



---

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**TESIS**

**HIDRODESOXIGENACIÓN DE ACEITE DE SOYA EN UN REACTOR  
DE LECHO FIJO PARA LA PRODUCCIÓN DE DIÉSEL VERDE**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE**

**INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTA**

**Eduardo Mercado Rodríguez**



**CDMX**

**2023**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**JURADO ASIGNADO:**

**PRESIDENTE:**           **PROFESOR: GARCIA GONZALEZ SERGIO ADRIAN.**

**VOCAL:**                   **PROFESOR: PIMENTEL ALARCON MIGUEL ANGEL.**

**SECRETARIO:**           **PROFESOR: RAMIREZ VERDUZCO LUIS FELIPE.**

**1ER. SUPLENTE:**       **PROFESOR: MAYA ROMERO AMPARO.**

**2DO. SUPLENTE:**       **PROFESOR: IRURETAGOYENA FERRER DIANA.**

**SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

**INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO.**

**ASESOR DEL TEMA:**

**DR. RAMIREZ VERDUZCO LUIS FELIPE**

---

**SUSTENTANTE:**

**MERCADO RODRÍGUEZ EDUARDO**

---



## ABREVIATURAS

MONOGRAMA	SIGNIFICADO
HDO	Hidrodesoxigenación
T	Temperatura
P	Presión
H <sub>2</sub> /AS	Relación hidrógeno/aceite de soya
LHSV	Liquid Hourly Space Velocity
°C	Grados Celsius
kg/cm <sup>2</sup>	Kilogramo por centímetro cuadrado
ft <sup>3</sup> /bbl	Pie cúbico por barril [US, líquido]
h	Hora
H <sub>2</sub>	Hidrógeno
AS	Aceite de soya
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
CO	Monóxido de carbono
H <sub>2</sub> O	Agua
IMP	Instituto Mexicano del Petróleo
NaOH	Hidróxido de sodio
KOH	Hidróxido de potasio
HDS	Hidrodesulfuración
HAV	Hidroprocesamiento de Aceites Vegetales
CS <sub>2</sub>	Disulfuro de carbono
DMDS	Dimetil disulfuro
%X <sub>T</sub>	Porcentaje de conversión de triglicéridos
R	Rendimiento hacia diésel verde
GEI	Gases de Efecto Invernadero
O <sub>2</sub>	Oxígeno molecular
DO	Desoxigenación
DCX	Descarboxilación
DC	Descarbonilación
GLP	Gasóleo ligero primario
mL/h	Mililitro por hora
g	Gramos
Mw	Peso molecular
FO	Función objetivo
M <sub>i</sub>	Número de carbono impar
M <sub>j</sub>	Número de carbono par
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Propano

---

## ÍNDICE

---

.....	1
0. RESUMEN.....	1
1.INTRODUCCIÓN.....	2
1.1. HIPÓTESIS.....	7
2. ANTECEDENTES.....	8
2.1. BIOENERGÍA Y BIOCOMBUSTIBLES.....	8
2.2. CICLO DEL CARBONO.....	10
2.3. DIÉSEL VERDE.....	12
2.4. DIFERENCIAS ENTRE EL DIÉSEL VERDE Y BIODIÉSEL.....	13
2.5. PRODUCCIÓN DEL DIÉSEL VERDE.....	15
3.OBJETIVO GENERAL Y PARTICULARES.....	17
3.1. OBJETIVO GENERAL.....	17
3.2. OBJETIVOS PARTICULARES.....	17
4. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.....	18
4.1. MATERIA PRIMA.....	18
4.1.1. DETERMINACIÓN DEL PESO MOLECULAR DE LOS TRIGLICERIDOS PRESENTES EN EL ACEITE DE SOYA.....	20
4.1.2. TRANSESTERIFICACIÓN.....	21
4.1.3. SEPARACIÓN, LAVADO Y CROMATOGRAFÍA DE LA FASE ORGÁNICA.....	22
4.2. CATALIZADORES.....	24
4.3. HIDRODESOXIGENACIÓN DEL ACEITE DE SOYA EN LA MICROPLANTA 4-3 DEL IMP.....	25
4.4. CONDICIONES DE OPERACIÓN.....	30
4.4.1 FACTORES Y NIVELES.....	30
4.4.2. EJECUCIÓN DEL EXPERIMENTO.....	31
4.4.3. ESTUDIO ESTADÍSTICO DE LOS DATOS.....	34
4.5. CÁLCULO DEL %XTRIGLICÉRIDOS Y RENDIMIENTO HACIA DIÉSEL VERDE.....	35
4.6. PLANTEAMIENTO DE ECUACIONES PARA EL ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE CONTRIBUCIÓN DE CADA UNA DE LAS RUTAS DE REACCIÓN.....	36
4.7. NEXO ENTRE LA MASA DEL ACEITE PROCESADO Y LA MASA DE LAS PARAFINAS.....	42
5. RESULTADOS.....	47
5.1. EXPERIMENTO REALIZADO EN MICROPLANTA.....	51
5.2. EFECTOS DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN SOBRE LA CONVERSIÓN DE TRIGLICÉRIDOS, RENDIMIENTO HACIA DIÉSEL VERDE Y RUTAS DE REACCIÓN.....	61
5.3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE LOS MODELOS (CONVERSIÓN, RENDIMIENTO).....	69
6. DISCUSIÓN.....	73
7.CONCLUSIONES.....	76
8.REFERENCIAS.....	78

Apéndice A. ....	79
Apéndice B. ....	84
Apéndice C. ....	96




---

## LISTA DE TABLAS

---

<b>Tabla 1.1.</b> <i>Lista de productores de diésel verde. Adaptada de (3,4).</i> .....	5
<b>Tabla 4.1.</b> <i>Ácidos grasos del aceite de soya para el cálculo del peso molecular. Adaptado de (4).</i> .....	20
<b>Tabla 4.2.</b> <i>Datos utilizados para la determinación de volúmenes y pesos utilizados en la transesterificación. Realizada por el autor.</i> .....	21
<b>Tabla 4.3.</b> <i>Condiciones para la etapa de humectación. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.</i> .....	26
<b>Tabla 4.4.</b> <i>Condiciones para la etapa de activación. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.</i> ..	27
<b>Tabla 4.5.</b> <i>Condiciones de operación previo al hidrotatamiento. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.</i> .....	27
<b>Tabla 4.6.</b> <i>Condiciones de operación para el hidrotatamiento. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.</i> .....	28
<b>Tabla 4.7.</b> <i>Factores y niveles de control y condiciones de operación utilizadas. Realizada por el autor.</i> .....	31
<b>Tabla 4.8.</b> <i>Resultados de la corrida experimental Balance 1. Realizado por el autor.</i> .....	40
<b>Tabla 5.1.</b> <i>Contenido de ácidos grasos presentes en el aceite de soya obtenidos por la cromatografía de gases. Realizada por el autor.</i> .....	48
<b>Tabla 5.2.</b> <i>Resultados experimentales del análisis de azufre total y relación de temperatura por balance. Realizada por el autor.</i> .....	49
<b>Tabla 5.3.</b> <i>Significancia de los coeficientes en la conversión (factores). Realizada por el autor.</i> .....	51
<b>Tabla 5.4.</b> <i>Significancia de los coeficientes en el rendimiento hacia diésel verde (factores). Realizada por el autor.</i> .....	51
<b>Tabla 5.5.</b> <i>Resultados experimentales del porcentaje de conversión y rendimiento. Realizada por el autor.</i> .....	52
<b>Tabla 5.6.</b> <i>Estadísticas de la regresión de la conversión. Realizada por el autor.</i> .....	54
<b>Tabla 5.7.</b> <i>Análisis ANOVA de la conversión. Realizada por el autor.</i> .....	55
<b>Tabla 5.8.</b> <i>Significancia de los coeficientes en la conversión. Realizada por el autor.</i> .....	56
<b>Tabla 5.9.</b> <i>Valores empleados para derivar el modelo de conversión a través de la herramienta "Solver" de Excel®. Realizada por el autor.</i> .....	57
<b>Tabla 5.10.</b> <i>Resultados de coeficientes y función objetivo una vez aplicado el solver. Realizada por el autor.</i> .....	59
<b>Tabla 5.11.</b> <i>Estadísticas de la regresión de rendimiento hacía diésel verde. Realizada por el autor.</i> .....	59
<b>Tabla 5.12.</b> <i>Análisis ANOVA del rendimiento hacía diésel verde. Realizada por el autor.</i> .....	60
<b>Tabla 5.13.</b> <i>Significancia de los coeficientes en el rendimiento hacía diésel verde. Realizada por el autor.</i> 60	
<b>Tabla 5.14.</b> <i>Resultados de las funciones objetivo con cada perturbación realizada del modelo de predicción para la conversión. Realizada por el autor.</i> .....	69
<b>Tabla 5.15.</b> <i>Resultados de las funciones objetivo con cada perturbación realizada del modelo de predicción para el rendimiento. Realizada por el autor.</i> .....	71



## Lista de figuras

<b>Figura 2.1.</b> <i>Ciclo del carbono. Adaptada a partir de (10)</i> .....	11
<b>Figura 2.2.</b> <i>Proceso de producción de diésel verde. Extraída de (9)</i> .....	13
<b>Figura 2.3.</b> <i>Rutas tecnológicas para la transformación de triglicéridos.(13)</i> .....	14
<b>Figura 2.4.</b> <i>Rutas de reacción del proceso de hidrogenación. Extraída de (4)</i> .....	16
<b>Figura 4.1.</b> <i>Certificado de calidad del aceite de soya. Extraída del certificado de calidad</i> .....	19
<b>Figura 4.2.</b> <i>Diagrama del proceso de transesterificación. Extraída de (15)</i> .....	22
<b>Figura 4.3.</b> <i>Diagrama del proceso de separación. Realizado por el autor</i> .....	23
<b>Figura 4.4.</b> <i>Distribución del lecho combinado en la zona de reacción del reactor tubular de la micro planta 4-3. Extraída del Protocolo de experimentación del IMP</i> .....	24
<b>Figura 4.5.</b> <i>Esquema de la planta piloto para producción de diésel verde a partir de HDO del aceite de soya. (Proporcionado por el IMP)</i> .....	25
<b>Figura 4.6.</b> <i>Metodología para determinar la contribución en cada ruta de reacción. Realizado por el autor</i> .....	36
<b>Figura 4.7.</b> <i>Rotura del triglicérido. Nota: Con R', R'', R''' = -(CH) n-CH<sub>3</sub>. Adaptada de ((15)</i> .....	42
<b>Figura 4.8.</b> <i>Mecanismo de reacción para un ácido graso saturado. Ácido palmítico=C16:0= Ácido hexadecanoico. Realizada por el autor</i> .....	44
<b>Figura 4.9.</b> <i>Mecanismo de reacción de un ácido graso con una insaturación. Ácido oleico=C18:1= Ácido cis-9-octadecenoico (Z). Realizada por el autor</i> .....	44
<b>Figura 4.10.</b> <i>Ácido graso con dos insaturaciones. Ácido linoleico=C18:2=Ácido cis,cis-9,12-octadecadienoico (Z, Z). Realizada por el autor</i> .....	45
<b>Figura 4.11.</b> <i>Ácido graso con tres insaturaciones. Ácido linolénico=C18:3= Ácido 9,12,15-octadecatrienoico. Realizada por el autor</i> .....	45
<b>Figura 5.1.</b> <i>Cromatograma de biodiésel de aceite de soya obtenido en el laboratorio de análisis químicos del IMP. Proporcionada por el IMP</i> .....	49
<b>Figura 5.2.</b> <i>Efecto de la presión en el proceso de hidrogenación del aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor</i> .....	61
<b>Figura 5.3.</b> <i>Efecto de la presión en el proceso de hidrogenación del aceite de soya. Porcentaje de participación de las reacciones. Realizado por el autor</i> .....	62
<b>Figura 5.4.</b> <i>Efecto de la temperatura en el proceso de hidrogenación de aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor</i> .....	63
<b>Figura 5.5.</b> <i>Efecto de la temperatura en el proceso de hidrogenación del aceite de soya. Porcentaje de participación de las reacciones. Realizado por el autor</i> .....	64
<b>Figura 5.6.</b> <i>Efecto de la cantidad de hidrógeno utilizada en el proceso de hidrogenación de aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor</i> .....	65
<b>Figura 5.7.</b> <i>Efecto de la cantidad de hidrógeno utilizada en el proceso de hidrogenación de aceite de soya. Porcentaje de participación de las reacciones. Realizado por el autor</i> .....	66
<b>Figura 5.8.</b> <i>Efecto del LHSV utilizado en el proceso de hidrogenación de aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor</i> .....	67
<b>Figura 5.9.</b> <i>Efecto del LHSV utilizado en el proceso de hidrogenación de aceite de soya. Conversión y Rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor</i> .....	68

<b>Figura 5.10.</b> <i>Análisis de sensibilidad de los coeficientes del modelo de predicción para la conversión.</i> <i>Realizada por el autor.</i> .....	70
<b>Figura 5.11.</b> <i>Análisis de sensibilidad de los coeficientes del modelo de predicción para el rendimiento.</i> <i>Realizada por el autor.</i> .....	71



## 0. RESUMEN.

En este trabajo se presentarán los resultados obtenidos durante la hidrodeshidrogenación (HDO) de aceite de soya para producir diésel verde. La experimentación se llevó a cabo en un reactor de lecho fijo a escala de microplanta, donde se varió la temperatura (T), presión (P), relación hidrógeno/aceite de soya ( $H_2/AS$ ), y espacio velocidad, por sus siglas en inglés, liquid hourly space velocity (LHSV).

En los siguientes intervalos: T de 330 a 360°C, P de 10 a 50 kg/cm<sup>2</sup>,  $H_2/AS$  de 2245 a 5614 ft<sup>3</sup>/bbl y LHSV de 0.75 a 1.75 1/h.

La experimentación constó de 21 corridas, en las cuales se realizó el balance de materia correspondiente. En donde al reactor se alimentó aceite de soya e hidrógeno ( $H_2$ ), mientras que a la salida del reactor se obtuvieron hidrocarburos en fase gas y líquida, así como  $CO_2$ , CO y  $H_2O$ . Los experimentos se realizaron en una microplanta del Instituto Mexicano del Petróleo (IMP).

Adicionalmente, en este trabajo se desarrollaron correlaciones para estimar la conversión y rendimiento en función de las variables de operación.



## 1.INTRODUCCIÓN.

Cuanta más actividad económica se produce, mayor es el consumo de energía y de servicios como transporte, lo que implica más costes ambientales. El desarrollo industrial induce una fuerte reactivación socioeconómica y mejoras en la calidad de vida de la población, pero también tiene el potencial de generar cambios significativos que resultan en la alteración de ecosistemas, la aparición de diversas formas de contaminación y otros desafíos ambientales y sociales.

El cambio climático es uno de los mayores retos de nuestra era. Sin embargo, la necesidad de asegurar acceso a la energía es igual de importante debido a que permite mejorar la calidad de vida y el desarrollo económico. Por tanto, es esencial abordar el cambio climático como parte de la agenda de desarrollo sostenible. El avance constante en la evolución de nuevas tecnologías ha infundido una sensación de confianza y expectativa en cuanto a la posibilidad de alcanzar estos objetivos dentro del sistema energético (1).

En la actualidad, los combustibles fósiles son las principales fuentes de energía a nivel mundial. La fuerte dependencia de esta fuente es una de las principales actividades que ocasionan un impacto al medio ambiente, tales como la emisión de CO<sub>2</sub>, metano y otros contaminantes. Asimismo, provoca efectos adversos en la sociedad, tales como conflictos sociales, políticos y económicos.

Los combustibles fósiles (carbón, petróleo y gas) son los que más contribuyen al cambio climático mundial, ya que representan más del 75 % de las emisiones mundiales de gases de efecto invernadero y casi el 90 % de todas las emisiones de dióxido de carbono. Las emisiones globales de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) de los combustibles fósiles



y la industria han aumentado constantemente en las últimas dos décadas (1).

De acuerdo con la literatura (1), el uso eficiente de la biomasa para la producción de combustibles como biodiésel y bioetanol se ha vuelto importante a nivel mundial. Los biocombustibles cuentan con la capacidad de sustituir o complementar los actuales combustibles de gasolina y diésel, lo que conlleva a una disminución en el consumo de petróleo y a la conservación de sus reservas a nivel global.

Dado el aumento en la necesidad de energía y los impactos de la sobreexplotación de los combustibles fósiles, se observa una inclinación hacia la exploración de fuentes energéticas renovables y respetuosas con el entorno, como la energía eólica, geotérmica, hidroeléctrica, solar, biomasa y biocarburantes. De la transformación de la biomasa se pueden obtener diferentes tipos de biocombustibles, entre los cuales se encuentra el bioetanol, bioturbosina, biodiésel, diésel verde o diésel renovable. Este trabajo se enfocará en el diésel verde.

En la actualidad, un 76.7 % de la soya se dedica a piensos (alimento seco que se brinda al ganado), un 19.9% a alimentación humana, procesada o no, y un 3,34% a biocombustibles y otros usos industriales(2).

El uso de aceite de soya supondría una alternativa para la realización de biocombustibles ya que en la industria principalmente el aceite de palma es utilizado para la producción de estos.



El uso del aceite de palma como biocombustible no ha parado de aumentar, y en la actualidad, supone el 35% del total de los biocombustibles, siendo la principal materia prima de la industria.

Sin embargo, los recientes cambios en las políticas energéticas, sobre todo en Europa, probablemente harán que la cuota del aceite de palma se reduzca. En este escenario, la soya, se postula como el sustituto perfecto.

Un incremento en el comercio de biocombustibles implicaría la expansión de cultivos. Por un lado, el utilizar aceite de soya podría brindar mayores ganancias económicas, desarrollo rural, reducción de pobreza y menores emisiones de gases con efecto invernadero respecto a los combustibles fósiles. Los impactos positivos y los costos sobre el desarrollo sustentable variarían de acuerdo con el tipo de cultivo energético, la tecnología de conversión y las condiciones que tiene México.

Recientemente, ha habido varias tecnologías desarrolladas por operadores de refinerías y empresas de desarrollo de tecnología, cuyo objetivo es procesar las materias primas biológicas, como los aceites vegetales y las grasas animales, en diésel renovable (3).

En cuanto a las tecnologías comerciales que existen actualmente para la producción de diésel verde en el mundo, las hay de diferentes capacidades y ubicación geográfica. En la Tabla 1.1 se ilustra una lista de los principales productores de diésel verde, su producto, capacidades de producción y tecnologías en las que se basan (3,4).



**Tabla 1.1.** Lista de productores de diésel verde. Adaptada de (3,4).

Compañía	Materia Prima	Producto	Capacidad de producción anual (Millones de Toneladas)	Tecnología	Lugar
<b>Renewable Energy Group, Inc.</b>	Ácidos grasos de cadena corta y larga	Diésel renovable	0.2	Bio-Synfining	EE. UU.
<b>UOP/Eni</b>	Aceites vegetales, grasas animales y aceite de cocina usado	Diésel verde	0.5 a 1	EcofiningTM	Italia
<b>Diamond Green</b>	Aceites vegetales no comestibles y grasas animales	Diésel verde Honeywell	0.4	EcofiningTM	EE. UU.
<b>UPM Biofuels</b>	Tall oil crudo*	Diésel renovable BioVerno	0.1	HydroFlexTM	Finlandia
<b>Preem</b>	Desconocido	Diésel Preem evolution	Desconocido	HydroFlexTM	Suecia
<b>Cetane Energy LLC</b>	Desconocido	Diésel renovable	Desconocido	Hidrotratamiento	EE. UU.
<b>Neste</b>	Aceites vegetales y grasas animales de desecho	Diésel renovable Neste MY	2.6	NEXBTL	Finlandia, Holanda, Singapur
<b>Total S.A.</b>	-	Diésel renovable	0.5	Vegan® Axens	de Francia
<b>AltAir Paramount</b>	Aceites vegetales no comestibles y desecho agrícola	Turbosina renovable	0.15	UOP	EE. UU.
<b>Petrixto Oil &amp; Gas</b>	Desconocido	Turbosina renovable	0.5	UOP	Emiratos Árabes Unidos

El diésel verde se genera a partir de una reacción de hidrodeseoxigenación (HDO); en la cual, se remueve oxígeno en forma de agua usando catalizadores y variables de operación definidas, obteniendo un combustible para usarse en un motor de diésel (5).

El diésel verde es una mezcla de parafinas de cadena lineal y ramificada con números de carbono típicos de C12-C24 y químicamente compatibles con el diésel de origen fósil. Por lo tanto, el diésel renovable se puede utilizar como combustible en motores de combustión tipo diésel (3).



