
892,00	2,7726	2473,12	2,7745	2474,81	0,0703%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 44.** Composición química y estequiometría para la mezcla 6 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 6 DE ÉSTERES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	$C_{17}H_{34}O_2$	0,80	270,45	$C_{17}H_{34}O_2 + (49/2)O_2 \rightarrow 17CO_2 + 17H_2O$	17
Metil-oleato	$C_{19}H_{36}O_2$	0,10	296,50	$C_{19}H_{36}O_2 + 27O_2 \rightarrow 19CO_2 + 18H_2O$	19
Metil-linoleato	$C_{19}H_{34}O_2$	0,05	294,50	$C_{19}H_{34}O_2 + (53/2)O_2 \rightarrow 19CO_2 + 17H_2O$	19
Metil-laurato	$C_{13}H_{26}O_2$	0,05	214,34	$C_{13}H_{26}O_2 + (37/2)O_2 \rightarrow 13CO_2 + 13H_2O$	13

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 45.** Factor de emisión del  $CO_2$  para la mezcla 6 de ésteres.

Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$				
	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de } CO_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
884,10	2,7724	2451,07	2,7730	2451,64	0,0220%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 46.** Composición química y estequiometría para la mezcla 7 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 7 DE ÉSTERES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	$C_{17}H_{34}O_2$	0,85	270,45	$C_{17}H_{34}O_2 + (49/2)O_2 \rightarrow 17CO_2 + 17H_2O$	17
Metil-oleato	$C_{19}H_{36}O_2$	0,10	296,50	$C_{19}H_{36}O_2 + 27O_2 \rightarrow 19CO_2 + 18H_2O$	19
Metil-linoleato	$C_{19}H_{34}O_2$	0,03	294,50	$C_{19}H_{34}O_2 + (53/2)O_2 \rightarrow 19CO_2 + 17H_2O$	19
Metil-laurato	$C_{13}H_{26}O_2$	0,02	214,34	$C_{13}H_{26}O_2 + (37/2)O_2 \rightarrow 13CO_2 + 13H_2O$	13

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 47.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 7 de ésteres.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
879,60	2,7731	2439,20	2,7727	2438,91	0,0137%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 48.** Composición química y estequiometría para la mezcla 8 de ésteres.

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 8 DE ÉSTERES					
Componente $i$	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fracción molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metil-palmitato	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,90	270,45	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (49/2)O <sub>2</sub> → 17CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	17
Metil-oleato	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	0,05	296,50	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub> + 27O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 18H <sub>2</sub> O	19
Metil-linoleato	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	0,03	294,50	C <sub>19</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> + (53/2)O <sub>2</sub> → 19CO <sub>2</sub> + 17H <sub>2</sub> O	19
Metil-laurato	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	0,02	214,34	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub> + (37/2)O <sub>2</sub> → 13CO <sub>2</sub> + 13H <sub>2</sub> O	13

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

**Tabla 49.** Factor de emisión del CO<sub>2</sub> para la mezcla 8 de ésteres.

Factor de emisión del dióxido de carbono $FE_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{kg de combustible}}$	$\frac{\text{kg de CO}_2}{\text{m}^3 \text{ de combustible}}$	
879,60	2,7702	2436,64	2,7713	2437,60	0,0408%

**Fuente:** Elaboración propia y simulación en Aspen HYSYS V8.8.

En las tablas 2; 4; 6; 8; 10; 12; 14 y 16, se puede observar la composición química y estequiometría para las mezclas 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 y 8 de hidrocarburos, respectivamente. En las tablas 18; 20; 22; 24; 26; 28; 30 y 32, se puede observar la composición química y estequiometría para las mezclas 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 y 8 de alcoholes, respectivamente.

En las tablas 34; 36; 38; 40; 42; 44; 46 y 48, se puede observar la composición química y estequiometría para las mezclas 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 y 8 de ésteres, respectivamente.

En las tablas 3; 5; 7; 9; 11; 13; 15 y 17, se puede observar los resultados del factor de emisión del dióxido de carbono, obtenidos mediante el modelo y Aspen HYSYS V8.8, para las mezclas 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 y 8 de hidrocarburos, respectivamente.