El proceso de refinación de las materias primas biológicas comprende las unidades de pretratamiento, las unidades de hidropocesamiento de aceites vegetales (HAV) para HDO e isomerización, y las unidades de separación de productos (3). De esta forma, aunque se pueden utilizar diversos tipos de biomasa para la obtención de biocombustibles, el proceso HDO es el más utilizado y reportado en la literatura para la obtención de diésel verde a partir de aceites vegetales.

En el HAV la literatura se enfoca más en el estudio de las propiedades obtenidas de diésel verde. Teniendo como variables la temperatura, presión, espacio velocidad del líquido por hora (LHSV) y la relación  $H_2/AS$ . Tomando en cuenta el tipo del catalizador y reactor que se utilice.

Por otro lado, los catalizadores a base de sulfuros requieren la adición de agentes sulfurantes, por ejemplo, disulfuro de carbono ( $CS_2$ ) o dimetil disulfuro (DMDS), en la alimentación líquida para evitar la desactivación del catalizador durante el proceso de desoxigenación (5).

Por consiguiente, nos enfocaremos en la producción de diésel verde mediante la hidrodeshoxigenación del aceite de soya, relacionando la conversión/rendimiento prediciendo ecuaciones por métodos estadísticos; teniendo como variables principales, las condiciones de operación del reactor; T, P, LHSV y relación  $H_2/AS$ , desarrollando así las correlaciones que representen la reacción de HDO, es decir que modelen el comportamiento de las respuestas seleccionadas en base a los cuatro factores bajo estudio.



## 1.1. HIPÓTESIS

Al llevar a cabo la reacción en un reactor de lecho fijo bajo condiciones severas (temperatura, presión, LHSV,  $H_2/AS$ ), se espera alcanzar un alto porcentaje de conversión de triglicéridos ( $\%X_T$ ). A medida que el LHSV se incremente se obtiene una mayor cantidad de productos en menor tiempo y la conversión de triglicéridos disminuirá.

Se pueden establecer las siguientes predicciones en función de las variables de operación:

1. A medida que se incremente el LHSV, se obtendrá una mayor cantidad de productos en menos tiempo, pero la conversión de triglicéridos disminuirá.
2. A temperaturas más bajas, la conversión de triglicéridos será menor.
3. A menor presión, la conversión de triglicéridos también será menor.



## 2. ANTECEDENTES

A raíz de la contaminación atmosférica y el fenómeno de cambio climático, que tienen su origen en el empleo de combustibles fósiles, y a medida que crece la necesidad global de energía y petróleo, se ha suscitado un notable enfoque en la exploración y avance de los "biocombustibles", entre los que se encuentra el diésel verde.

En el siguiente apartado se revisarán los temas relacionados con la producción de biocombustibles, resaltando la producción de diésel verde.

### 2.1. BIOENERGÍA Y BIOCMBUSTIBLES.

El crecimiento poblacional en México ha generado un aumento en la demanda y el consumo de energía. La fuente principal de energía nacional está basada en los combustibles fósiles. A diferencia de otros energéticos la bioenergía puede sustituir las emisiones de los combustibles fósiles al contribuir de manera efectiva al sector energético si su producción genera menos CO<sub>2</sub> (6).

La bioenergía es la energía obtenida de la biomasa. La biomasa proviene de los seres vivos. Los biocombustibles se obtienen a partir de la transformación de la biomasa. Esta ventaja a veces se malinterpreta como una limitación, afirmando que la bioenergía es una "fuente local" (7).

Algunas características de la biomasa son:

- La biomasa puede ser almacenada, lo que permite planificar y dar certidumbre a su suministro.
- Puede ser transformada para aumentar su densidad energética y facilitar su manejo.



- Puede ser producida y utilizada local o regionalmente, evitando la necesidad de utilizar transporte de largas distancias.

También se le asocian ventajas ambientales como la mitigación de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI), ya que el CO<sub>2</sub> que emite la biomasa al quemarse, es el mismo que se absorbe en las plantas mediante la fotosíntesis y no aumenta la concentración de CO<sub>2</sub> en la atmósfera, a diferencia del CO<sub>2</sub> no-biogénico proveniente de la quema de combustibles fósiles. El uso de la bioenergía también puede generar beneficios sociales y económicos como diversificar las economías rurales y crear oportunidades de empleo a lo largo de la cadena de producción.

Existen varios tipos de biocombustibles, a los cuales se les clasifica de acuerdo con el insumo o materia prima y a la tecnología empleada para producirlos (8). Se clasifican de la siguiente manera:

- Primera generación: Son de procedencia agrícola y están conformados por las partes alimenticias de las plantas, las cuales tienen un alto contenido de almidón, azúcares y aceites. Ejemplos de estas materias son aceite de semilla de girasol, **aceite de soya**, aceite de palma, aceite de ricino, aceite de semilla de algodón, aceite de coco, aceite de maní o cacahuate, entre otros (8).
- Segunda generación: Los insumos son residuos agrícolas y forestales compuestos principalmente por celulosa. Ejemplos de ellos son el bagazo de la caña de azúcar, el rastrojo de maíz (tallo, hojas y olote), paja de trigo, aserrín, hojas y ramas secas de árboles, etcétera (8).



- Tercera generación: Los insumos son vegetales no alimenticios de crecimiento rápido y con una alta densidad energética almacenada en sus componentes químicos, por lo que se les denomina “cultivos energéticos”. Entre estos están los árboles y plantas de crecimiento rápido y algas (8).
- Cuarta generación: Los biocombustibles son producidos a partir de bacterias genéticamente modificadas, las cuales emplean anhídrido carbónico ( $\text{CO}_2$ ) o alguna otra fuente de carbono para la obtención de los biocombustibles (8).

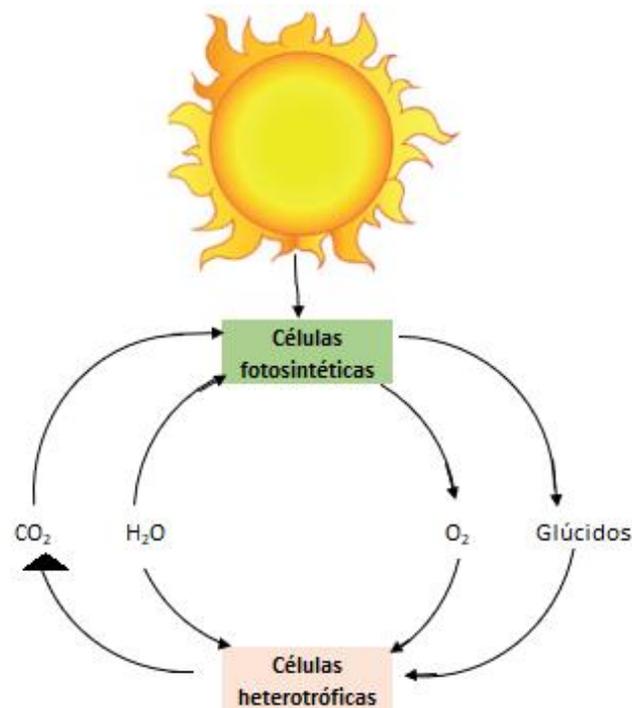
## 2.2. CICLO DEL CARBONO.

Las plantas desempeñan el papel de celdas solares, aprovechando la fotosíntesis para capturar la energía solar y convertirla en carbohidratos. A través de este proceso, consumen agua y  $\text{CO}_2$ , además de liberar oxígeno ( $\text{O}_2$ ). La evolución del  $\text{CO}_2$  en la atmósfera se rastrea mediante el ciclo del carbono en la naturaleza. La conversión de la energía solar por parte de organismos fotosintéticos en compuestos orgánicos, junto con la síntesis de  $\text{O}_2$ , representa la principal fuente de energía biológica. Los organismos heterótrofos aeróbicos utilizan el  $\text{O}_2$  para descomponer los productos orgánicos en  $\text{CO}_2$  y agua, cerrando el ciclo. De esta manera, el dióxido de carbono regresa a la atmósfera, listo para ser recapturado por los organismos fotosintéticos en un ciclo continuo (9).



Al usar la biomasa como fuente primaria, el ciclo del carbono (Figura 2.1) se cierra, así que se mantiene constante la cantidad total de carbono en la biosfera. En cambio, cuando se expulsan derivados del petróleo, se introduce en la atmósfera carbono almacenado en el subsuelo. Así que el uso de biocombustible es una solución al problema de  $\text{CO}_2$  en la atmósfera (9). Haciendo que el uso de la biomasa pueda ser una solución para disminuir la cantidad de  $\text{CO}_2$  en la atmósfera.

**Figura 2.1.** Ciclo del carbono. Adaptada a partir de (10)





### 2.3. DIÉSEL VERDE.

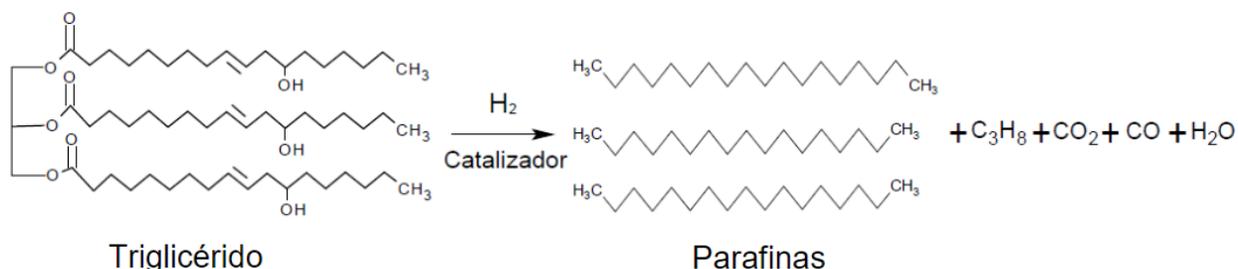
El denominado diésel renovable (o diésel verde) puede ser producido por hidrotratamiento de aceites vegetales, grasas animales o aceite de microalgas los cuales se convierten en hidrocarburos parafínicos con características que cumplen la norma ASTM D975 que aplica para los combustibles diésel (11,12).

El aceite de origen vegetal, específicamente el aceite de soya se puede someter a un proceso de reacción con hidrógeno con el objetivo de producir un biocombustible conocido como diésel verde. Este proceso implica el uso de un catalizador para lograr la transformación de los componentes del aceite en parafinas lineales, con pequeña o nula presencia de compuestos aromáticos, oxigenados o azufrados. Sin embargo, una desventaja del producto es que sus pobres propiedades de flujo en frío en comparación con el diésel tradicional de origen fósil, lo que limita su uso directo en motores de combustión en temporadas invernales.

Al proceso de la Figura 2.2 se le llama hidrodeseoxigenación cuando se aplican a hidrocarburos oxigenados, como aceites vegetales ya que conducen a la eliminación de oxígeno por hidrogenación, descarboxilación y descarbonilación. Por lo tanto, se forman hidrocarburos de alto cetano, que son completamente desoxigenados adecuados para su uso en motores diésel (13). Un número de cetano alto favorecerá la eficiencia de la combustión y eficacia del motor, optimizando el consumo de combustible; reduciendo la emisión de gases contaminantes.



**Figura 2.2.** *Proceso de producción de diésel verde. Extraída de (9).*



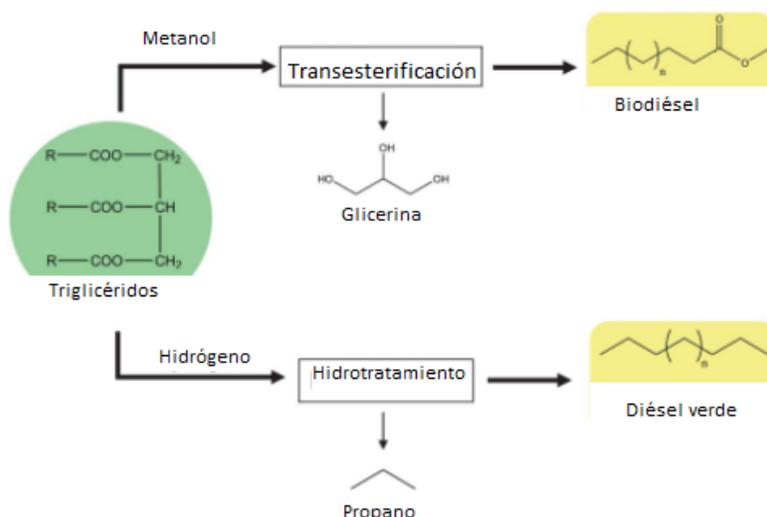
La conversión de los triglicéridos en presencia de  $\text{H}_2$  involucra reacciones complejas con etapas paralelas o consecutivas, incluyendo desintegración, hidrogenación, descarboxilación, descarbonilación, reducción, formación de alcoholes, compuestos cíclicos y ésteres (9).

#### 2.4. DIFERENCIAS ENTRE EL DIÉSEL VERDE Y BIODIÉSEL.

El diésel verde y el biodiésel presentan diferencias químicas y son generados a través de distintos procesos, tal como se ilustra en la Figura 2.3. Al comparar el diésel verde con el biodiésel, surgen algunos puntos de interés: Debido a su fuente biológica el biodiésel contiene grandes cantidades de insaturaciones en la cadena carbonada haciéndolo más susceptible a la oxidación. Los subproductos de la oxidación del diésel perjudican diferentes partes del motor, ya sea por productos de polimerización (depósitos); por la presencia de grupos funcionales ácidos, aldehídos y alcoholes (corrosión). Así como pobres propiedades en frío, que generan problemas de solidificación a bajas temperaturas (14).



**Figura 2.3.** *Rutas tecnológicas para la transformación de triglicéridos.*(13).



Como se muestra en la Figura 2.3 ambas tecnologías utilizan triglicéridos como materia prima, pero difieren en los reactivos utilizados (metanol contra hidrógeno), los subproductos generados (glicerol contra propano), el producto combustible final obtenido (biodiésel contra diésel verde), así como en las condiciones de reacción y catalizadores utilizados.

El metanol y el hidrógeno generalmente se derivan de combustibles fósiles y, en consecuencia, se deben hacer esfuerzos para obtener estos reactivos de fuentes de biomasa para reducir el costo total del biocombustible. Si bien las soluciones en la industria del biodiésel implican la sustitución del metanol por etanol derivado de biomasa como agente de esterificación, las tecnologías de hidrotratamiento pueden reducir drásticamente el consumo externo de hidrógeno mediante el empleo de subproductos y/o residuos generados durante el proceso como fuentes de este gas (13).



## 2.5. PRODUCCIÓN DEL DIÉSEL VERDE.

Los aceites vegetales constituyen la materia prima para la producción de diésel verde, estos están formados de compuestos orgánicos (triglicéridos), los cuales se pueden caracterizar a través de su contenido de ácidos grasos y contenido de oxígeno. La remoción de oxígeno se requiere para producir combustibles líquidos con características similares al diésel fósil, con alta estabilidad tanto térmica como oxidativa.

El proceso por el cual es posible la remoción del heteroátomo de oxígeno de aceites vegetales utilizados como alimentación para la producción del diésel verde se denomina desoxigenación. Existen 3 rutas de reacción para la desoxigenación catalítica de ácidos grasos a alcanos; descarboxilación (DCX), descarbonilación (DC) e hidrodeseoxigenación (HDO), que generalmente ocurren a condiciones de temperatura de reacción de 350-450 °C y 5-15 MPa de presión parcial de H<sub>2</sub> (5).

La conversión de triglicéridos ocurre en dos etapas ambas a presión de hidrógeno; en la primera etapa, ocurre el rompimiento de triglicéridos y saturación de dobles enlaces para formar propano y una mezcla de ácidos carboxílicos. En la segunda etapa, se elimina el oxígeno mediante las reacciones DO, DCX y DC. La distribución de las parafinas que salen del reactor refleja la distribución de ácidos grasos en el triglicérido.

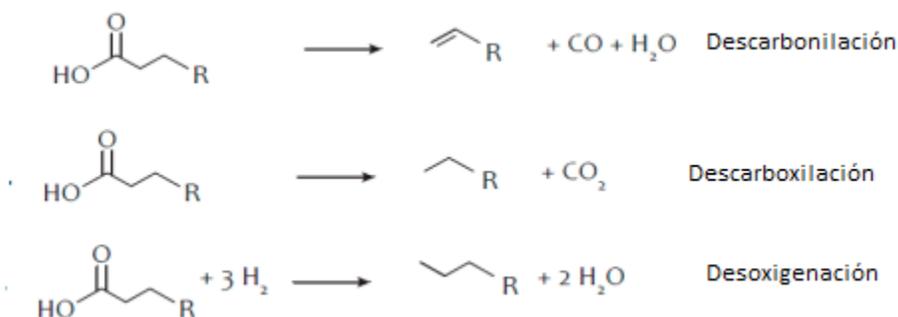
La diferencia más significativa se refiere a la presencia de n-parafinas con átomos de carbono impares que surgen de la eliminación del oxígeno de la molécula de triglicéridos a través de la descarbonilación (DC)/descarboxilación (DCX), lo que conduce a la formación de n-parafinas con un átomo de carbono menos que los ácidos grasos presentes en el triglicérido.



De manera diferente, cuando el oxígeno se elimina como H<sub>2</sub>O, la n-parafina producida presenta el mismo número de átomos de carbono del ácido graso correspondiente (5).

Primero la reacción de hidrogenación de los triglicéridos insaturados (doble enlace C=C) para formar triglicéridos saturados; seguido de la hidrogenólisis de triglicéridos saturados que da como resultados ácidos grasos, propano. Finalmente, el ácido graso experimenta las siguientes reacciones DO, una reacción exotérmica, para eliminar el oxígeno en forma de agua y producir n-alcano con el mismo número de carbono que el ácido graso correspondiente, DC y DCX, reacciones endotérmicas, para eliminar el oxígeno en forma de CO y H<sub>2</sub>O o CO<sub>2</sub>, respectivamente (5). En la Figura 2.4 se muestran las rutas de reacción del proceso de hidrodeseoxigenación.

**Figura 2.4.** Rutas de reacción del proceso de hidrodeseoxigenación. Extraída de (4)





### **3.OBJETIVO GENERAL Y PARTICULARES.**

En esta sección se especifican los objetivos del presente trabajo de investigación.

#### **3.1. OBJETIVO GENERAL.**

Determinar la influencia de las condiciones de operación sobre la conversión de triglicéridos y rendimiento hacia diésel verde en el proceso HDO.

#### **3.2. OBJETIVOS PARTICULARES.**

1. Llevar a cabo la prueba en la microplanta bajo las condiciones de operación establecidas, considerando la temperatura, presión, LHSV y relación  $H_2/AS$ .

2. Realizar la caracterización de la materia prima y los productos de reacción en fase gas y líquida.

3. Verificar la validez de la información experimental obtenida de la microplanta del Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) mediante la comparación con documentos bibliográficos previamente realizados.

4. Identificar los factores que tienen una mayor influencia en las respuestas obtenidas.

5. Desarrollar correlaciones para el porcentaje de conversión de triglicéridos ( $\%X_T$ ) y el rendimiento hacia diésel verde ( $R$ ) en función de las variables de operación.

6. Validar las correlaciones utilizando un análisis estadístico.



#### **4. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.**

Para la hidrodeshidrogenación de aceite de soya (AS), se llevó a cabo un programa experimental donde se variaron las condiciones de operación (LHSV, temperatura, presión y relación  $H_2/AS$ ). En este capítulo se describirán las etapas que engloban al proceso de HDO, así como la materia prima, materiales y equipos necesarios para la realización del proceso.

Se detallará el procedimiento experimental que se llevó a cabo para poder alcanzar los objetivos planteados anteriormente.

##### **4.1. MATERIA PRIMA.**

En el presente estudio, se empleó aceite de soya suministrado por Interquímica S.A. de C.V. con el propósito de llevar a cabo los ensayos de hidrodeshidrogenación. Este aceite se adquirió refinado y de grado alimenticio. La Figura 4.1 muestra algunas propiedades del aceite de soya determinadas por la compañía Interquímica S.A. de C.V. en su certificado de calidad.

Por otro lado, en este trabajo se determinó teóricamente la composición de los ácidos grasos o carboxílicos presentes en el aceite de soya con la finalidad de estimar posteriormente su peso molecular promedio (Tabla 4.1).



Figura 4.1. Certificado de calidad del aceite de soya. Extraída del certificado de calidad.



# INTERQUIMICA

S.A. DE C.V.

AVENIDA DE LOS SAUCES No. 17 COLONIA BOSQUES DE IXTACALA ATIZAPAN DE ZARAGOZA C.P. 52919  
 E mail: info@interquimica.com.mx www.interquimica.com.mx  
 TELS: 56 19 52 00 / 56 19 52 01 / 56 19 52 02 / 56 19 52 04

## ACEITE DE SOYA

LOTE: 160322

F. ELABORACIÓN: MARZO 2022

F. CADUCIDAD: MARZO 2023

ANÁLISIS ORGANOLEPTICO	RESULTADOS	METODO DE ANÁLISIS
Olor	Neutro	AOCS Cg 2-83
Sabor	Neutro	AOCS Cg 2-83

ANÁLISIS FISICOQUIMICO	RESULTADOS	METODO DE ANÁLISIS
Ácidos Grasos Libres	0.025	AOCS Ca 5a-40
Color (Lovibond, rojo/ amarillo)	0.5/4.4	AOCS Cc 13e-92
Índice de Peróxido	0.00	AOCS Cd 8b-90
Índice de Yodo	134.3	AOCS Cd 1b-87
Humedad	0.00	AOCS Ca 2c-25

CONTROL DE CALIDAD

ING. JOSÉ ALISEDA SOTO



#### 4.1.1. DETERMINACIÓN DEL PESO MOLECULAR DE LOS TRIGLICERIDOS PRESENTES EN EL ACEITE DE SOYA.

**Tabla 4.1.** Ácidos grasos del aceite de soya para el cálculo del peso molecular. Adaptado de (4).

Ácido Graso	$w_i$	$Mw_i$ , g/mol	$w_i/Mw_i$	$X_i$	$x_i \cdot Mw_i$
Láurico	0.0009	200.31	4.49E-06	0.001	0.262
Mirístico	0.0009	228.37	3.94E-06	0.001	0.262
Palmítico	0.1107	256.42	0.0004	0.125	32.191
Palmitoleico	0.0018	254.40	7.07E-06	0.002	0.523
Estearico	0.0372	284.47	0.0001	0.038	10.817
Oleico	0.2261	282.46	0.0008	0.233	65.748
Linoleico	0.5133	280.44	0.002	0.532	149.264
Linolénico	0.0563	278.42	0.0002	0.059	16.372
Araquídico	0.0027	312.53	8.63E-06	0.003	0.785
Eicosenoico	0.0027	310.51	8.69E-06	0.003	0.785
Behénico	0.0027	340.58	7.92E-06	0.002	0.785
Erúcico	0.0009	338.56	2.65E-06	0.0007	0.262

Una vez conocido el perfil de ácidos grasos del aceite, el peso molecular promedio del aceite se calcula como:

$$MW_{aceite} = 3 \sum_{i=1}^n x_i MW_i + 38.049 \dots (1)$$

Donde:

- $x_i$  es la fracción mol del ácido graso.
- $MW_i$  es el peso molecular del ácido graso en g/mol
- El valor 38.049 es el peso molecular del esqueleto del glicerol en g/mol.



A continuación, se muestran los cálculos en los que se determinó el Peso Molecular del Aceite de soya (4)

$$MW_{aceite} = 3 * (278.06) + 38.049 = 872.22 \text{ g/mol}$$

#### 4.1.2. TRANSESTERIFICACIÓN.

Para identificar y conocer el perfil de ácidos grasos presentes en el aceite de soya; se llevó a cabo la reacción de transesterificación. Después de determinar la composición de metil ésteres en el biodiésel de soya, se asumió que esta composición corresponde también a la de los ácidos carboxílicos presentes en el aceite de soya. (4). Los pesos moleculares y densidades de las sustancias utilizadas para la transesterificación fueron obtenidos mediante su certificado de calidad proporcionado por el IMP (Tabla 4.2).

**Tabla 4.2.** Datos utilizados para la determinación de volúmenes y pesos utilizados en la transesterificación.

*Realizada por el autor.*

<b>Metanol: Aceite vegetal: Catalizador 60:10:2</b>			
<b>Cantidades utilizadas</b>	<b>Metanol</b>	<b>Aceite de soya</b>	<b>KOH</b>
<b>Densidad, g/mL</b>	0.792	0.9112	2.044
<b>Gramos, g</b>	1922.4	8376.842	112.211
<b>Peso molecular</b>	32.04	909.25	56.11

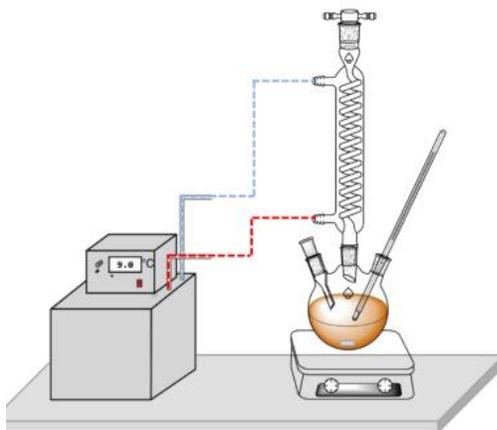
La transesterificación del aceite de soya se llevó a cabo a reflujo en un matraz de bola de 3 bocas de 100 mL (Figura 4.2). Para la síntesis de la mezcla de metil ésteres se llevó a cabo una relación molar de metanol: aceite de soya: hidróxido de potasio en escamas 60:10:2, para la selección de estos valores se tuvieron en cuenta las experiencias obtenidas en trabajos anteriores (15). En primer lugar, se preparó una



solución de metóxido de potasio utilizando KOH y metanol. Para realizar la reacción se vertió el aceite de soya. La temperatura de reacción se fijó a 60 °C y una agitación constante. Una vez alcanzada la temperatura deseada se agregó la solución de metóxido de potasio al matraz. La mezcla formada se dejó agitando durante un periodo de 4 horas.

**Figura 4.2.** Diagrama del proceso de transesterificación.

*Extraída de (15)*

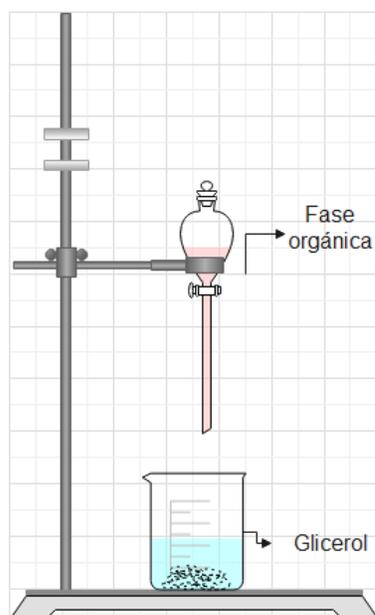


#### 4.1.3. SEPARACIÓN, LAVADO Y CROMATOGRAFÍA DE LA FASE ORGÁNICA.

Una vez terminada la reacción se forman dos fases líquidas. Una de ellas formada por glicerina con metanol y la otra formada por biodiésel (mezcla de metil ésteres). Debido a que las dos fases líquidas son prácticamente inmiscibles entre sí se utilizó un embudo de separación (Figura 4.3); a su vez se hicieron 3 lavados para asegurar que en el biodiésel no existiesen trazas de glicerina o metanol disueltos. La etapa de lavado consistió en adicionar agua desionizada; el agua utilizada durante este proceso permitió retirar los componentes polares de la mezcla, como resultado se obtuvo la fase no polar (biodiésel) y la otra rica en glicerina, metanol, catalizador y agua (polar).



**Figura 4.3.** Diagrama del proceso de separación. Realizado por el autor.



Después la mezcla de metil ésteres (fase orgánica), fue analizada por cromatografía de gases/masas. Gracias a ello se obtuvo el cromatograma (Figura 5.1) obtenido para el aceite de soya derivando la composición de ácidos grasos en el aceite de soya de la concentración de metil ésteres en el biodiésel de soya, mostrando la distribución de ácidos carboxílicos que están en mayor concentración, conformados por cuatro ácidos carboxílicos (ácido hexadecanoico, ácido *cis*-9-octadecacenoico (*Z*), ácido *cis,cis*-9,12-octadecadienoico (*Z,Z*) y ácido *cis*-9,12,15-octadecatrienoico) y en menor concentración se encuentran los 17 ácidos carboxílicos restantes en el aceite de soya como se muestran en la Tabla 5.1.

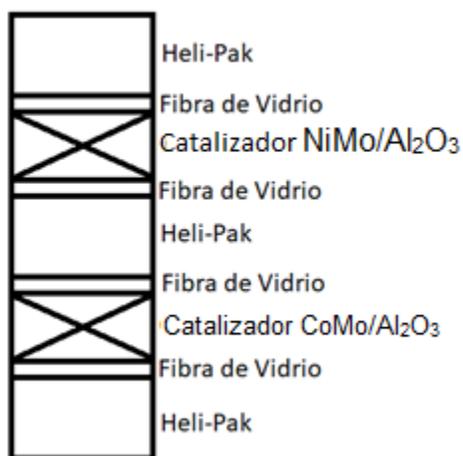


## 4.2. CATALIZADORES.

Se utilizaron dos catalizadores Cobalto-Molibdeno soportado en alúmina ( $\text{CoMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ) y Níquel- Molibdeno soportado en alúmina ( $\text{NiMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ) en un arreglo de lecho combinado para llevar a cabo la hidroxigenación del aceite de soya.

La prueba de HDO de aceite de soya se llevó a cabo con 5 mL del catalizador  $\text{CoMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$  y 5 mL de  $\text{NiMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$  de acuerdo con la distribución de la Figura 4.4.

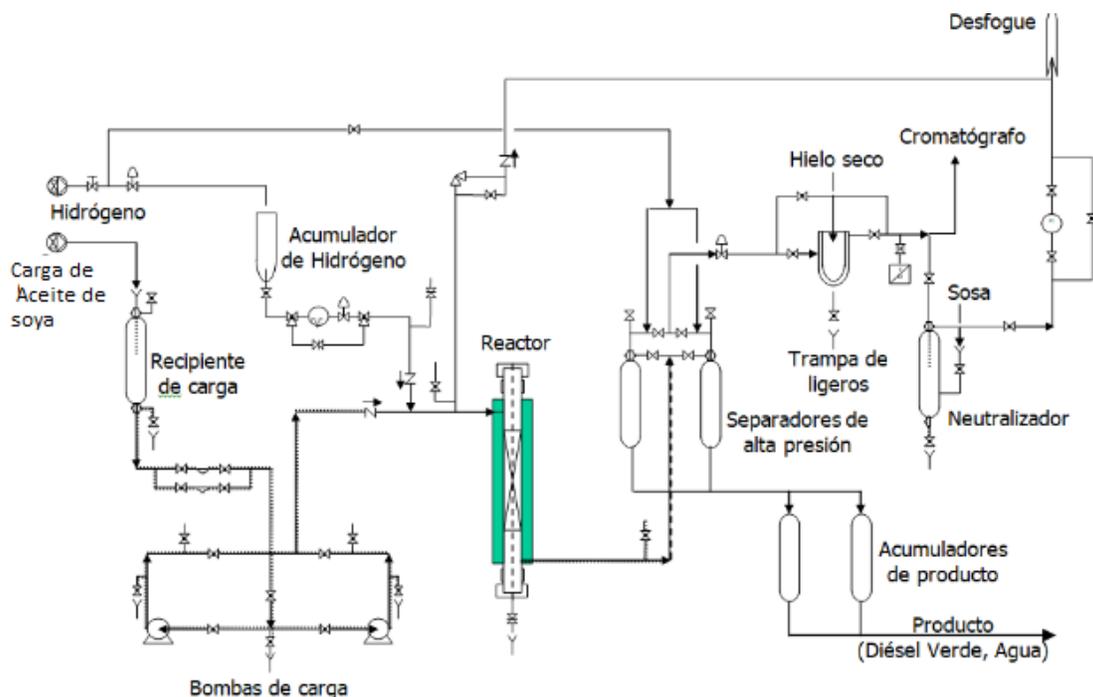
**Figura 4.4.** *Distribución del lecho combinado en la zona de reacción del reactor tubular de la micro planta 4-3. Extraída del Protocolo de experimentación del IMP.*





### 4.3. HIDRODESOXIGENACIÓN DEL ACEITE DE SOYA EN LA MICROPLANTA 4-3 DEL IMP.

**Figura 4.5.** Esquema de la planta piloto para producción de diésel verde a partir de HDO del aceite de soya. (Proporcionado por el IMP).



Previamente a la HDO se realizó el lavado de la microplanta con disolventes, debido a que se requiere que recipientes de carga, separadores, trampas y reactor estén completamente limpios.

Se realizó la prueba de hermeticidad de la microplanta o sistema de reacción a un 20% por arriba de la presión de operación, por un periodo de 4 horas, posteriormente el reactor se despresurizó a la presión de 50 kg/cm<sup>2</sup> manteniéndola con flujo de nitrógeno.



Alcanzadas las condiciones se realizó la etapa de humectación, donde se alimentó Gasóleo Ligeró Primario (GLP) +Dimetil disulfuro (DMDS) a razón de 10 mL/h (LHSV = 3 h<sup>-1</sup>) y temperatura ambiente, por medio del dosificador de carga. Para ello se realizó en el laboratorio del edificio 23 en el IMP una mezcla de GLP + DMDS. La concentración correspondió al 3% de azufre total.

Posteriormente, se alineó un flujo de gas de hidrógeno y simultáneamente se incrementó la temperatura del lecho catalítico ambiente hasta 290 °C, a razón de 10 °C/h. El GLP+DMDS se utilizó tanto en la etapa de humectación como de sulfidación del catalizador. El sistema se estabilizó a las condiciones de la Tabla 4.3 por un periodo de 15 h.

**Tabla 4.3.** *Condiciones para la etapa de humectación. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.*

Parámetro	Carga	Condición	Valor
Presión, kg/cm <sup>2</sup>	-	-	50
Temperatura, °C	-	-	290
Flujo de la carga Gas	Hidrógeno	L/h @ 20 °C y 760 mm Hg	7
Flujo de la carga Líquida	GLP + DMDS	mL/h @ 20 °C y 585 mm Hg	30

Para la etapa de activación se mantuvo la presión de operación a 50 kg/cm<sup>2</sup>, y se ajustó el flujo de hidrogeno a 13.4 L/h. Por otro lado, se mantuvo el dosificador de carga con GLP+DMDS alineado al sistema de alimentación a razón de 30 mL/h, incrementando la temperatura del lecho de 290 °C a 320 °C a razón de 10°C/h, manteniéndolo por 2 hrs.



Después se ajustaron las siguientes condiciones durante un periodo de 8 hrs, como se muestra en la Tabla 4.4.

**Tabla 4.4.** *Condiciones para la etapa de activación. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.*

Parámetro	Carga	Condición	Valor
Presión, kg/cm <sup>2</sup>	-	-	50
Temperatura, °C	-	-	320
Flujo de la carga gas	Hidrógeno	L/h @ a 20 °C y 760 mm Hg	13.4
Flujo de la carga líquida	GLP+DMDS	mL/h @ a 20 °C y 585 mm Hg	30

Al finalizar la etapa de activación, se modificó el flujo del gas (hidrógeno) a 4.5 L/h. Posteriormente, se efectuó el llenado de la carga con GLP y se alineó con la carga líquida para desplazar el volumen de la carga anterior para iniciar la alimentación de carga con GLP. Estabilizando las condiciones de acuerdo con la Tabla 4.5.

**Tabla 4.5.** *Condiciones de operación previo al hidrotreamiento. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.*

Parámetro	Carga	Condición	Valor
Presión, kg/cm <sup>2</sup>	-	-	50
Temperatura, °C	-	-	340
Flujo de la carga gaseosa	Hidrógeno	L/h @ a 20 °C y 760 mm Hg	4.5
Flujo de la carga líquida	GLP	mL/h @ 20 °C y 585 mm Hg	10



Después que se efectuó el llenado del dosificador de carga con aceite de soya y se alineó para barrer el GLP, se inició el hidrotratamiento. Para desplazar el volumen de líquido de la carga anterior se inició la alimentación con el aceite de soya con las condiciones mostradas en la Tabla 4.6.

**Tabla 4.6.** *Condiciones de operación para el hidrotratamiento. Extraída del protocolo de experimentación del IMP.*

Parámetro	Carga	Condición	Valor
Presión, kg/cm <sup>2</sup>	-	-	50
Temperatura, °C	-	-	300
Flujo de la carga gaseosa	Hidrógeno	L/h @ a 20 °C y 760 mm Hg	10
Flujo de la carga líquida	Aceite de Soya	mL/h @ 20 °C y 585 mm Hg	10

Se mantuvieron las condiciones de la Tabla 4.6 durante un periodo de estabilización de 15 h. Finalizado el periodo de estabilización, se drenó el reactor, recipientes de producto y trampas de condensables, posteriormente se midió el volumen y se pesó el producto del líquido recuperado.

En la etapa de estabilización, el producto líquido se recuperó en un recipiente diferente al de las muestras para evitar su contaminación. De acuerdo con las condiciones de operación establecidas, en la parte del desarrollo experimental; tomando las lecturas correspondientes de los parámetros de control.

Una vez que cada recipiente receptor hubo sido utilizado en los primeros balances, este fue drenado por completo para recuperar el siguiente balance. Los balances se llevaron a cabo con un período de estabilización para alcanzar la temperatura programada entre ellos.



A continuación, se muestra el seguimiento de experimentos para la etapa de operación de hidrotratamiento (Apéndice A), se realizaron 21 experimentos por triplicado, se recuperó el agua producto de la reacción colocando una trampa de vapor a una temperatura de 5 °C.

Para el paro de la planta, se inició el enfriamiento sin suspender los flujos de hidrógeno ni la carga de aceite de soya a una velocidad de enfriamiento de 50 °C/h. Posteriormente, se suspendió el flujo de hidrógeno mientras se mantuvo el flujo de aceite de soya. Se disminuyó la temperatura hasta llegar a la temperatura ambiente. Luego, se suspendió el flujo de aceite de soya y se comenzó la alimentación de la mezcla de hexanos o decalina para desplazar el volumen de la carga anterior. A continuación, se detuvo el flujo de la mezcla de hexanos o decalina y se realizó la inertización del reactor con flujo de nitrógeno durante una hora.

Se recuperaron los productos líquidos de cada balance en frascos limpios de 250 mL y se etiquetaron de acuerdo con la codificación establecida por el asesor. Se cuantificó la masa de cada producto líquido y se utilizó una muestra de cada uno para el análisis de azufre total. Además, se tomaron pequeñas muestras en viales para cromatografía.



#### **4.4. CONDICIONES DE OPERACIÓN.**

Se muestran las condiciones de operación utilizadas (Tabla 4.7) con base en los intervalos convencionales reportados en la literatura. Estas corridas experimentales fueron las que se llevaron a cabo durante la experimentación, cabe mencionar que cada una de las condiciones experimentales se repitió por triplicado.

Dado que el objetivo es determinar una influencia en las variables de operación se estableció como variable de respuesta  $%X_T$ ; para poder garantizar la transformación completa de los intermediarios de la reacción.

##### **4.4.1 FACTORES Y NIVELES.**

Los factores de control fueron elegidos en base a comportamientos anteriores realizados con aceite de palma (16) ;se realizó el experimento en base a estos factores T, P, LHSV y la relación  $H_2/AS$ ; estos factores son los que influyen mayormente en la conversión, además de que en la literatura son los que más se utilizan para el tipo de reactor que se emplea en la experimentación (reactor de lecho fijo).

Para cada factor se estudiaron diferentes niveles, esto debido a que se querían ver los cambios para obtener una mejor conversión. Para el LHSV se utilizaron 5 niveles, temperatura se utilizaron 3 niveles, presión 4 niveles, relación  $H_2/AS$  se utilizaron 4 niveles. A continuación, se muestran los niveles utilizados por cada factor (Tabla 4.7).



**Tabla 4.7.** Factores y niveles de control y condiciones de operación utilizadas. Realizada por el autor.

Corrida	Factor 1 A: LHSV, h <sup>-1</sup>	Factor 2 B: Temperatura, °C	Factor 3 C: Presión, kg/cm <sup>2</sup>	Factor 4 D: Relación H <sub>2</sub> /AS ft <sup>3</sup> /bbl
1	1	300	50	5614.6
2	1	330	50	5614.6
3	1	360	50	5614.6
4	0.75	300	50	5614.6
5	0.75	330	50	5614.6
6	0.75	360	50	5614.6
7	1.75	300	50	5614.6
8	1.75	330	50	5614.6
9	1.75	360	50	5614.6
10	1.5	300	50	5614.6
11	1.5	330	50	5614.6
12	1.5	360	50	5614.6
13	1.25	300	50	5614.6
14	1.25	330	50	5614.6
15	1.25	360	50	5614.6
16	1	330	40	5614.6
17	1	330	30	5614.6
18	1	330	20	5614.6
19	1	330	50	4491.7
20	1	330	50	3368.8
21	1	330	50	2245.8

#### 4.4.2. EJECUCIÓN DEL EXPERIMENTO.

El experimento se llevó a cabo en la microplanta 4-3 del IMP (Figura 4.5), siguiendo las condiciones de operación seleccionadas. La microplanta se divide en cuatro secciones 1) Alimentación, 2) Reacción, 3) Análisis y medición en línea de los gases de reacción, 4) Separación.