En las tablas 19; 21; 23; 25; 27; 29; 31 y 33, se puede observar los resultados del factor de emisión del dióxido de carbono, obtenidos mediante el modelo y Aspen HYSYS V8.8, para las mezclas 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 y 8 de alcoholes, respectivamente. En las tablas 35; 37; 39; 41; 43; 45; 47 y 49, se puede observar los resultados del factor de emisión del dióxido de carbono, obtenidos mediante el modelo y Aspen HYSYS V8.8, para las mezclas 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 y 8 de ésteres, respectivamente.

En las tablas 3; 5; 7; 9; 11; 13; 15; 17; 19; 21; 23; 25; 27; 29; 31; 33; 35; 37; 39; 41; 43; 45; 47 y 49, se muestra el porcentaje de error de la comparación de los resultados del factor de emisión del dióxido de carbono, obtenidos mediante el modelo y las simulaciones en Aspen HYSYS V8.8, para las 24 mezclas analizadas, en las cuales se puede observar que el mínimo y máximo porcentaje de error son 0,0039% y 0,0946%, los cuales corresponden a las mezclas 1 y 7 de alcoholes, respectivamente. De esta forma se valida el **modelo para cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles** (ecuaciones (18) y (19)) y a su vez prueba la hipótesis general. También mediante la deducción de las ecuaciones (18) y (19) se prueba cada una de las hipótesis específicas.

## CAPÍTULO V: DISCUSIÓN

Para las 24 mezclas analizadas, el porcentaje de error del factor de emisión del dióxido de carbono, al comparar los resultados obtenidos mediante el modelo y las simulaciones en Aspen HYSYS V8.8, es muy cercano a cero. Esto indica que las ecuaciones (18) y (19), son modelos predictivos que permiten cuantificar con gran precisión las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.

Para las mezclas 1; 2 y 3 de hidrocarburos, se ha trabajado con los mismos componentes (metano, etano y propano), variándose las fracciones molares. De esto se puede observar que a medida que se disminuye el valor de la fracción molar del componente que tiene más carbono (propano), disminuye también el factor de emisión del dióxido de carbono (véase las tablas 2; 3; 4; 5; 6 y 7). Lo mismo se puede observar de las mezclas 1; 2 y 3 de alcoholes y ésteres.

Para las mezclas 4; 5 y 6 de hidrocarburos, se ha trabajado con los mismos componentes (propano, butano y pentano), variándose las fracciones molares. Aquí también se puede observar que a medida que se disminuye el valor de la fracción molar del componente que tiene más carbono (pentano), disminuye también el factor de emisión del dióxido de carbono (véase las tablas 8; 9; 10; 11; 12 y 13). Lo mismo se puede observar de las mezclas 4; 5 y 6 de alcoholes y ésteres.

Para las mezclas 7 y 8 de hidrocarburos, se ha trabajado con los mismos componentes (metano, propano, butano y pentano), variándose las fracciones molares. De esto se observa que a medida que se aumenta el valor de la fracción molar del componente que tiene más carbono (pentano), aumenta también el factor de emisión del dióxido de carbono (véase las tablas 14; 15; 16 y 17). Lo mismo se puede observar de las mezclas 7 y 8 de alcoholes y ésteres.

De las 24 mezclas analizadas, se puede observar que los valores mínimo y máximo del factor de emisión del dióxido de carbono le corresponden a la mezcla 3 de alcoholes y a la mezcla 8 de hidrocarburos, respectivamente (véase las tablas 17 y 23).

## CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES

- La ecuación (18), indica que existe relación entre el factor de emisión del dióxido de carbono, los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono y las fracciones y masas molares de los componentes de un combustible.
- El factor de emisión es directamente proporcional a los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono.
- El factor de emisión del dióxido de carbono, es a la vez directa e inversamente proporcional a las fracciones molares de los componentes de un combustible.
- El factor de emisión del dióxido de carbono, es inversamente proporcional a las masas molares de los componentes de un combustible.
- Para cualquier combustible, a medida que se aumenta la fracción molar del componente que contiene más carbono, aumenta también el factor de emisión del dióxido de carbono.
- Para cualquier combustible, los valores de los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono se mantienen constantes, si no se cambian los componentes, aunque se puede variar las fracciones molares.
- Para cualquier combustible, al cambiar los componentes, necesariamente varían los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono.
- De esta forma se concluye la presente investigación, probando cada una de las hipótesis específicas y la hipótesis general y cumpliendo con los objetivos específicos y objetivo general.

## CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES

- Se recomienda realizar estudios similares a la presente investigación, donde se determine la relación entre el factor de emisión del dióxido de carbono con el calor de combustión de un combustible.
- Se recomienda a las industrias que se dedican a realizar procesos químicos, a utilizar el modelo que se ha obtenido en el presente trabajo, de esta forma podrán calcular con facilidad la cantidad de dióxido de carbono que emiten al quemar los combustibles que utilizan.
- Se recomienda fomentar el uso del simulador Aspen HYSYS V8.8 entre los docentes, estudiantes y egresados de la Facultad de Ingeniería química (FIQ) de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana (UNAP), en los proyectos de investigación; pues el Aspen HYSYS V8.8 representa una excelente herramienta para simular diversos procesos industriales en estado estacionario y dinámico, lo cual permite validar resultados obtenidos mediante el uso de modelos matemáticos complejos.
- Se recomienda a las autoridades actuales de la mencionada facultad, para que gestionen la adquisición de simuladores de procesos, para que los docentes del Departamento Académico de Ingeniería los utilicen cuando imparten las clases de los diferentes cursos de carrera (termodinámica 1 y 2, mecánica de fluidos transferencia de calor y masa, etc.); esto traerá en gran medida un mejor entendimiento de los mencionados cursos para los estudiantes.

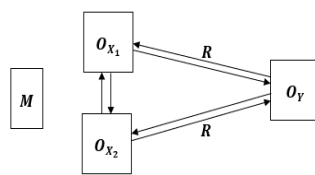
## CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN

- Factores de emisión para los diferentes tipos de combustibles fósiles y alternativos que se consumen en México. Coyoacán, México: Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, 2014. pp. 4, 7.
- FELDER, Richard y ROUSSEAU, Ronald. Principios elementales de los procesos químicos. 3a. ed. México: Limusa Wiley, 2004. pp. 48-51, 142, 465.  
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. 99 p.  
ISBN 10: 970-26-1198-9.  
ISBN 13: 978-970-26-1198-1.
- MASTERS, Gilbert y ELA, Wendell. Introducción a la ingeniería medioambiental. 3a. ed. España: Pearson Educación, S.A., 2008. 52 p.  
ISBN: 978-84-8322-444-1.
- 7 Metodologías para el Cálculo de Emisiones de Gases de Efecto Invernadero. Vasco, España: Departamento de Medio ambiente y Política Territorial del Gobierno de Vasco, 2013. 5 p.
- ROJAS, Freddy. Modelación numérica del transporte de contaminantes atmosféricos y su relación con las condiciones meteorológicas en Lima Metropolitana. Tesis (Doctoris Philosophiae en Ingeniería y Ciencias Ambientales). Lima, Perú: Universidad Nacional Agraria la Molina, Escuela de Posgrado, 2017. pp. 1-3.
- ZAMBRANO, Milly. Análisis de dispersión de contaminantes emitidos por motores que utilizan petróleo crudo como combustible. Curso académico (Máster en Energías Renovables y Sostenibilidad Energética). Barcelona, España: Universitat de Barcelona, 2017-2018. 2 p.