## **1) Alimentación.**

El reactor se operó en modo isotérmico y en flujo ascendente, el aceite de soya se almacenó en un recipiente en forma de bala cuyo peso es medido en todo momento por medio de una balanza lo cual permite obtener el flujo másico de alimentación por diferencia de pesos en un tiempo determinado, el aceite de soya se alimentó a través de una bomba de control, la cual permite que la carga en el proceso se encuentre a las condiciones de presión y flujo. Todo esto controlando el peso del líquido alimentado mediante la balanza electrónica.

Por otro lado, el hidrógeno se alimentó desde un tanque acumulador de suministro de gas que está conectado directamente a un cilindro, la presión del gas se disminuyó a la presión de operación del reactor por medio del medidor de flujo, el cual permite ajustar el flujo deseado en litros estándar por minuto; ya modificada la presión la corriente de hidrógeno se unió a la corriente del aceite vegetal y ambas alimentaciones entran por la parte inferior, ascendiendo a través del lecho catalítico.

## **2) Reacción.**

El reactor es de tipo isotérmico, cuenta con un termo-pozo montado verticalmente al centro en donde se introduce un termopar, que permite medir el perfil de temperaturas, luego de que la corriente de alimentación entró al reactor, el aceite se calentó a la temperatura de operación, posteriormente la corriente de reactivos entra en contacto con el catalizador donde se lleva a cabo la transformación de reactivos a productos.



### **3) Medición y análisis en línea de gases de reacción.**

Los productos, así como las trazas de reactivo no transformado fluyeron hacia la parte superior del reactor pasando a la sección de Separación a Alta Presión (SAP). En el SAP el gas fue enviado a la sección de medición (cuantificación de flujo), una muestra de este gas se analizó en línea mediante cromatografía de gases para determinar su composición química.

### **4) Separación.**

El equipo de separación permitió que los gases e hidrocarburos ligeros salieran como gas por la parte superior y como líquido (mezcla de agua y parafinas) por la parte inferior.

Mientras que en la parte inferior mediante una válvula de control de nivel el producto líquido fue conformado por dos fases, una orgánica y otra acuosa, se envió a un acumulador donde fue retirado manualmente.

Posteriormente se transvasó a un recipiente y fue necesaria su separación, para ello se utilizó un embudo de separación, logrando una eficiente separación de las fases para cuantificar la cantidad de agua y la del producto orgánico (diésel verde).



#### 4.4.3. ESTUDIO ESTADÍSTICO DE LOS DATOS.

Para esta parte se utilizaron las herramientas de regresión y solver de Microsoft® Excel®.

##### **Función regresión.**

Dado el porcentaje de conversión obtenido experimentalmente, utilizamos el método de regresión para ajustar un modelo lineal que nos permitiera calcular la conversión deseada a partir de la interacción de los cuatro factores seleccionados (T, P, LHSV, H<sub>2</sub>/AS). La regresión es una técnica que se emplea para explorar la relación entre las variables explicativas (factores) y una variable de respuesta (porcentaje de conversión de triglicéridos, rendimiento hacia diésel verde).

##### **Función solver.**

La herramienta solver de Excel® permitió optimizar el valor de una función objetivo, a un valor mínimo a través de la suma de cuadrados de residuales, y ajustando los coeficientes de modelo por regresión.

Se empleó el método de optimización GRG Nonlinear para resolver el problema. Este enfoque implica el análisis del gradiente o pendiente de la función objetivo al variar los valores de entrada (o variables de decisión) y determina el momento en que se ha alcanzado una solución óptima al verificar que las derivadas parciales alcanzan el valor cero.



#### 4.5. CÁLCULO DEL %XTRIGLICÉRIDOS Y RENDIMIENTO HACIA DIÉSEL VERDE.

Como se consideró a la conversión y el rendimiento hacia diésel verde como nuestras respuestas, se realizó un análisis del efecto de las condiciones de operación sobre estas. El porcentaje de conversión de una reacción química puede ser calculada mediante la siguiente ecuación:

$$\%X_T = \left( \frac{m_i - m_f}{m_i} \right) * 100 \dots (2)$$

Donde:

- $\%X_T$  es la conversión en %peso.
- $m_i$  es la masa inicial de triglicéridos en gramos.
- $m_f$  es la masa final de triglicéridos en gramos.

Así mismo se calculará el porcentaje de rendimiento hacia diésel verde en base a la siguiente ecuación:

$$R = \left( \frac{m_{DV}}{m_i} \right) * 100 \dots (3)$$

Donde:

- $R$  es el rendimiento en % peso.
- $m_i$  es la masa inicial de triglicéridos en gramos.
- $m_{DV}$  es la masa de diésel verde que se formó en el proceso.

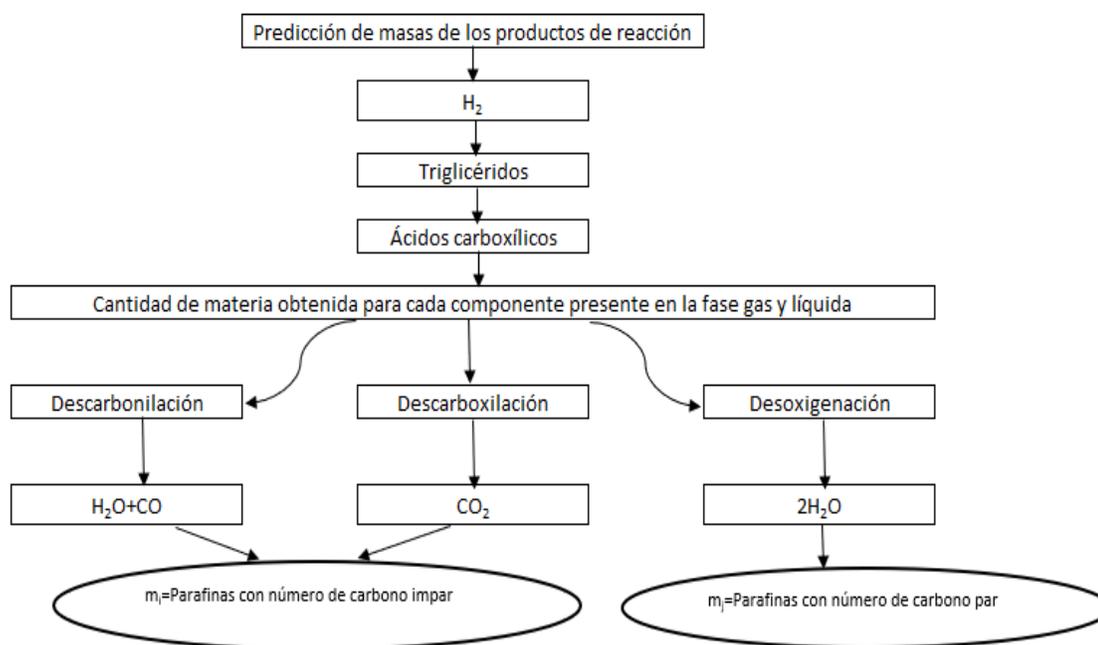


#### 4.6. PLANTEAMIENTO DE ECUACIONES PARA EL ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE CONTRIBUCIÓN DE CADA UNA DE LAS RUTAS DE REACCIÓN.

A continuación, se muestra la metodología que se siguió para el planteamiento de las ecuaciones de predicción de masas de los productos de reacción (Figura 4.6).

**Figura 4.6.** Metodología para determinar la contribución en cada ruta de reacción.

*Realizado por el autor.*



El proceso HDO conlleva la eliminación de oxígeno mediante tres vías distintas: descarbonilación, descarboxilación y desoxigenación. En este trabajo se determinó la contribución individual de cada una de estas rutas a la formación de parafinas. Cabe mencionar que, la generación de parafinas con un número par de átomos de carbono ocurre exclusivamente a través de la vía de desoxigenación (DO), mientras que, para las parafinas con un número impar de átomos de carbono, se siguen dos rutas: la descarbonilación (DC) y la descarboxilación (DCX). En este trabajo se formuló un



sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas. Al resolver este sistema de ecuaciones, se pudo determinar la contribución de cada ruta de reacción en la formación de parafinas.

Para esto experimentalmente se determinó la masa de parafinas con número de carbono par ( $m_j$ ), la masa de parafinas con número de carbono impar ( $m_i$ ), CO ( $m_{CO}$ ), CO<sub>2</sub> ( $m_{CO_2}$ ). En la Tabla 4.8 se muestra un ejemplo de los datos con los datos experimentales utilizados y en el Apéndice C se muestran los resultados de la experimentación para calcular el aporte en cada ruta de reacción a la formación de parafinas.

Donde el valor de A representa la relación de masa entre parafinas con número de carbono par y masa de parafinas con número de carbono impar, considerando; que únicamente en la desoxigenación se obtienen parafinas con número de carbono par. Estableciendo un valor de B donde se representa la relación entre masas entre CO<sub>2</sub> y CO cuya formación proviene de la reacción de descarboxilación y descarbonilación respectivamente. Cualquier aproximación utilizando masa o moles debería de llevarnos al mismo resultado, siempre y cuando se disponga de información experimental correcta y se utilicen los pesos moleculares adecuados. Por último, se establece que la suma de las tres rutas de reacción a la formación de parafinas sea igual a 1, recordando que se garantizó la conversión completa del aceite de soya procesado a parafinas.

El objetivo de plantear este sistema de ecuaciones es encontrar el porcentaje que aportó cada una de las 3 rutas de reacción(17).

$$\frac{\sum m_j}{\sum m_i} = \frac{DO}{DC + DCX} = A \dots (4)$$



Donde:

- $\sum m_j$  es la suma de la masa de parafinas con numero de carbono par en gramos.
- $\sum m_i$  es la suma de la masa de parafinas con numero de carbono impar en gramos.
- $DO$  es la contribución de la reacción de desoxigenación.
- $DC$  es la contribución de la reacción de descarbonilación.
- $DCX$  es la contribución de la reacción de descarboxilación.

$$\frac{m_{CO_2}}{m_{CO}} = \frac{DCX}{DC} = B \dots (5)$$

Donde:

- $m_{CO_2}$  es la masa del dióxido de carbono en gramos.
- $m_{CO}$  es la masa del monóxido de carbono en gramos.

$$DO + DCX + DC = 1 \dots (6)$$

Una vez planteado el sistema de ecuaciones, se resuelve este sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas; que se resuelve generando las siguientes ecuaciones.



Una vez resuelto el sistema se plasman los resultados.

Para  $DC$ :

$$DC = \frac{1}{AB + A + B + 1} \dots (7)$$

Se agrupan términos y se obtiene factor común en la Ecuación (7).

$$DC = \frac{1}{(A + 1)(B + 1)} \dots (8)$$

Para  $DCX$ :

$$DCX = \frac{B}{AB + A + B + 1} \dots (9)$$

Se agrupan términos y se obtiene factor común en la Ecuación (9).

$$DCX = \frac{B}{(A + 1)(B + 1)} \dots (10)$$

Para  $DO$ :

$$DO = \frac{A}{A + 1} \dots (11)$$



Ejemplificando el uso de las ecuaciones obtenidas con los datos de la Tabla 4.8:

**Tabla 4.8.** Resultados de la corrida experimental Balance 1.

*Realizado por el autor.*

Balance	1
<b>Compuesto</b>	<b>Masa (g)</b>
CO <sub>2</sub>	3.84
CO	1.75
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	0.00
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	0.04
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	0.00
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	1.78
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	0.05
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	0.07
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub>	4.81
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	4.20
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	28.31
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub>	24.36
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub>	0.42
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	0.29
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub>	0.22
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub>	0.16
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub>	0.01
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub>	0.07
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub>	0.03
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub>	0.03
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub>	0.00
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub>	0.00
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub>	0.00



Conociendo la masa de los hidrocarburos con número de carbono par e impar, para obtener los parámetros A y B establecidos en el modelo.

$$\sum m_j = (0.00+0.00+1.78+0.07+4.20+24.36+0.29+0.16+0.07+0.03+0.00) = 30.94g$$

$$\sum m_i = (0.04+0.00+0.05+4.81+28.31+0.42+0.22+0.01+0.03+0.00+0.00) = 33.89g$$

$$m_{CO} = 1.75g$$

$$m_{CO_2} = 3.84g$$

$$A=0.91$$

$$B=2.20$$

Sustituyendo los valores en las ecuaciones 8,10 y 11, se calculan las contribuciones de cada ruta de reacción. El valor se reporta en porcentaje para que este quede explícito en la contribución durante la hidrodeshidrogenación del aceite de soya, mencionando que los valores obtenidos son números decimales, debido a que la suma de la contribución de cada una de las reacciones se estableció como 1.

Así para el primer balance los resultados de las rutas de reacción son los siguientes:

DC: 47.73%

DCX: 35.92%

DO: 16.35%

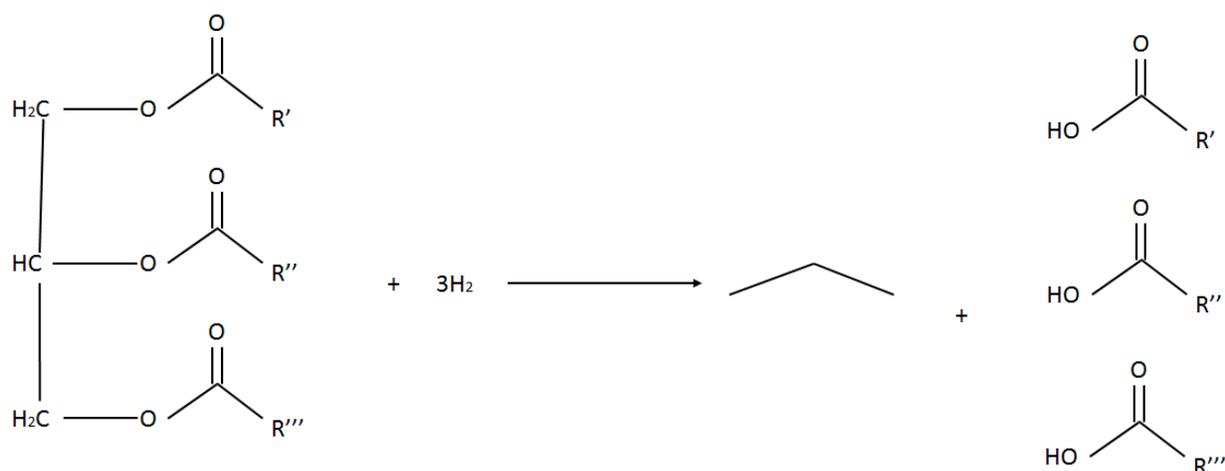
Para los 62 balances restantes se realiza el mismo procedimiento, ubicando los resultados y los datos utilizados en el apéndice C.



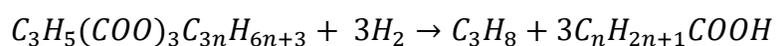
#### 4.7. NEXO ENTRE LA MASA DEL ACEITE PROCESADO Y LA MASA DE LAS PARAFINAS.

El diésel verde se obtiene a partir de la reacción química entre los triglicéridos y el hidrógeno. Los subproductos que se generan son gases; principalmente: propano, agua, dióxido de carbono y monóxido de carbono. Para ello se siguieron una serie de pasos. Para tal fin se ilustrará con un triglicérido cuya estructura está formada por 3 moléculas de un ácido graso y la molécula del glicerol (Figura 4.7).

**Figura 4.7.** Rotura del triglicérido. Nota: Con  $R'$ ,  $R''$ ,  $R'''$  =  $-(CH)_n-CH_3$ . Adaptada de ((15))



**Rotura del triglicérido:** Se rompen los enlaces de los triglicéridos formando moléculas de propano y 3 ácidos carboxílicos (Figura 4.7) como producto intermedio de la reacción. Para poder generalizar esta etapa de reacción es necesario contemplar la existencia de triglicéridos con ácidos grasos con insaturaciones en su estructura, por cada insaturación se requirió un mol de  $H_2$  para saturar la estructura.

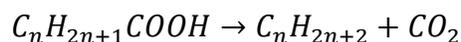




Formación de la n-parafina. Los ácidos carboxílicos empiezan a reaccionar con el hidrógeno, separando el oxígeno de la cadena en forma de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, en tres reacciones simultaneas (descarboxilación, descarbonilación, desoxigenación) formando la n-parafina lineal.

### Reacciones simultaneas:

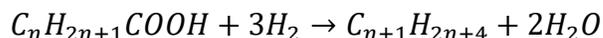
**Descarboxilación:** Esta etapa se relaciona por la producción de CO<sub>2</sub> por cada molécula de n-parafina formada, teniendo un numero impar de carbonos en su estructura.



**Descarbonilación:** Esta etapa se relaciona por la producción de CO y de H<sub>2</sub>O por cada molécula de n-parafina formada, teniendo un numero impar de carbonos en su estructura.



**Desoxigenación:** Se relaciona por la producción de 2 moléculas de agua por cada n-parafina, conservando los mismos carbonos que el ácido graso original, teniendo un numero par de carbonos en su estructura.

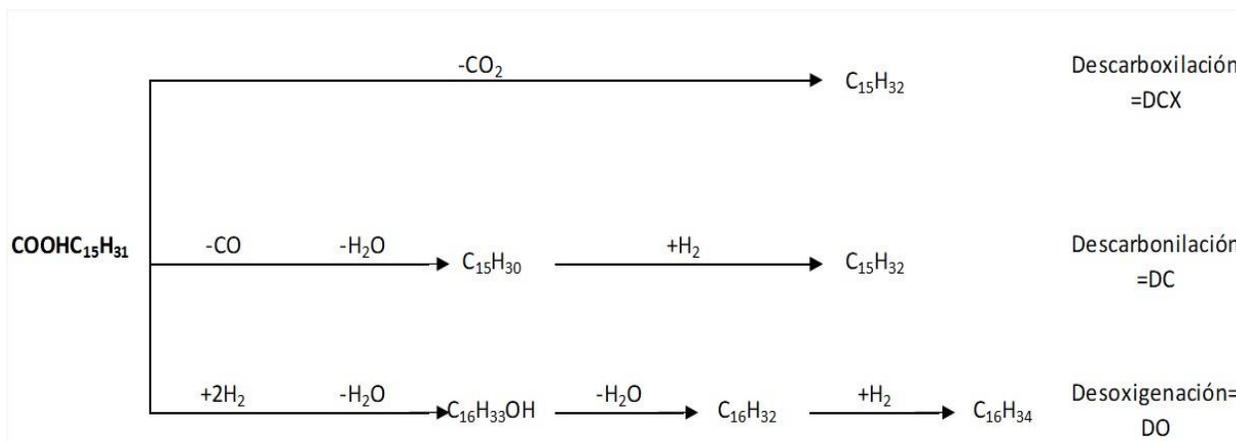


Nota: Donde *n* significa el número de ácido graso.

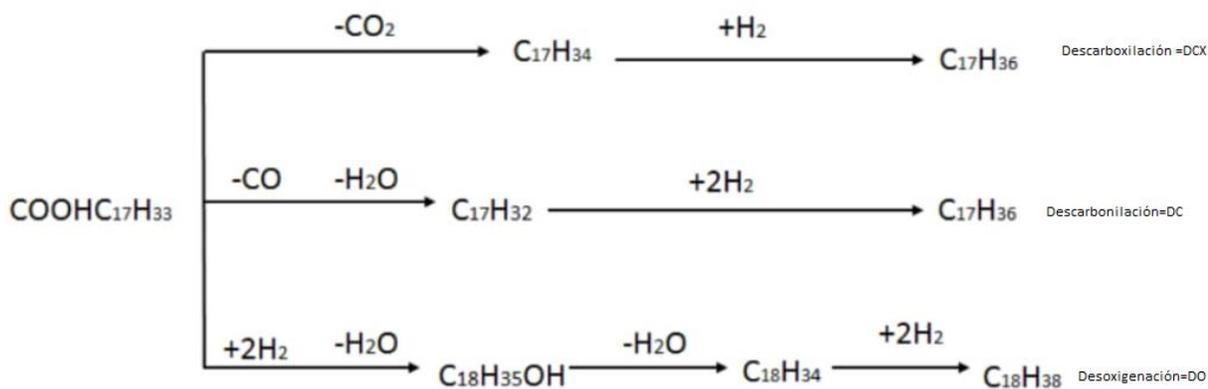


Para ejemplificar el nexo que existe entre la masa de parafinas y la masa del aceite procesado, de acuerdo con la contribución de cada una de las rutas de reacción; se plantea estudiar los triglicéridos del aceite de soya estudiado (Tabla 5.1), para una posible predicción de triglicéridos producidos durante la HDO; para ácidos grasos saturados; con una, con dos y con tres insaturaciones, buscando estudiar los que mayormente se encuentran en el aceite de soya (Figura 4.8, Figura 4.9, Figura 4.10, Figura 4.11).

**Figura 4.8.** Mecanismo de reacción para un ácido graso saturado. Ácido palmítico=C16:0= Ácido hexadecanoico. Realizada por el autor.

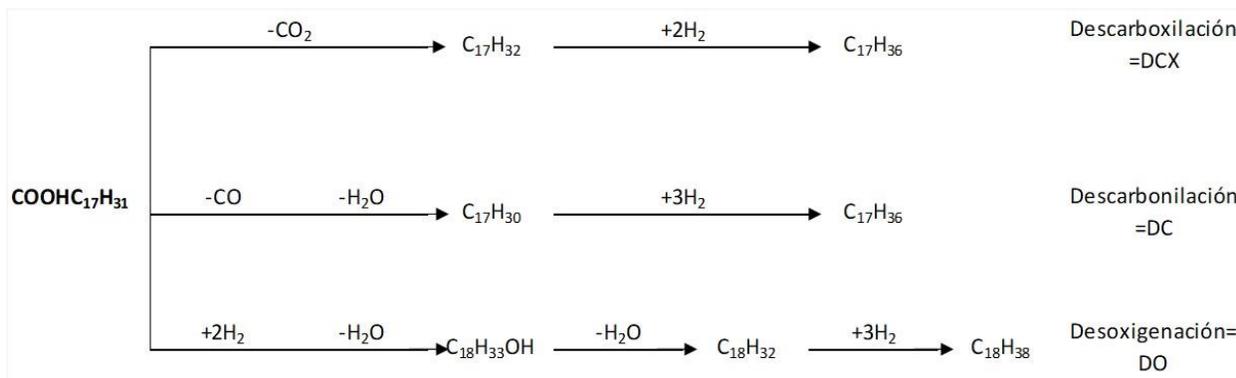


**Figura 4.9.** Mecanismo de reacción de un ácido graso con una insaturación. Ácido oleico=C18:1= Ácido cis-9-octadecenoico (Z). Realizada por el autor.

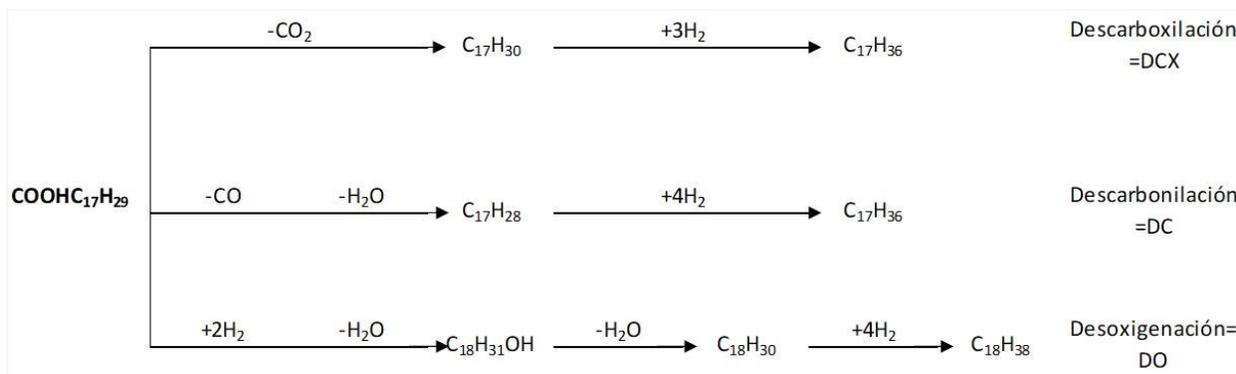




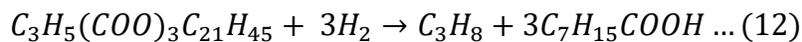
**Figura 4.10.** Ácido graso con dos insaturaciones. Ácido linoleico=C18:2=Ácido cis,cis-9,12-octadecadienoico (Z, Z). Realizada por el autor.



**Figura 4.11.** Ácido graso con tres insaturaciones. Ácido linolénico=C18:3= Ácido 9,12,15-octadecatrienoico. Realizada por el autor.



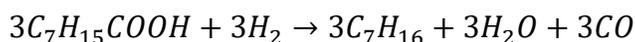
Se ejemplificará la obtención de reacciones partiendo de un ejemplo basado en Ácido caprílico=C8:0=Ácido octanoico, iniciando con la rotura del triglicérido haciéndolos reaccionar con hidrógeno para que sean convertidos en ácidos grasos libres y propano. Este ácido carboxílico está completamente saturado.



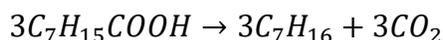


Para la segunda etapa de reacción se involucrarán las tres reacciones simultáneas, DC, DCX y DO, ya que involucra la etapa de la remoción del átomo de oxígeno; es importante mencionar que a partir del ácido caprílico (C8:0) solo se obtendrán las parafinas C<sub>7</sub>H<sub>16</sub>=Heptano y C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>=Octano.

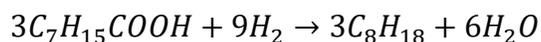
Descarbonilación:



Descarboxilación:



Desoxigenación:



Tomando en cuenta la masa del aceite de soya procesado y con base a la estequiometría establecida en las reacciones, se obtiene la relación que hay entre la masa y el aceite de soya que se introduce al reactor y la masa de hidrocarburos que se obtiene. Un ejemplo de ello es conocer la masa del octano (C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>) que se obtiene de la reacción de desoxigenación del ácido caprílico.



## 5. RESULTADOS

En esta sección, se mostrarán los resultados experimentales obtenidos, así como el planteamiento de ecuaciones que pronostican la conversión y rendimiento de triglicéridos a la salida del reactor.

Conforme se planteó el experimento se fueron dando los resultados experimentales esperados, tales como la composición de ácidos grasos en el aceite de soya derivados de la transesterificación (Tabla 5.1), cromatografía (Figura 5.1) y el análisis de azufre total mostrado (Tabla 5.2).

La determinación del contenido de azufre se realizó por fluorescencia de energía dispersiva de rayos X. Este análisis solo es una variable de control para saber si nuestro procedimiento fue efectuado de la manera correcta ya que a mayores temperaturas las partes por millón de azufre son más bajas.

Desde una perspectiva ambiental, el azufre constituye un elemento natural presente en el petróleo crudo, hallándose tanto en el diésel como en sus subproductos. Es posible afirmar que a menor cantidad de partes por millón (ppm) de contenido de azufre, menor será el efecto sobre las emisiones medioambientales, como el dióxido de azufre o las partículas (sulfatos).



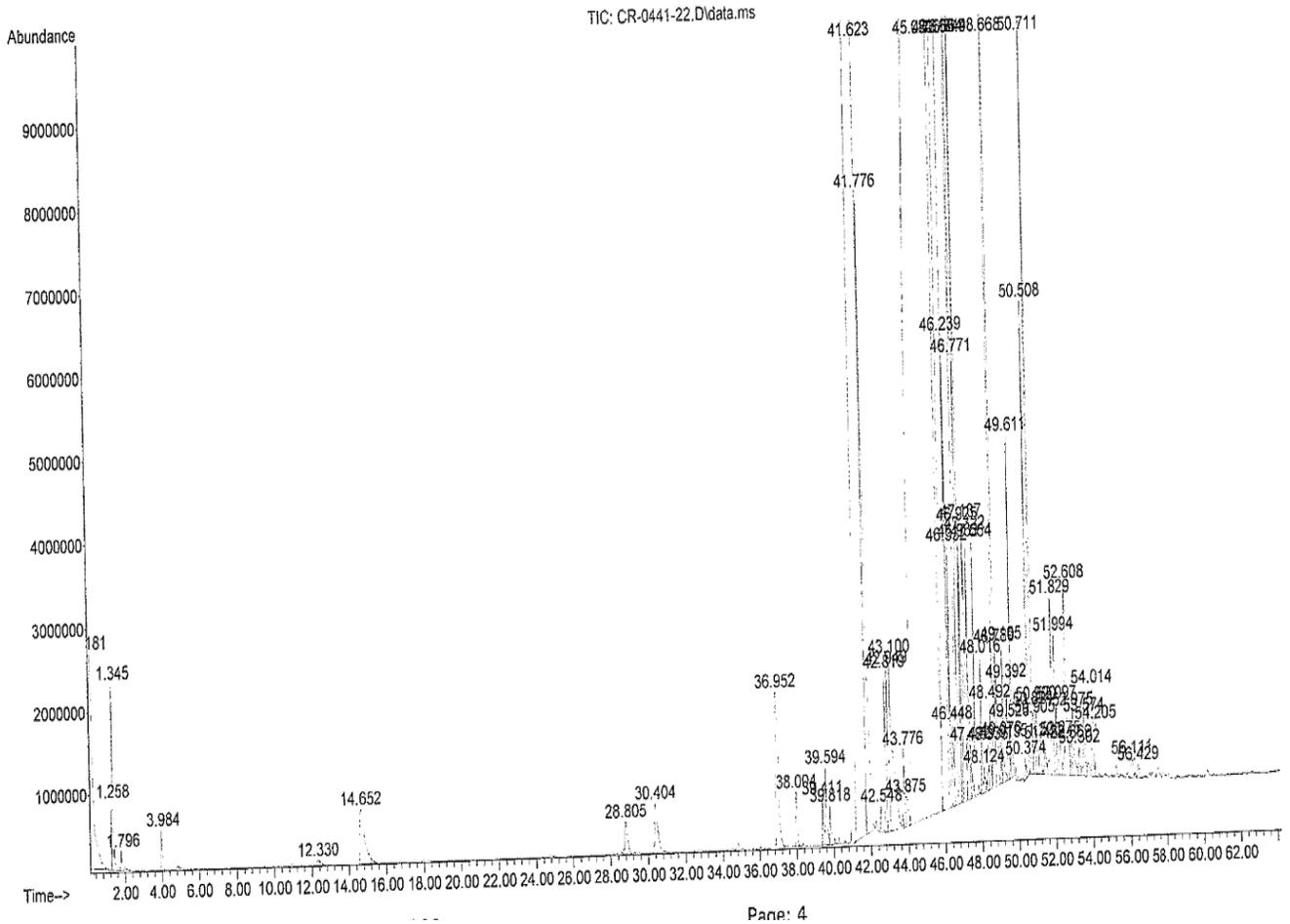
**Tabla 5.1.** Contenido de ácidos grasos presentes en el aceite de soya obtenidos por la cromatografía de gases.

Realizada por el autor.

<b>%Peso</b>	<b>Compuesto</b>	<b>Ácido Graso</b>
0.17	Ácido octanoico	C8:0
0.28	Ácido tetradecanoico	C14:0
0.04	Ácido pentadecanoico	C15:0
<b>17.47</b>	<b>Ácido hexadecanoico</b>	<b>C16:0</b>
0.07	Ácido cis-9-hexadecanoico	C16:1
0.03	Ácido cis-9,12-hexadecanoico	C16:2
0.11	Ácido heptadecanoico	C17:0
0.34	Ácido cis-9-heptadecanoico	C17:1
3.9	Ácido octadecanoico	C18:0
<b>25.1</b>	<b>Ácido cis-9-octadecenoico (Z)</b>	<b>C18:1</b>
<b>38</b>	<b>Ácido cis, cis-9,12-octadecadienoico (Z, Z)</b>	<b>C18:2</b>
<b>10.3</b>	<b>Ácido 9,12,15-octadecatrienoico</b>	<b>C18:3</b>
1.09	Ácido eicosanoico	C20:0
0.64	Ácido cis-11-eicosenoico	C20:1
0.19	Ácido cis-11,14-eicosadienoico	C20:2
1.13	Ácido dococosanoico	C22:0
0.18	Ácido tricosanoico	C23:0
0.24	Ácido ricinoleico	C18:1 OH
0.46	Ácido tetracosanoico	C24:0
0.13	Ácido pentacosanoico	C25:0
0.07	Ácido hexacosanoico	C26:0



**Figura 5.1.** Cromatograma de biodiésel de aceite de soya obtenido en el laboratorio de análisis químicos del IMP. Proporcionada por el IMP.



**Tabla 5.2.** Resultados experimentales del análisis de azufre total y relación de temperatura por balance. Realizada por el autor.

Balance	Azufre (mg/kg)	Temperatura de balance (°C)	Balance	Azufre (mg/kg)	Temperatura de balance (°C)
1	130	300	33	74.5	330
2	32.5	300	34	30.8	360
3	29.9	300	35	30.4	360
4	24.5	330	36	26.7	360
5	13.8	330	37	190	300



Continuación Tabla 5.2.

6	6.6	330	38	290	300
7	5.4	360	39	360	300
8	7.3	360	40	240	330
9	11.6	360	41	100	330
10	14	300	42	67.8	330
11	8.6	300	43	40.7	360
12	10	300	44	36.5	360
13	6.7	330	45	30.7	360
14	3.8	330	46	43.8	330
16	4.4	360	48	51	330
17	4.9	360	49	79.5	330
18	5	360	50	89.6	330
19	N/A	300	51	100.6	330
20	N/A	300	52	180	330
21	N/A	300	53	280	330
22	N/A	330	54	330	330
23	N/A	330	55	280	330
24	N/A	330	56	230	330
25	12.1	360	57	180	330
26	7.9	360	58	160	330
27	13.4	360	59	150	330
28	260	300	60	150	330
29	270	300	61	150	330
30	320	300	62	170	330
31	230	330	63	170	330
32	93.4	330			



### 5.1. EXPERIMENTO REALIZADO EN MICROPLANTA.

A continuación, se muestran los resultados de la conversión y rendimiento hacia diésel verde, usando los datos mostrados en el Apéndice B. Para la conversión y rendimiento se obtuvo un modelo con los efectos manejados (factores) llegando a las siguientes respuestas (Ecuación (13) y Ecuación (14)).

$$\%X_T = -14.380 + 11.8981A + 0.2461B - 0.0787C - 1.623 \times 10^{-5}D \dots (13)$$

**Tabla 5.3.** Significancia de los coeficientes en la conversión (factores). Realizada por el autor.

	Coeficientes	Error típico	Estadístico t	Probabilidad	Inferior 95%	Superior 95%
Intersección	-14.380	6.206	-2.317	0.024	-26.804	-1.957
A	11.8981	1.1052	10.7660	1.8758E-15	9.6859	14.1103
B	0.2461	0.0162	15.2245	6.3722E-22	0.2138	0.2785
C	-0.0787	0.0456	-1.7256	0.0897	-0.1699	0.0126
D	-1.623E-05	4.059E-04	-3.998E-02	9.682E-01	-8.288E-04	7.963E-04

$$R = -24.482 + 5.687A + 0.219B + 0.053C - 2.57 \times 10^{-5}D \dots (14)$$

**Tabla 5.4.** Significancia de los coeficientes en el rendimiento hacia diésel verde (factores). Realizada por el autor.

	Coeficientes	Error típico	Estadístico t	Probabilidad	Inferior 95%	Superior 95%
Intersección	-24.482	9.843	-2.487	0.0158	-44.186	-4.779
A	5.687	1.753	3.245	0.0020	2.179	9.196
B	0.219	0.026	8.526	8.1104E-12	0.167	0.270
C	0.053	0.072	0.735	0.465	-0.092	0.198
D	-2.57E-05	0.0006	-0.040	0.968	-0.001	0.001



Debido a que los modelos no predecían bien el comportamiento del sistema; ya que la probabilidad de alguno de los coeficientes era mayor a 0.05 (Tabla 5.3 y Tabla 5.4), se manejaron todos los efectos (factores y factores cruzados) para tener una mayor precisión al utilizar la ecuación para predicciones de porcentaje de conversión de triglicéridos. Llegando así a manejar únicamente 4 efectos para poder generar una ecuación para el cálculo de conversión de triglicéridos. Estos 4 efectos también fueron los mejores para la predicción del cálculo de rendimiento hacia diésel verde.

Con la herramienta "Solver" de Excel se determinó la solución óptima del ajuste de parámetros por regresión lineal.

**Tabla 5.5.** *Resultados experimentales del porcentaje de conversión y rendimiento.*

*Realizada por el autor.*

Balance	Diesel Verde (Salida)	Líquido (Entrada) (Triglicéridos)	Triglicéridos No Convertidos (Salida)	Conversión (%X <sub>T</sub> )	Rendimiento(R)
Unidades	g	g	G	%peso	%peso
1	70.42	151.12	48.35	68.01	46.60
2	73.99	153.82	49.92	67.55	48.10
3	74.11	152.74	49.55	67.56	48.52
4	95.41	152.11	35.10	76.92	62.73
5	98.91	153.39	35.67	76.74	64.48
6	101.18	153.82	35.98	76.61	65.78
7	86.44	152.74	27.84	81.77	56.59
8	96.60	152.11	30.59	79.89	63.51
9	96.26	153.39	30.68	80.00	62.76
10	72.92	152.77	56.40	63.08	47.73
11	71.93	152.74	55.58	63.61	47.10
12	77.89	152.11	60.61	60.15	51.21
13	86.79	153.39	37.62	75.48	56.58
14	91.41	152.77	39.65	74.05	59.83
15	93.73	154.08	40.59	73.65	60.83
16	83.08	152.11	32.85	78.40	54.62
17	84.15	153.39	33.45	78.19	54.86



Continuación Tabla 5.5.

18	90.63	152.77	35.65	76.67	59.33
19	82.95	154.08	38.78	74.83	53.83
20	83.14	151.90	38.90	74.39	54.73
21	77.11	153.39	35.98	76.55	50.27
22	99.79	152.77	17.11	88.80	65.32
23	97.79	154.08	16.89	89.04	63.47
24	99.95	151.90	16.99	88.81	65.80
25	112.06	153.71	15.24	90.08	72.91
26	109.84	152.77	15.15	90.09	71.90
27	108.13	154.08	15.19	90.14	70.18
28	77.77	151.90	47.86	68.49	51.20
29	69.29	153.71	42.95	72.06	45.08
30	75.85	150.73	46.51	69.14	50.32
31	91.66	154.08	26.83	82.59	59.48
32	88.63	151.90	25.78	83.03	58.35
33	86.91	153.71	25.65	83.31	56.55
34	91.40	150.73	22.17	85.29	60.64
35	88.62	149.19	21.39	85.66	59.40
36	98.22	151.90	24.03	84.18	64.66
37	74.92	153.71	51.70	66.37	48.74
38	72.79	150.73	50.38	66.58	48.29
39	71.24	149.19	49.09	67.09	47.75
40	74.86	151.16	28.21	81.34	49.53
41	77.14	153.71	28.43	81.50	50.18
42	77.37	150.73	27.62	81.68	51.33
43	95.14	149.19	27.60	81.50	63.77
44	91.65	151.16	26.49	82.47	60.63
45	93.46	154.62	26.89	82.61	60.45
46	86.23	150.73	32.77	78.26	57.21
47	86.75	149.19	32.71	78.08	58.14
48	85.23	151.16	32.44	78.54	56.38
49	85.63	154.62	35.10	77.30	55.38
50	88.39	151.43	36.24	76.07	58.37
51	87.86	149.19	35.64	76.11	58.89
52	83.47	151.16	38.67	74.42	55.22
53	79.52	154.62	36.25	76.55	51.43
54	73.69	151.43	34.78	77.03	48.67
55	81.74	149.94	33.06	77.95	54.52
56	88.38	151.16	36.15	76.09	58.46
57	92.83	154.62	36.50	76.39	60.04



Continuación Tabla 5.5.

58	82.73	151.43	36.75	75.73	54.63
59	87.52	149.94	39.23	73.84	58.37
60	87.79	151.65	38.66	74.51	57.89
61	83.81	154.62	40.96	73.51	54.21
62	79.79	151.43	38.95	74.28	52.70
63	85.46	149.94	38.17	74.54	57.00

Para calcular el porcentaje de conversión se aplicó la Ecuación (2) y para el rendimiento la Ecuación (3). Una vez obtenida la conversión y rendimiento se procedió a usar nuestras herramientas en Excel (Función regresión y solver) utilizando nuestros factores. Llegando a la Ecuación (15):

$$\%X_T = 24.22 + 11.90A + 0.002345BC + 0.000023BD - 0.000152CD \dots(15)$$

Donde:

- A: LHSV (1/h).
- B: Temperatura (°C).
- C: Presion (kg/cm<sup>2</sup>).
- D:H<sub>2</sub>/AS (ft<sup>3</sup>/bbl).

Obteniendo los siguientes resultados de la función regresión en base a la relación que hay entre los factores y la conversión. Esto se hace para validar el modelo en términos estadísticos.