# ANEXOS

## Anexo 1. Matriz de consistencia.

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADORES	METODOLOGÍA
<p><b>Problema general</b></p> <p>¿Se podría mediante el diseño de un modelo cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles?</p>	<p><b>Objetivo general</b></p> <p>Diseñar un modelo para cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.</p>	<p><b>Hipótesis general</b></p> <p>Mediante el diseño de un modelo se podrá cuantificar las emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.</p>	<p><b>Variables independientes</b></p> <p><math>X_1</math>: estequiometría de las reacciones de combustión.</p>	<p><math>a_1, a_2, a_3, a_4, \dots, a_p</math>: coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono generado, en la quema de los componentes de un combustible. Para un combustible con <math>p</math> componentes. <math>1 \leq i \leq p</math>.</p>	<p><b>Tipo de investigación</b> Enfoque cuantitativo Descriptivo correlacional</p>  <p><math>O_{X_1}, O_{X_2}</math> y <math>O_Y</math>, son las observaciones obtenidas en cada una de las tres variables distintas de la muestra, <math>M</math> es la muestra y <math>R</math> la relación entre las variables.</p>
<p><b>Problemas específicos</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>¿Cuál es la relación que existe entre el factor de emisión y los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono?</li> <li>¿Cuál es la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las fracciones molares de los componentes de un combustible?</li> <li>¿Cuál es la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las masas molares de los componentes de un combustible?</li> </ul>	<p><b>Objetivos específicos</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Determinar la relación que existe entre el factor de emisión y los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono.</li> <li>Determinar la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las fracciones molares de los componentes de un combustible.</li> <li>Determinar la relación que existe entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las masas molares de los componentes de un combustible.</li> </ul>	<p><b>Hipótesis específicas</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Existe relación entre el factor de emisión y los coeficientes estequiométricos del dióxido de carbono.</li> <li>Existe relación entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las fracciones molares de los componentes de un combustible.</li> <li>Existe relación entre el factor de emisión del dióxido de carbono y las masas molares de los componentes de un combustible.</li> </ul>	<p><math>X_2</math>: composición química del combustible.</p>	<p><math>y_1, y_2, y_3, y_4, \dots, y_p</math>: fracciones molares de los componentes de un combustible.</p> <p><math>M_1, M_2, M_3, M_4, \dots, M_p</math>: masas molares de los componentes de un combustible.</p>	<p><b>Población</b> Lo representan todos los combustibles (población infinita).</p> <p><b>Muestra</b> La muestra será un máximo de 24, la cual estará conformada por los siguientes grupos: <math>G_1</math>: 8 mezclas de hidrocarburos. <math>G_2</math>: 8 mezclas de alcoholes. <math>G_3</math>: 8 mezclas de ésteres (biodiésel).</p>
			<p><b>Variable dependiente</b></p> <p><math>Y</math>: emisiones de dióxido de carbono en la quema de combustibles.</p>	<p><math>FE_{CO_2}</math>: factor de emisión del dióxido de carbono.</p>	

Anexo 2. Hojas de cálculo para las mezclas de hidrocarburos.

C19     $= (K9 * D9 + K10 * D10 + K11 * D11) * M5 / (D9 * E9 + D10 * E10 + D11 * E11)$

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 1 DE HIDROCARBUROS					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coefficiente estequiométrico del dióxido de carbono
	Fórmula molecular	Fración molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	$a_i$
Metano	CH <sub>4</sub>	0,60	16,04	CH <sub>4</sub> + 2O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,25	30,07	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + (7/2)O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,15	44,10	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

$M_{CO_2}$
kg/kmol
44,01

$$C_{a_i}H_{2a_i+2} + \left(\frac{3a_i+1}{2}\right)O_2 \rightarrow a_i \cdot CO_2 + (a_i+1)H_2O. \quad (9)$$

$$FE_{CO_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{CO_2}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p}. \quad (18)$$

Factor de emisión del dióxido de carbono					
$F_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	kg CO <sub>2</sub> /kg combustible	kg CO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> combustible	kg CO <sub>2</sub> /kg combustible	kg CO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> combustible	
0,9929	2,8714	2,8511	2,8713	2,8509	0,0051%

$$FE_{CO_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{CO_2} \rho_{combustible}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p}. \quad (1)$$

Mezcla 1 HC    Mezcla 2 HC    Mezcla 3 HC    Mezcla 4 HC    Mezcla 5 HC    Mezcla 6 HC    Mezcl ...

Anexo 3. Hojas de cálculo para las mezclas de alcoholes.