**Tabla 5.6.** Estadísticas de la regresión de la conversión.

*Realizada por el autor.*

Coeficiente de correlación múltiple	0.9272
Coeficiente de determinación R <sup>2</sup>	0.8596
R <sup>2</sup> ajustado	0.8499
Error típico	2.6562
Observaciones	63



El coeficiente de correlación múltiple nos indica que hay una buena correlación entre las variables ya que este es cercano a 1, el valor del coeficiente de correlación puede tomar valores desde menos uno hasta uno, indicando que mientras más cercano a uno sea el valor de coeficiente de correlación en cualquier dirección, más fuerte será la asociación lineal entre las múltiples variables y eso indica lo bien que se ajusta el modelo.

El valor de coeficiente de determinación de  $R^2$  es de 0.8596 es razonable de acuerdo con el valor de  $R^2$  ajustado de 0.8499, ya que la diferencia es menor a 0.2; significa que el modelo es bien aceptado con las variables establecidas. El error típico es el que estima la cantidad que el valor de una estadística de prueba varía de muestra a muestra.

**Tabla 5.7.** *Análisis ANOVA de la conversión. Realizada por el autor.*

	Grados de libertad	Suma de cuadrados	Promedio de los cuadrados	F	Valor crítico de F
Regresión	4	2506.61	626.65	88.81	4.819E-24
Residuos	58	409.24	7.06		
Total	62	2915.85			

En este caso lo más importante de ANOVA es el resultado del valor crítico de F, este valor nos aporta la significación (si es o no relevante el análisis obtenido; siempre que el valor crítico sea inferior al alfa del estudio que en este caso nuestro alfa sería ( $\alpha=0.05=1-0.95$ ). Así que concluimos que nuestro valor crítico de F es casi 0 por lo que concluimos que a nivel global es significativo.



**Tabla 5.8.** Significancia de los coeficientes en la conversión. Realizada por el autor.

	Coeficientes	Error típico	Estadístico t	Probabilidad	Inferior 95%	Superior 95%
Intersección	24.22	3.1715	7.6355	2.50E-10	17.8679	30.5650
A	11.90	1.1052	10.7659	1.87E-15	9.6859	14.1102
B*C	0.0023	0.0001	12.7448	1.84E-18	0.0019	0.0027
B*D	0.00002	1.63E-06	14.0104	2.86E-20	1.96E-05	2.62E-05
C*D	-0.0001	1.13E-05	-13.3389	2.54E-19	-0.0001	-0.0001

Los coeficientes indican la estimación de los números que acompañan a la regresión. Pudiendo así proponer una ecuación para la conversión.

El error típico indicara la variación que tiene la estimación del coeficiente, en los estadísticos de t buscamos que tengan un valor grande absoluto. Podemos decir que nuestros estadísticos estimados son distintos de cero, es decir son significativos, la parte más importante que es la probabilidad buscamos que sea menor a 0.05.

Las columnas “Inferior 95%” y “Superior 95%”, corresponden a los intervalos de confianza de los coeficientes, dada la estimación puntual y su error típico, el coeficiente se mueve entre esos dos valores.

Para esta parte se minimiza la suma de cuadrados residuales variando los coeficientes de la función a proponer que en este caso es la conversión. Para la función solver se propone una función objetivo. Posteriormente se calculan los residuales y su suma de cuadrados, se emplea solver para minimizar esta suma variando los coeficientes. Se mostrará un ejemplo para el pronóstico de la ecuación de la conversión en la Tabla 5.9.



Para ello necesitaremos una serie de fórmulas:

$$\%X_{TCALSOLVER} = INT + A * A' + (B * C) * B' + (B * D) * C' + (C * D) * D' \dots (16)$$

$$(V_{exp} - V_{Cal})^2 = (Conversion(\%X_T) - \%X_{TCALSOLVER})^2 \dots (17)$$

$$FO = \sum (V_{exp} - V_{Cal})^2 \dots (18)$$

**Tabla 5.9.** Valores empleados para derivar el modelo de conversión a través de la herramienta "Solver" de Excel®. Realizada por el autor.

A	B*C	B*D	C*D	Conversión (%X <sub>T</sub> )	%X <sub>TCALSOLVER</sub>	(V <sub>EXP</sub> -V <sub>CAL</sub> ) <sup>2</sup>
1	15000	1684380	280730	68.01	67.33	0.46
1	15000	1684380	280730	67.55	67.33	0.05
1	15000	1684380	280730	67.56	67.33	0.05
1	16500	1852818	280730	76.92	74.71	4.89
1	16500	1852818	280730	76.74	74.71	4.13
1	16500	1852818	280730	76.61	74.71	3.61
1	18000	2021256	280730	81.77	82.09	0.10
1	18000	2021256	280730	79.89	82.09	4.86
1	18000	2021256	280730	80.00	82.09	4.40
0.75	15000	1684380	280730	63.08	64.35	1.62
0.75	15000	1684380	280730	63.61	64.35	0.55
0.75	15000	1684380	280730	60.15	64.35	17.64
0.75	16500	1852818	280730	75.48	71.74	13.98
0.75	16500	1852818	280730	74.05	71.74	5.34
0.75	16500	1852818	280730	73.65	71.74	3.68
0.75	18000	2021256	280730	78.40	79.12	0.51
0.75	18000	2021256	280730	78.19	79.12	0.86
0.75	18000	2021256	280730	76.67	79.12	6.02
1.75	15000	1684380	280730	74.83	76.25	2.01
1.75	15000	1684380	280730	74.39	76.25	3.47
1.75	15000	1684380	280730	76.55	76.25	0.09
1.75	16500	1852818	280730	88.80	83.63	26.71
1.75	16500	1852818	280730	89.04	83.63	29.19



Continuación (Tabla 5.9).

<b>1.75</b>	16500	1852818	280730	88.81	83.63	26.83
<b>1.75</b>	18000	2021256	280730	90.08	91.02	0.87
<b>1.75</b>	18000	2021256	280730	90.09	91.02	0.87
<b>1.75</b>	18000	2021256	280730	90.14	91.02	0.77
<b>1.5</b>	15000	1684380	280730	68.49	73.28	22.89
<b>1.5</b>	15000	1684380	280730	72.06	73.28	1.49
<b>1.5</b>	15000	1684380	280730	69.14	73.28	17.10
<b>1.5</b>	16500	1852818	280730	82.59	80.66	3.72
<b>1.5</b>	16500	1852818	280730	83.03	80.66	5.61
<b>1.5</b>	16500	1852818	280730	83.31	80.66	7.03
<b>1.5</b>	18000	2021256	280730	85.29	88.04	7.56
<b>1.5</b>	18000	2021256	280730	85.66	88.04	5.67
<b>1.5</b>	18000	2021256	280730	84.18	88.04	14.90
<b>1.25</b>	15000	1684380	280730	66.37	70.30	15.49
<b>1.25</b>	15000	1684380	280730	66.58	70.30	13.89
<b>1.25</b>	15000	1684380	280730	67.09	70.30	10.29
<b>1.25</b>	16500	1852818	280730	81.34	77.69	13.34
<b>1.25</b>	16500	1852818	280730	81.50	77.69	14.56
<b>1.25</b>	16500	1852818	280730	81.68	77.69	15.94
<b>1.25</b>	18000	2021256	280730	81.50	85.07	12.75
<b>1.25</b>	18000	2021256	280730	82.47	85.07	6.74
<b>1.25</b>	18000	2021256	280730	82.61	85.07	6.05
<b>1</b>	13200	1852818	224584	78.26	75.50	7.63
<b>1</b>	13200	1852818	224584	78.08	75.50	6.66
<b>1</b>	13200	1852818	224584	78.54	75.50	9.24
<b>1</b>	9900	1852818	168438	77.30	76.28	1.03
<b>1</b>	9900	1852818	168438	76.07	76.28	0.05
<b>1</b>	9900	1852818	168438	76.11	76.28	0.03
<b>1</b>	6600	1852818	112292	74.42	77.07	7.05
<b>1</b>	6600	1852818	112292	76.55	77.07	0.27
<b>1</b>	6600	1852818	112292	77.03	77.07	0.00
<b>1</b>	16500	1482261	224585	77.95	74.73	10.37
<b>1</b>	16500	1482261	224585	76.09	74.73	1.84
<b>1</b>	16500	1482261	224585	76.39	74.73	2.77
<b>1</b>	16500	1111704	168440	75.73	74.75	0.96
<b>1</b>	16500	1111704	168440	73.84	74.75	0.83
<b>1</b>	16500	1111704	168440	74.51	74.75	0.06
<b>1</b>	16500	741114	112290	73.51	74.77	1.58
<b>1</b>	16500	741114	112290	74.28	74.77	0.24
<b>1</b>	16500	741114	112290	74.54	74.77	0.05



**Tabla 5.10.** Resultados de coeficientes y función objetivo una vez aplicado el solver. Realizada por el autor.

Coeficientes	Valor
INT	24.22
A'	11.90
B'	0.002345
C'	0.000023
D'	-0.000152
FO	409.241342

A continuación, se muestran los resultados que pronostica la ecuación de rendimiento. Los datos para poder llegar a esa ecuación siguen la misma línea que la conversión para tener una mayor precisión al utilizar la ecuación para predicciones de porcentaje de rendimiento hacía diésel verde. Llegando así a manejar únicamente 4 efectos para poder generar una ecuación para el cálculo de rendimiento hacía diésel verde llegando así a la Ecuación (19).

**Tabla 5.11.** Estadísticas de la regresión de rendimiento hacía diésel verde. Realizada por el autor.

Coeficiente de correlación múltiple	0.7729
Coeficiente de determinación R <sup>2</sup>	0.5973
R <sup>2</sup> ajustado	0.5695
Error típico	4.2128



**Tabla 5.12.** *Análisis ANOVA del rendimiento hacía diésel verde.*

*Realizada por el autor.*

	Grados de libertad	Suma de cuadrados	Promedio de los cuadrados	F	Valor crítico de F
Regresión	4	1526.89	381.72	21.50	6.41E-11
Residuos	58	1029.36	17.74		
Total	62	2556.26			

**Tabla 5.13.** *Significancia de los coeficientes en el rendimiento hacía diésel verde.*

*Realizada por el autor.*

	Coeficientes	Error típico	Estadístico t	Probabilidad	Inferior 95%	Superior 95%
Intersección	12.84	5.02999	2.5525	0.0133	2.7708	22.9080
A	5.69	1.7527	3.2449	0.0019	2.1789	9.1959
B*C	0.0023	0.00029	7.7822	1.42E-10	0.0016	0.00285
B*D	1.871E-05	2.59E-06	7.2004	1.34E-09	1.35E-05	2.39E-05
C*D	-0.00012	1.80E-05	-6.8691	4.85E-09	-0.00016	-8.78E-05

$$R = 12.84 + 5.69A + 0.0023BC + 1.871 \times 10^{-5}BD - 0.00012CD \dots (19)$$



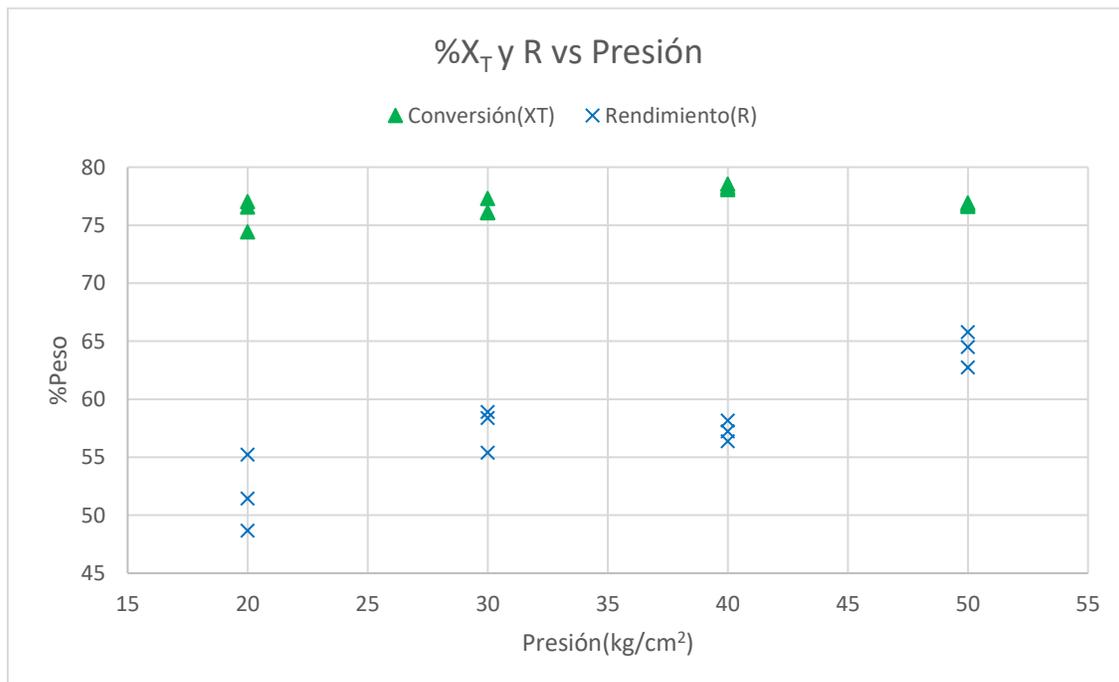
## 5.2. EFECTOS DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN SOBRE LA CONVERSIÓN DE TRIGLICÉRIDOS, RENDIMIENTO HACIA DIÉSEL VERDE Y RUTAS DE REACCIÓN.

### Efecto de la presión

Para mostrar el efecto de la presión en la hidrodeshidrogenación del aceite de soya se elaboraron dos figuras, a condiciones de operación:  $T = 330\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{LHSV} = 1\text{ h}^{-1}$ ,  $\text{H}_2/\text{AS} = 5614.6\text{ ft}^3/\text{bbl}$ , se utilizaron los balances del 4-6 y 46-54.

En la Figura 5.2 se observa que los cambios en la conversión no son relativamente significativos ya que entre parámetros no hay una variabilidad mayor a 5% Peso con respecto a la presión; en cambio con el rendimiento hacia diésel verde aumenta conforme la presión aumenta.

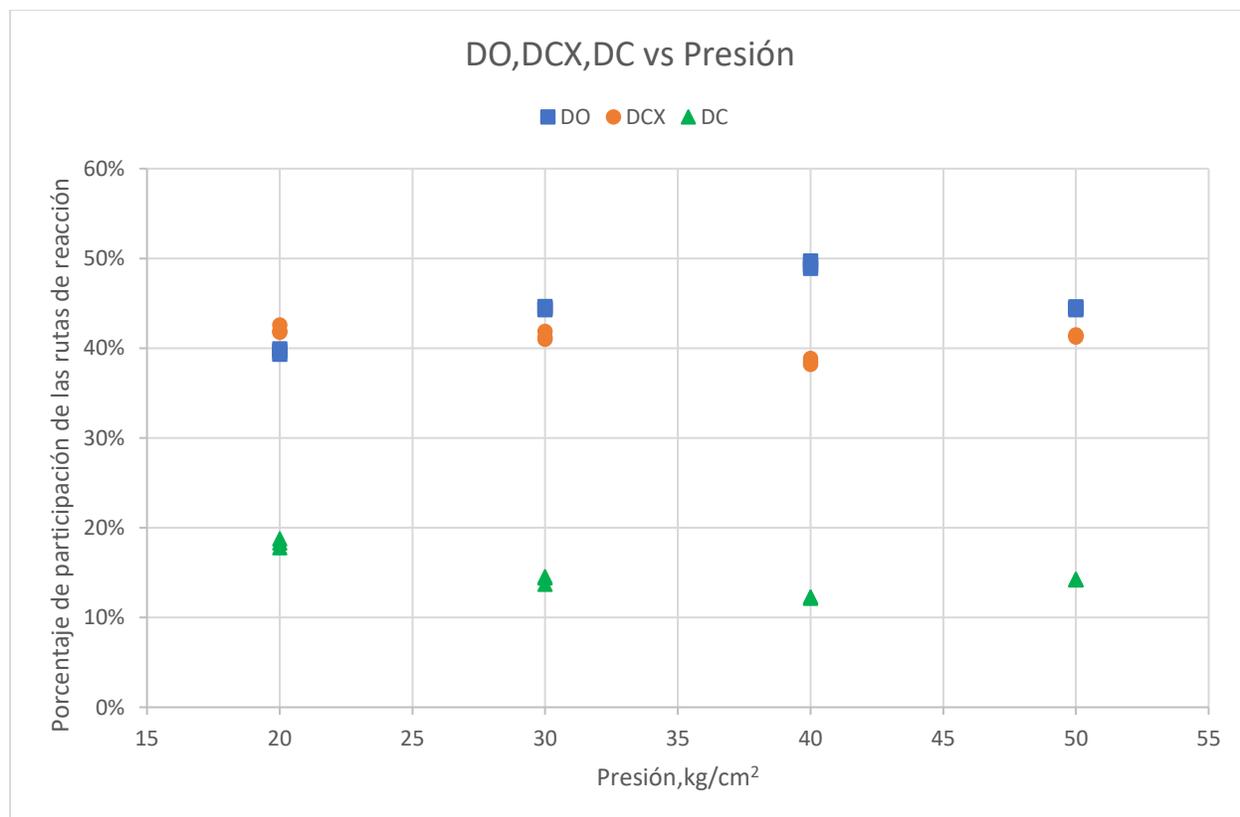
**Figura 5.2.** Efecto de la presión en el proceso de hidrodeshidrogenación del aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor.





En la Figura 5.3 referente a la participación de la reacción de DO se puede apreciar una curva cóncava conforme aumenta la presión con un máximo en 40 kg/cm<sup>2</sup>; mientras que la participación de la reacción DCX se mantiene  $\pm 5$  entre un punto y otro, en la contribución de DC no se observa un descenso uniforme; pero se puede observar que la contribución de DO>DCX>DC a excepción de 20 kg/cm<sup>2</sup>, esto indica una tendencia de que a mayores presiones la contribución de DO va a ser ligeramente mayor que DCX y que la participación de DC va a ser mucho menor que estas dos .

**Figura 5.3.** Efecto de la presión en el proceso de hidrodesoxigenación del aceite de soya. Porcentaje de participación de las reacciones. Realizado por el autor.



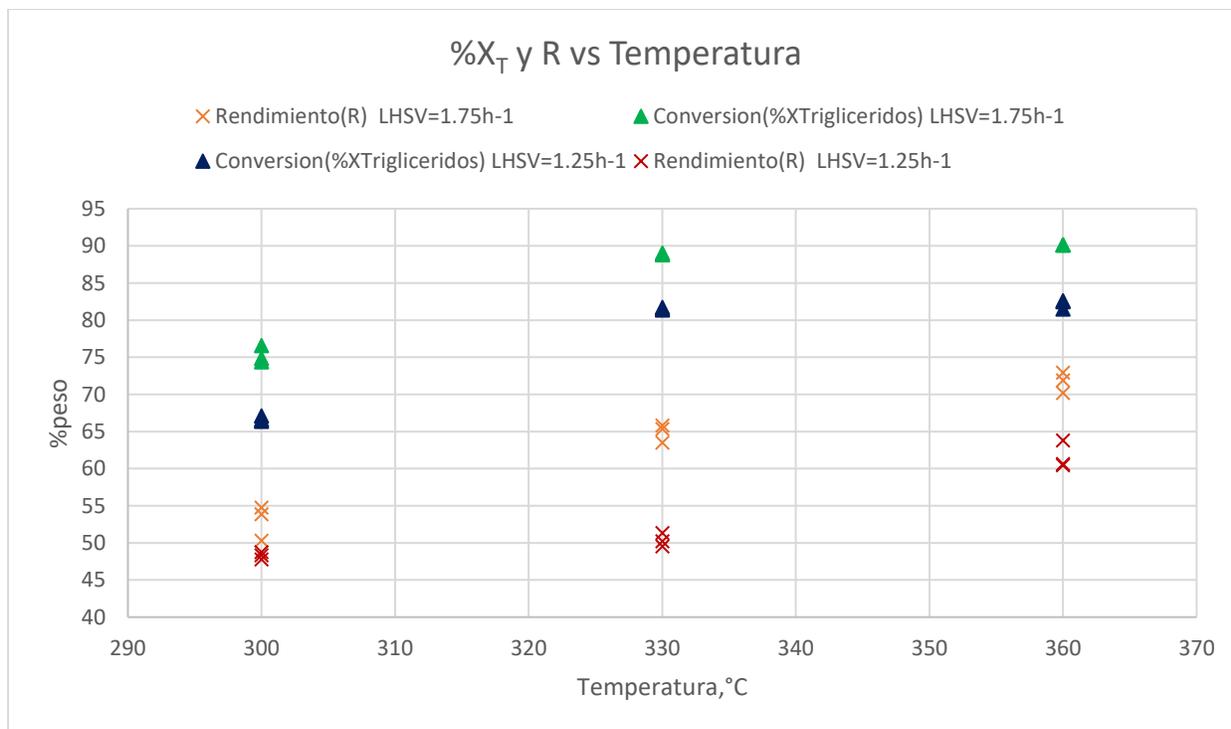


### Efecto de la temperatura.

Para poder entender un criterio importante en la hidrodeshidrogenación del aceite de soya se establecieron dos figuras en las cuales se revisaron los efectos de la temperatura, a condiciones de operación:  $P=50$  kg/h,  $H_2/AS=5614.6$  ft<sup>3</sup>/bbl y LHSV de  $1.75$  h<sup>-1</sup> y  $1.25$  h<sup>-1</sup> se utilizaron los balances del 19-27 (LHSV= $1.75$  h<sup>-1</sup>) y 46-54 (LHSV= $1.25$  h<sup>-1</sup>).

En la Figura 5.4 la relación que se encontró fue que el aumento tiene un efecto positivo en la conversión y rendimiento hacia diésel verde, debido a que estos aumentan de manera significativa con el incremento de la temperatura.

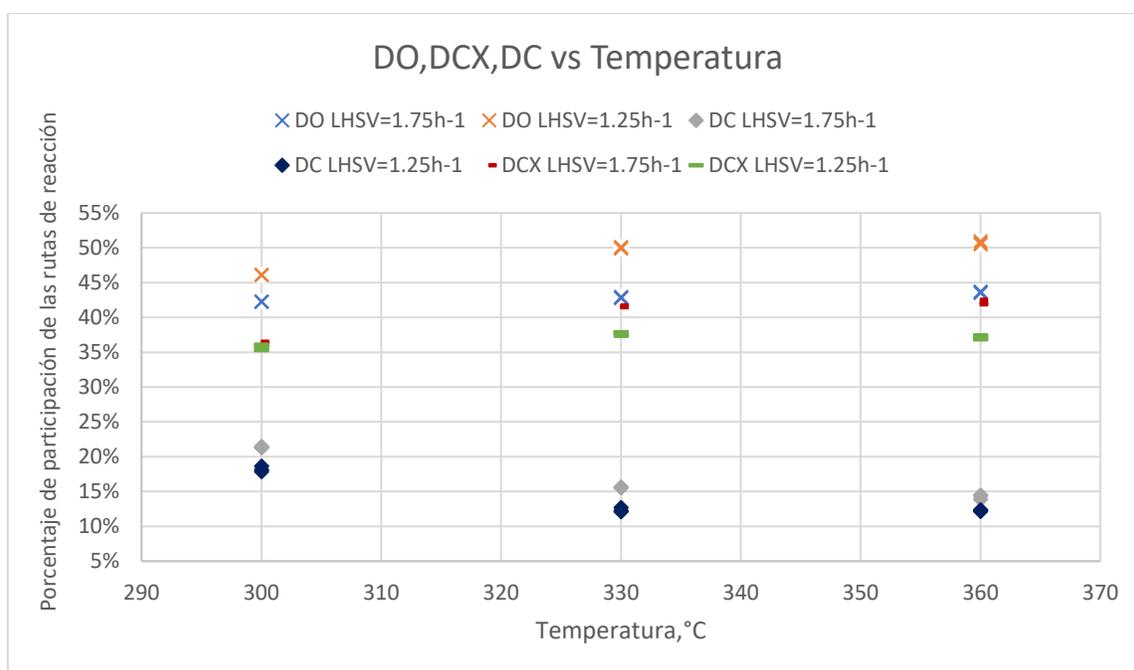
**Figura 5.4.** Efecto de la temperatura en el proceso de hidrodeshidrogenación de aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor.





Mientras que la Figura 5.5 se observa que la reacción DC disminuye; mientras que las reacciones DO y DCX aumentan conforme la temperatura incrementa, independientemente del LHSV utilizado en el proceso. Se observa que el porcentaje de participación de las rutas de reacción siguen un comportamiento donde  $DO > DCX > DC$ .

**Figura 5.5.** Efecto de la temperatura en el proceso de hidrodeshidrogenación del aceite de soya. Porcentaje de participación de las reacciones. Realizado por el autor.



### Efecto de la cantidad de hidrógeno utilizada en la reacción.

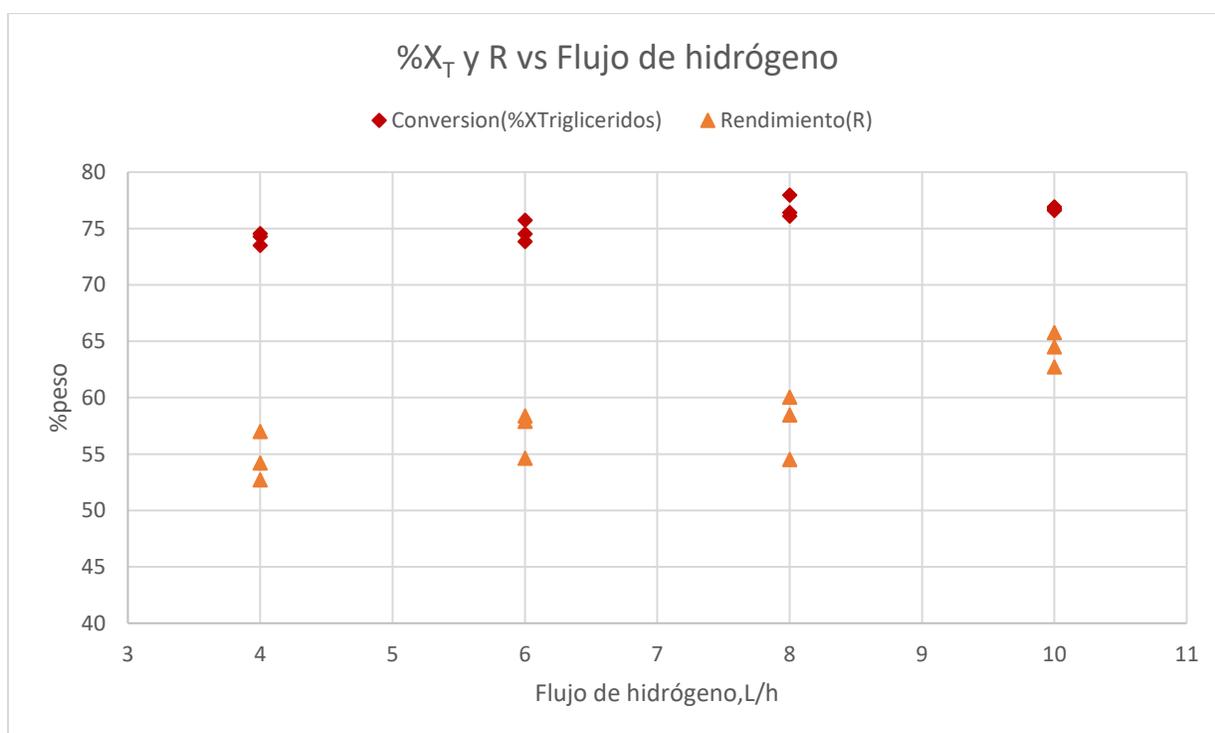
Para ilustrar el efecto de la cantidad de hidrógeno en la hidrodeshidrogenación del aceite de soya se establecieron dos figuras, a condiciones de operación:  $T = 330\text{ °C}$ ,  $LHSV = 1\text{ h}^{-1}$ ,  $P = 50\text{ kg/cm}^2$ , se utilizaron los balances del 4-6 y 55-63.



Tal y como se muestra en la Figura 5.6, se encontró que hay un ligero aumento de la conversión de triglicéridos a medida que la cantidad de hidrógeno incrementa; por otro lado, el rendimiento hacia diésel verde sufre un aumento significativo mientras hay un aumento de la cantidad de hidrógeno.

**Figura 5.6.** Efecto de la cantidad de hidrógeno utilizada en el proceso de hidrodesoxigenación de aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde.

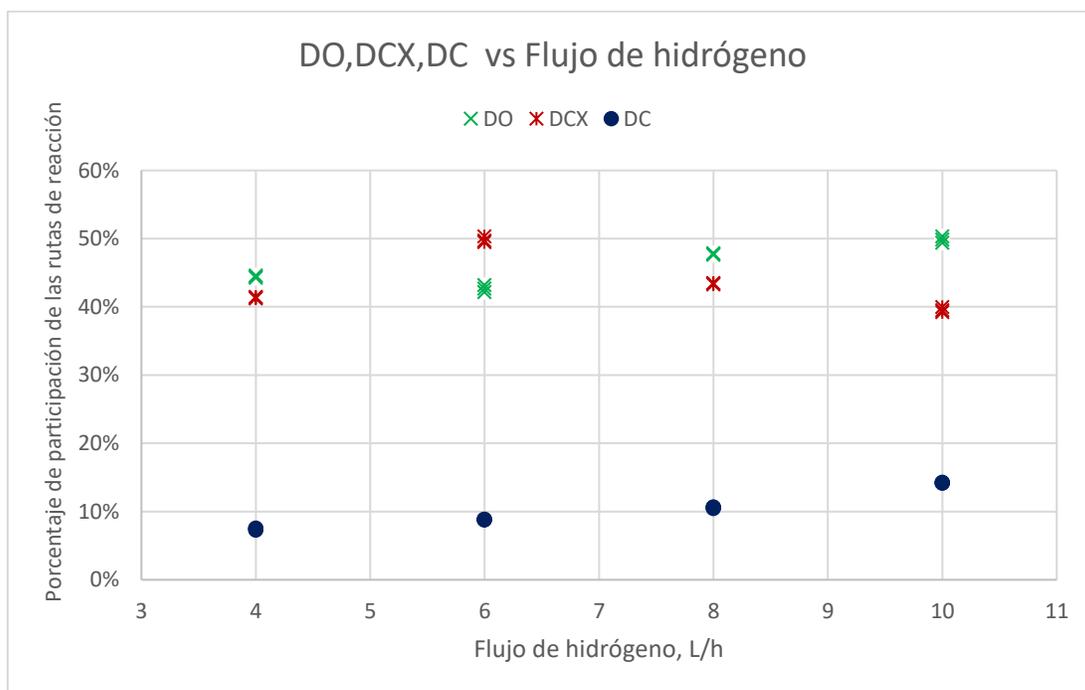
Realizado por el autor.



Como se muestra en la Figura 5.7, para el porcentaje de participación en DCX se observa una curva cóncava con un máximo en 6 L/h, conforme se incrementa el flujo de hidrógeno en el reactor; mientras que para la reacción de DO se observa una curva convexa donde marca un mínimo en 6 L/h conforme se incrementa el flujo de hidrógeno y para el porcentaje de participación de la reacción de DC aumentó conforme sucedía el incremento del flujo de hidrógeno.



**Figura 5.7.** Efecto de la cantidad de hidrógeno utilizada en el proceso de hidrodeshidrogenación de aceite de soya. Porcentaje de participación de las reacciones. Realizado por el autor.



### Efecto del LHSV.

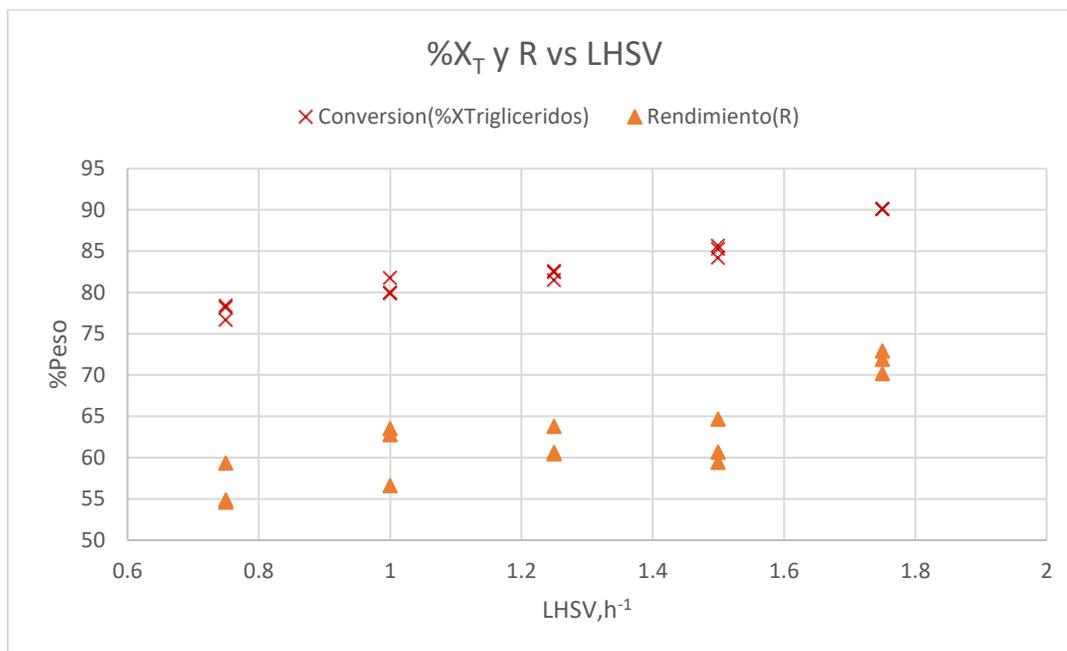
Uno de los criterios más importantes durante la experimentación es el efecto del LHSV para demostrar y tener un criterio del efecto en la hidrodeshidrogenación del aceite de soya, para ello se establecieron dos figuras, a condiciones de operación:  $T=360^{\circ}\text{C}$ ,  $P=50\text{ kg/cm}^2$ ,  $H_2/AS=5614.6\text{ ft}^3/\text{bbl}$ , se utilizaron los balances del 7-9, 16-18, 25-27, 34-36 y 43-45.

En la Figura 5.8 se encontró que hay un ligero aumento de la conversión y rendimiento hacia diésel verde de triglicéridos a medida que el LHSV se incrementa. Además de que el comportamiento que presenta la Figura 5.8 es un resultado interesante ya que al incrementar el LHSV se espera que la conversión y rendimiento hacia diésel verde disminuyan, pero en este caso tenemos la tendencia opuesta, esto debido al



aumento y disminución del flujo de hidrógeno durante la experimentación afectando el comportamiento sobre la conversión y el rendimiento hacia diésel verde.

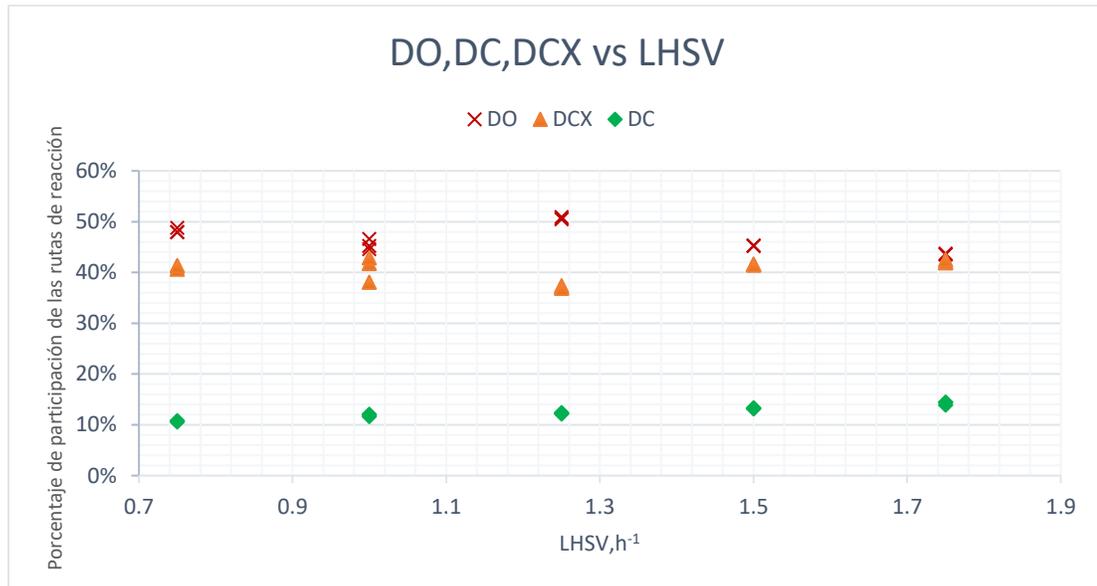
**Figura 5.8.** Efecto del LHSV utilizado en el proceso de hidrodeseoxigenación de aceite de soya. Conversión y rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor.



Como se muestra en la Figura 5.9, para el porcentaje de participación en DCX y DO considerando errores experimentales se puede tratar de líneas horizontales lo cual indica que a mayor LHSV la conversión va a ser constante, para DC aumento mínimamente conforme sucedía el incremento. Se observa que el porcentaje de participación de las rutas de reacción siguen un comportamiento donde  $DO > DCX > DC$ .



**Figura 5.9.** Efecto del LHSV utilizado en el proceso de hidrodeshidrogenación de aceite de soya. Conversión y Rendimiento hacia diésel verde. Realizado por el autor.



Para el balance de materia obtenido (Apéndice C) para cada balance durante la hidrodeshidrogenación de aceite de soya se obtuvo una pérdida o ganancia menor al 5%. La manera en que se calculó la pérdida o ganancia fue de la siguiente manera.

$$\text{Pérdida o ganancia} = \frac{m_{te} - m_{ts}}{m_{te}} \times 100 \dots (20)$$

Donde  $m_{te}$  es la masa total de entrada en gramos.

Donde  $m_{ts}$  es la masa total de Salida en gramos.

Donde la *Pérdida o ganancia* tiene unidades de porcentaje peso.



### 5.3. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE LOS MODELOS (CONVERSIÓN, RENDIMIENTO).

En este trabajo se realizó un análisis de sensibilidad donde se representa la variación de cada uno de los coeficientes cuando estos son sometidos a una perturbación, se presentan las gráficas realizadas a los coeficientes que constituyen los modelos (conversión y rendimiento); en el eje X se indica el intervalo de -20 a 20% de perturbación mientras que en el eje Y se muestran los valores del resultado de la función objetivo. Para cada intervalo se tomó un valor de 5 en 5 comenzando en -20 hasta llegar a 20.

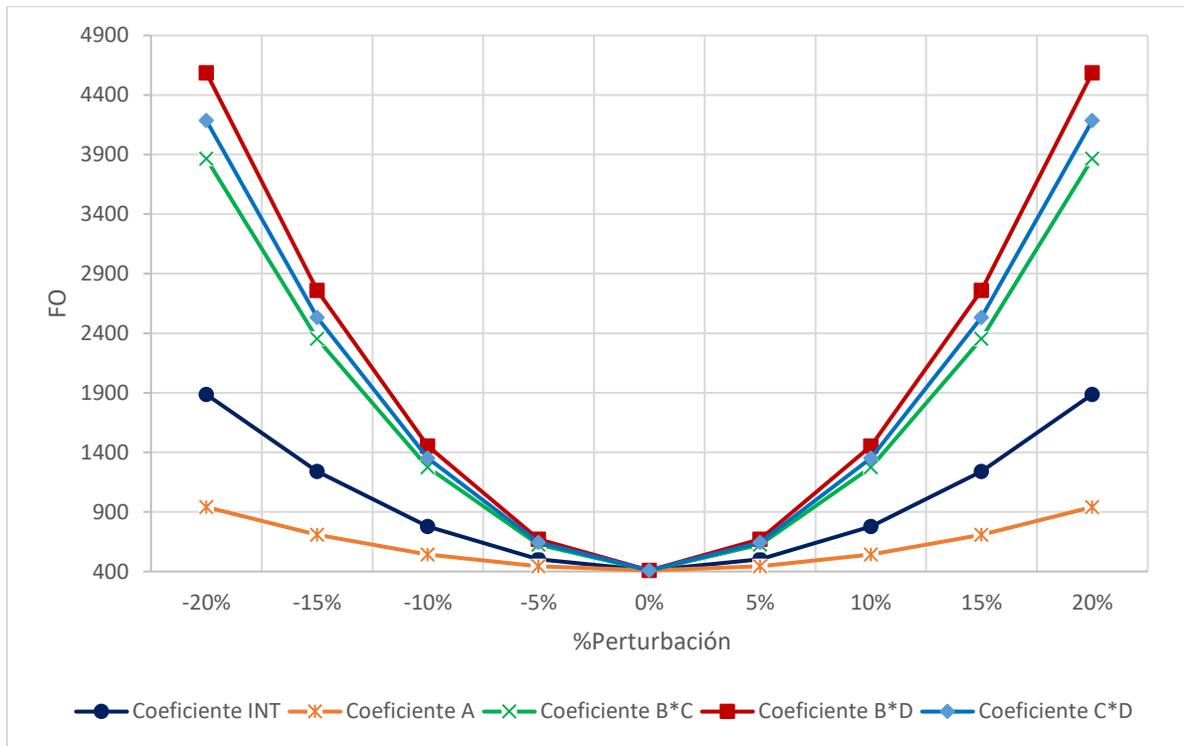
Para la perturbación de los coeficientes obtenidos en el modelo de la conversión se llegó a los resultados mostrados en la Tabla 5.14 y Figura 5.10.