C19     $= (K9 * D9 + K10 * D10 + K11 * D11) * M5 / (D9 * E9 + D10 * E10 + D11 * E11)$

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 1 DE ALCOHOLES					
Componente <i>i</i>	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coeficiente estequiométrico del dióxido de carbono $a_i$
	Fórmula molecular	Fración molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	
Metanol	CH <sub>3</sub> OH	0,60	32,04	CH <sub>3</sub> OH + (3/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O	1
Etanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	0,25	46,07	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH + 3O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> O	2
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	0,15	60,10	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH + (9/2)O <sub>2</sub> → 3CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> O	3

$M_{CO_2}$
kg/kmol
44,01

$$C_{a_i} H_{2a_i+1} OH + \left(\frac{3a_i}{2}\right) O_2 \rightarrow a_i \cdot CO_2 + (a_i + 1) H_2O. \quad (10)$$

$$FE_{CO_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{CO_2}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p}. \quad (18)$$

$$FE_{CO_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{CO_2} \rho_{combustible}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p}. \quad (19)$$

Factor de emisión del dióxido de carbono					
$F_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		% Error
	kg CO <sub>2</sub> /kg combustible	kg CO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> combustible	kg CO <sub>2</sub> /kg combustible	kg CO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> combustible	
787,70	1,7158	1351,56	1,7159	1351,58	0,0039%

Mezcla 1 OH    Mezcla 2 OH    Mezcla 3 OH    Mezcla 4 OH    Mezcla 5 OH    Mezcla 6 OH    Mezi ...

Anexo 4. Hojas de cálculo para las mezclas de ésteres.

C19    X    ✓    fx    =(K9\*D9+K10\*D10+K11\*D11)\*M5/(D9\*E9+D10\*E10+D11\*E11)

TIPO DE COMBUSTIBLE: MEZCLA 1 DE ÉSTERES					
Componente i	Composición química del combustible			Estequiometría de las reacciones de combustión	Coefficiente estequiométrico del dióxido de carbono
	Fórmula molecular	Fración molar $y_i$	Masa molar $M_i$ kg/kmol	Reacción de combustión	$a_i$
Metil-palmitato	$C_{17}H_{34}O_2$	0,60	270,45	$C_{17}H_{34}O_2 + (49/2)O_2 \rightarrow 17CO_2 + 17H_2O$	17
Metil-oleato	$C_{19}H_{36}O_2$	0,25	296,50	$C_{19}H_{36}O_2 + 27O_2 \rightarrow 19CO_2 + 18H_2O$	19
Metil-linoleato	$C_{19}H_{34}O_2$	0,15	294,50	$C_{19}H_{34}O_2 + (53/2)O_2 \rightarrow 19CO_2 + 17H_2O$	19

$M_{CO_2}$
kg/kmol
44,01

$$C_{a_i}H_{2a_i}O_2 + \left(\frac{3a_i - 2}{2}\right)O_2 \rightarrow a_i \cdot CO_2 + a_i \cdot H_2O. \quad (11)$$
  

$$C_{a_i}H_{2a_i-2}O_2 + \left(\frac{3a_i - 3}{2}\right)O_2 \rightarrow a_i \cdot CO_2 + (a_i - 1)H_2O. \quad (12)$$
  

$$C_{a_i}H_{2a_i-4}O_2 + \left(\frac{3a_i - 4}{2}\right)O_2 \rightarrow a_i \cdot CO_2 + (a_i - 2)H_2O. \quad (13)$$
  

Factor de emisión del dióxido de carbono $F_{CO_2}$					
Densidad del combustible a CNPT kg/m <sup>3</sup>	Mediante el modelo		Mediante Aspen HYSYS V8.8		%
	kg CO <sub>2</sub> /kg combustible	kg CO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> combustible	kg CO <sub>2</sub> /kg combustible	kg CO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> combustible	
877,10	2,7921	2448,95	2,7924	2449,26	0,0109%

$$FE_{CO_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{CO_2}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p} \quad (18)$$
  

$$FE_{CO_2} = \frac{(a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 + \dots + a_p \cdot y_p) M_{CO_2} \rho_{combustible}}{y_1 \cdot M_1 + y_2 \cdot M_2 + y_3 \cdot M_3 + \dots + y_p \cdot M_p} \quad (19)$$

Mezcla 1 ésteres    Mezcla 2 ésteres    Mezcla 3 ésteres    Mezcla 4 ésteres    Mezcla 5 ésteres

**Anexo 5.** Esquema de simulación en Aspen HYSYS V8.8.