**Tabla 5.14.** Resultados de las funciones objetivo con cada perturbación realizada del modelo de predicción para la conversión. Realizada por el autor.

%Perturbación	Coficiente de la variable INT	Coficiente de la variable A	Coficiente de la variable B*C	Coficiente de la variable B*D	Coficiente de la variable C*D
-20	1886.90	941.06	3865.42	4585.92	4184.73
-15	1240.38	708.37	2353.34	2758.62	2532.95
-10	778.60	542.17	1273.29	1453.41	1353.11
-5	501.56	442.46	625.25	670.28	645.21
0	409.24	409.24	409.24	409.24	409.24
5	501.66	442.51	625.25	670.28	645.21
10	778.81	542.27	1273.29	1453.41	1353.11
15	1240.70	708.52	2353.34	2758.62	2532.95
20	1887.32	941.26	3865.42	4585.92	4184.73



**Figura 5.10.** *Análisis de sensibilidad de los coeficientes del modelo de predicción para la conversión. Realizada por el autor.*



La Figura 5.10 ilustra cómo la función objetivo converge hacia el mínimo global de 409.24 cuando no se realizan perturbaciones a los coeficientes del modelo. La perturbación del coeficiente asociado a la variable A provoca cambios suaves en la función objetivo, los cuales son cercanos al mínimo global. Por otro lado, la curva asociada al coeficiente asociado a la variable INT revela una sensibilidad moderada, evidenciando cambios apreciables, pero no excesivos en la función objetivo cuando el coeficiente de la variable INT es perturbado. Por otro lado, las curvas relacionadas con los coeficientes asociados a las variables (BC), (BD) y (CD) exhiben una alta sensibilidad ante perturbaciones, lo que implica alteraciones notables en la función objetivo. De esta manera, se infiere que el término más significativo es el que involucra la multiplicación de las variables BD, ya que cualquier modificación en su coeficiente provocará cambios



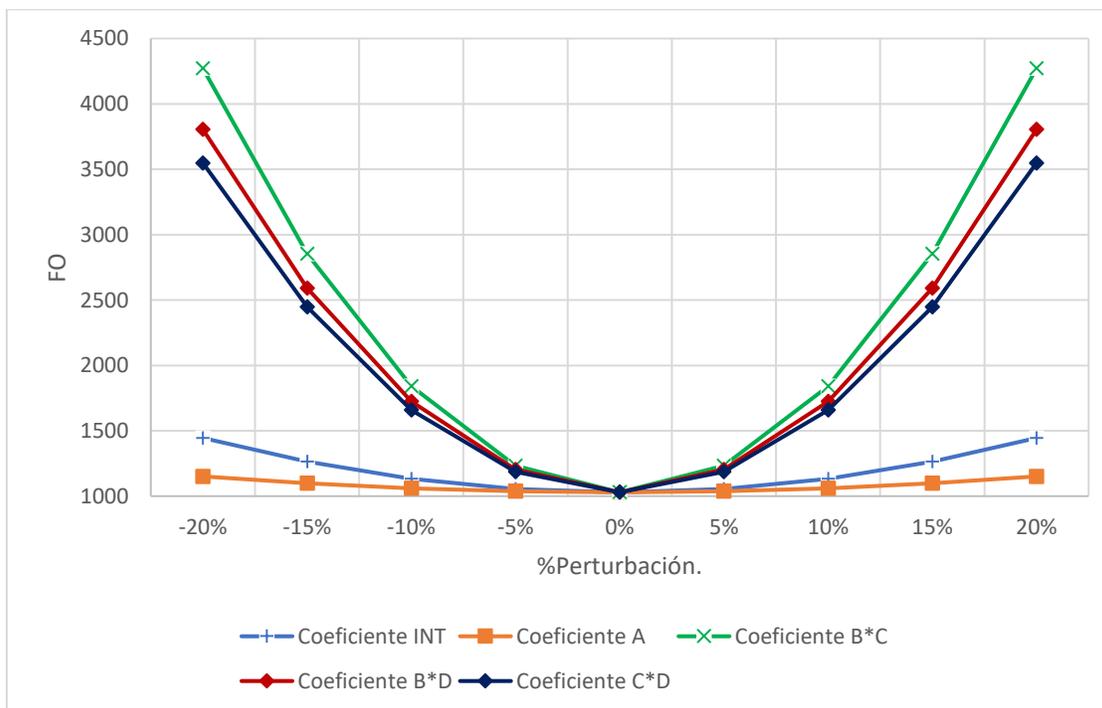
sustanciales en la función objetivo y por ende en la conversión.

Para la perturbación de los coeficientes obtenidos en el modelo del rendimiento se llegó a los resultados mostrados en la Tabla 5.15 y Figura 5.11.

**Tabla 5.15.** Resultados de las funciones objetivo con cada perturbación realizada del modelo de predicción para el rendimiento. Realizada por el autor.

%Perturbación	Coefficiente de la variable INT	Coefficiente de la variable A	Coefficiente de la variable B*C	Coefficiente de la variable B*D	Coefficiente de la variable C*D
-20	1444.79	1150.91	4270.73	3804.17	3547.79
-15	1263.04	1097.74	2852.63	2590.19	2445.98
-10	1133.22	1059.75	1839.71	1723.07	1658.97
-5	1055.33	1036.96	1231.95	1202.79	1186.77
0	1029.37	1029.37	1029.37	1029.37	1029.37
5	1055.33	1036.96	1231.95	1202.79	1186.77
10	1133.22	1059.75	1839.71	1723.07	1658.97
15	1263.04	1097.74	2852.63	2590.19	2445.98
20	1444.79	1150.91	4270.73	3804.17	3547.79

**Figura 5.11.** Análisis de sensibilidad de los coeficientes del modelo de predicción para el rendimiento. Realizada por el autor.





En la Figura 5.11 se observa como la función objetivo converge hacia el mínimo global, el cual corresponde a 1055.33 cuando no se realizan perturbaciones a los coeficientes obtenidos en el modelo. La perturbación de los coeficientes asociados a las variables A y INT provocan cambios suaves en la función objetivo, los cuales son cercanos al mínimo global; por otro lado, las curvas asociadas a los coeficientes asociados a las variables (BC), (BD) y (CD) revelan una sensibilidad moderada debido a los cambios apreciables, pero no excesivos en la función objetivo cuando los coeficientes son perturbados de esta manera, se deduce que el término más significativo es el que involucra la multiplicación de las variables (BC), ya que cualquier modificación en su coeficiente provocara cambios sustanciales en la función objetivo y por ende en el rendimiento hacia diésel verde.



## 6. DISCUSIÓN.

En este apartado se evaluará la interpretación de los resultados y su confrontación con la hipótesis planteada y la capacidad del modelo de reacción para producir los resultados experimentales de cada corrida.

El producto líquido que se obtiene a la salida del reactor (Apéndice B) se conforma por los compuestos que se formaron mediante la hidrodeshidrogenación de aceite de soya, los cuales son agua, diésel verde (parafinas, isoparafinas, naftenos y olefinas) y por compuestos oxigenados (ácidos carboxílicos, esterres, alcoholes, y aldehídos); además de los triglicéridos que no se convirtieron.

Durante el análisis del Apéndice B se observa que en la fase gas, los compuestos que se produjeron en mayor cantidad fueron el propano, CO y CO<sub>2</sub>. Esto se puede explicar ya que el CO y CO<sub>2</sub> se producen por medio de las reacciones de descarboxilación y descarbonilación de los ácidos carboxílicos. Por otra parte, el propano se produce mediante la reacción intermedia. La formación de metano posiblemente se produjo a partir de la desintegración de hidrocarburos de mayor peso molecular.

El balance de materia general indica que la operación se llevó a cabo de manera adecuada. Los valores positivos nos indican que hubo una pérdida y los valores negativos una ganancia.

La estimación de la conversión se calculó en base a la ecuación (2), así que se trabajó en base al cálculo realizado.

Se realizó el experimento en la planta piloto con la finalidad de encontrar la relación que existe con cada uno de los factores en base a la conversión y rendimiento. En base a los resultados de la regresión realizada, una forma de tener certeza de que



nuestros modelos sean correctos fue el valor del coeficiente de determinación  $R^2$  ya que cuanto mayor sea el coeficiente de determinación  $R^2$ , mejor será el modelo explicativo otra justificación fue la  $R^2$  ajustada ya que con el valor del coeficiente de determinación de  $R^2$  y  $R^2$  ajustado, cuando la diferencia entre ellas es menor a 0.2; significa que el modelo es bien aceptado con las variables establecidas y algo de suma importancia fue que el valor crítico de F en cada modelo fue menor a 0.05 lo cual estadísticamente establece que nuestro modelo es significativo y por tanto las variables independientes se relacionan con la variable dependiente. De otra forma, se establece que los resultados son significativos debido al análisis de sensibilidad realizado para cada uno de los coeficientes de los modelos establecidos; cada modelo se observa de manera aceptable al mínimo global ya que si estas perturbaciones realizadas fueran de magnitudes completamente diferentes o alejadas del mínimo global nos indicaría un error en estas predicciones y los coeficientes serían diferentes a los encontrados.

En base a la hipótesis planteada de la experimentación; se llevó a cabo la reacción en un reactor de lecho fijo teniendo como variables T, P, LHSV,  $H_2/AS$  evaluando la conversión y el rendimiento; se evaluó que a ciertas condiciones la conversión y rendimiento muestran algunas características de acuerdo con los factores propuestos.

En base a la presión los cambios en la conversión no son relativamente significativos ya que entre ellos no existe una variabilidad mayor a 5% peso con respecto a la presión, sin embargo, con el rendimiento aumenta conforme la presión aumenta, mientras tanto se puede observar una característica importante durante la interpretación del porcentaje de participación de las rutas de reacción el cual indica que la contribución de  $DO > DCX > DC$  conforme aumentamos la presión después de 20 kg/cm<sup>2</sup>.



Basándonos en la T y LHSV, se anticipaba en la hipótesis que estos serían factores de mayor influencia en la conversión, y efectivamente lo son. Como se observa en las Figuras 5.4 y 5.8, al operar con valores elevados de estas variables, se puede asegurar un porcentaje de conversión y un rendimiento hacia diésel verde cercanos al 90%. Partiendo de esta premisa, se preveía que al emplear temperaturas altas y una alta relación  $H_2/AS$ , junto con un LHSV bajo, se favorecería la reacción. Sin embargo, esta suposición no se cumplió, ya que, si mantenemos el flujo de  $H_2$  constante, se esperaría que la conversión y el rendimiento disminuyeran al incrementar la LHSV. Sin embargo, nuestro flujo de  $H_2$  se estuvo modificando, lo que afectó el comportamiento de la conversión y el rendimiento. Podemos afirmar que operar con LHSV y temperaturas elevadas favoreció la reacción, resultando en una alta conversión.

Por otro lado, en cuanto al flujo de hidrógeno hay un ligero aumento en la conversión conforme este incrementa y en el rendimiento hay un aumento significativo.

De otra forma esto se puede analizar mejor con la Figura 5.5 las reacciones DO y DCX aumentan conforme la temperatura incrementa mientras que DC disminuye independientemente del LHSV utilizado. Esto nos indica que la T es un factor de mayor influencia sobre P, LHSV y  $H_2/AS$ .

En cuanto a las rutas de reacción con cualquiera de los factores manejados durante la experimentación se observa que:

$$DC < DCX < DO$$



## 7.CONCLUSIONES.

Se observo que la conversión de triglicéridos y rendimiento hacia diésel verde se favorecieron gracias al aumento de T y LHSV, siendo estas un factor de mayor influencia; por otra parte, debido al aumento y disminución del flujo de hidrogeno, la naturaleza de la reacción fue diferente a lo planteado en la hipótesis. Se generaron dos respuestas por la naturaleza de la reacción ( $\%X_T$  y R); ya que, al obtener el resultado de estas, se recaba la información de los intermediarios de reacción.

Gracias al análisis de datos y a los diversos resultados que este arroja (Estadísticas de la regresión, ANOVA y la significancia de los coeficientes) se establecieron los modelos encontrados para cada respuesta ( $\%X_T$  y R), los cuales son significativos, los coeficientes obtenidos son modelos no lineales, se escogieron a que estos son más exactos que los modelos lineales, ya que las métricas de error son menores.

Del análisis de sensibilidad se determinó cuáles eran los parámetros de ajuste de mayor influencia en las respuestas (perturbación de coeficientes), aunque cabe destacar que la temperatura sí es un factor de mayor influencia en el modelo. Se observó que las reacciones DO y DCX se ven favorecidas al aumentar la temperatura, mientras que el comportamiento de la reacción DC disminuye cuando aumenta este factor.

El nexo que existe entre el aceite vegetal procesado y la masa de parafinas se pueden englobar mediante la masa de los triglicéridos procesados, la contribución de cada una de las rutas de reacción (DO, DCX y DC), y una relación de pesos moleculares obtenida mediante un balance de masa, aunque esta tesis no engloba estos cálculos debido a la falta de experimentaciones, pero podría ser retomada como un punto de



partida.

Se utilizó una representación de una corriente de aceite relacionando un triglicérido aleatorio a un triglicérido simple, sin embargo, existen más representaciones, se eligió esta representación en base al criterio de lo ya desarrollado en el IMP.

El estudio de este trabajo está completamente basado en la relación que hay en la hidroxigenación de aceite de soya para la producción de diésel verde y los resultados característicos durante la experimentación; pero se podría retomar este trabajo no solo para probar otra predicción para la obtención de la masa de parafinas; sino también para obtener la cinética de la reacción con los experimentos realizados.



## 8.REFERENCIAS.

1. Foster S, Elzinga D. El papel de los combustibles fósiles en un sistema energético sostenible. *Revista Crónica ONU*. 2015;52.
2. Villadiego L, Castro N. Soja: ¿La nueva palma de los biocombustibles? Los impactos socioambientales del monocultivo sojero para dar respuesta a la demanda de biocombustibles en Europa. *Revista Ecologistas en Acción*,1. 2020;
3. Zhang B, Wu J, Yang C, Qiu Q, Yan Q, Li R, et al. Recent Developments in Commercial Processes for Refining Bio-Feedstocks to Renewable Diesel. *Bioenergy Res.* el 1 de septiembre de 2018;11.
4. Douvartzides SL, Charisiou ND, Papageridis KN, Goula MA. Green diesel: Biomass feedstocks, production technologies, catalytic research, fuel properties and performance in compression ignition internal combustion engines. Vol. 12, *Energies*. MDPI AG; 2019.
5. Srifa A, Faungnawakij K, Itthibenchapong V, Assabumrungrat S. Roles of monometallic catalysts in hydrodeoxygenation of palm oil to green diesel. *Chemical Engineering Journal*. 2015;278.
6. Martínez R, Masera O. Perspectivas de disminución de emisiones de carbono en México por el uso de la bionergía: panorama actual. *Elementos para Políticas Públicas*. enero de 2020;
7. Aldana H, Lozano FJ, Acevedo J. Evaluating the potential for producing energy from agricultural residues in México using MILP optimization. *Biomass Bioenergy*. 2014;67.
8. Álvarez C. Biocombustibles: desarrollo histórico-tecnológico, mercados actuales y comercio internacional. 2009;63–89.
9. Castañeda I. Evaluación de catalizadores ni/zeolita (HZSM-5 Y H-BETA) para la producción de diésel verde. IAN CASTAÑEDA JIMENEZ. Ciudad de México.; 2019.
10. Nelson DL, Cox M, Foix C, León S, Roca J. *Lehninger Principios de Bioquímica*. Ediciones Omega. 2009.
11. Torres LP. Análisis de tendencias en biocombustibles para la definición de líneas estratégicas de investigación y desarrollo en Colombia. Pontificia Universidad JAVERIANA Bogotá; 2013.
12. ASTM D975, “Standard Specification for Diesel Fuel Oils”,. 2017.
13. Macor A, Avella F, Faedo D. Effects of 30% v/v biodiesel/diesel fuel blend on regulated and unregulated pollutant emissions from diesel engines. *Appl Energy*. 2011;88.
14. Knothe G. Some aspects of biodiesel oxidative stability. Vol. 88, *Fuel Processing Technology*. 2007.
15. Méndez C. Refinación del aceite crudo de palma acondicionado como carga a un proceso de hidrodeseoxigenación (HDO). [Ciudad de México]: INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO; 2019.
16. Hernandez J. Tesis de Licenciatura UNAM. Implementación en aspen de un modelo de reacción para la producción de diésel verde a partir de aceite de palma en un reactor de lecho fijo. Ciudad de México.; 2016.
17. Martinez E, Ramírez LF, Amezcua MA, Aburto J. Process simulation and techno-economic analysis of bio-jet fuel and green diesel production — Minimum selling prices. *Chemical Engineering Research and Design*. 2019;



## Apéndice A.

Experimentos por balance.

BALANCE No.	DURACION H	LHSV 1/h	TEMP. °C	PRESIÓN kg/cm <sup>2</sup>	“Aceite de Soya” mL/h	“Hidrógeno” L/h std
1	15	3	300	50	10	10
2	15	1	300	50	10	10
3	15	1	300	50	10	10
Incrementar la temperatura a 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm <sup>2</sup> , mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, mantener el flujo de H <sub>2</sub> en 10 L/h Estabilización por 10 h						
4	15	1	330	50	10	10
5	15	1	330	50	10	10
6	15	1	330	50	10	10
Aumentar la temperatura a 360 °C, mantener la presión en 50 kg/cm <sup>2</sup> , mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, mantener el flujo de H <sub>2</sub> en 10 L/h Estabilización por 10 h						
7	15	1	360	50	10	10
8	15	1	360	50	10	10
9	15	1	360	50	10	10
Disminuir la temperatura a 300 °C, mantener la presión en 50 kg/cm <sup>2</sup> , disminuir el flujo de aceite de soya a 7.5 mL/h, disminuir el flujo de H <sub>2</sub> a 7.5 L/h Estabilización por 10 h						
10	20	0.75	300	50	7.5	7.5
11	20	0.75	300	50	7.5	7.5
12	20	0.75	300	50	7.5	7.5
Incrementar la temperatura a 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm <sup>2</sup> , mantener el flujo de aceite de soya en 7.5 mL/h, mantener el flujo de H <sub>2</sub> en 7.5 L/h Estabilización por 10 h						
13	20	0.75	330	50	7.5	7.5
14	20	0.75	330	50	7.5	7.5
15	20	0.75	330	50	7.5	7.5



Aumentar la temperatura a 360 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 7.5 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 7.5 L/h  
Estabilización por 10 h

16	20	0.75	360	50	7.5	7.5
17	20	0.75	360	50	7.5	7.5
18	20	0.75	360	50	7.5	7.5

Disminuir la temperatura a 300 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, aumentar el flujo de aceite de soya a 17.5 mL/h, aumentar el flujo de H<sub>2</sub> a 17.5 L/h  
Estabilización por 10 h

19	8.6	1.75	300	50	17.5	17.5
20	8.6	1.75	300	50	17.5	17.5
21	8.6	1.75	300	50	17.5	17.5

Incrementar la temperatura a 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 17.5 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 17.5 L/h  
Estabilización por 10 h

22	8.6	1.75	330	50	17.5	17.5
23	8.6	1.75	330	50	17.5	17.5
24	8.6	1.75	330	50	17.5	17.5

Aumentar la temperatura a 360 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 17.5 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 17.5 L/h  
Estabilización por 10 h

25	8.6	1.75	360	50	17.5	17.5
26	8.6	1.75	360	50	17.5	17.5
27	8.6	1.75	360	50	17.5	17.5

Disminuir la temperatura a 300 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, disminuir el flujo de aceite de soya a 15 mL/h, disminuir el flujo de H<sub>2</sub> a 15 L/h  
Estabilización por 10 h

28	10	1.5	300	50	15	15
29	10	1.5	300	50	15	15
30	10	1.5	300	50	15	15



Incrementar la temperatura a 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 15 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 15 L/h  
Estabilización por 10 h

31	10	1.5	330	50	15	15
32	10	1.5	330	50	15	15
33	10	1.5	330	50	15	15

Aumentar la temperatura a 360 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 15 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 15 L/h  
Estabilización por 10 h

34	10	1.5	360	50	15	15
35	10	1.5	360	50	15	15
36	10	1.5	360	50	15	15

Disminuir la temperatura a 300 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, disminuir el flujo de aceite de soya a 12.5 mL/h, disminuir el flujo de H<sub>2</sub> a 12.5 L/h  
Estabilización por 10 h

37	12	1.25	300	50	12.5	12.5
38	12	1.25	300	50	12.5	12.5
39	12	1.25	300	50	12.5	12.5

Incrementar la temperatura a 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 12.5 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 12.5 L/h  
Estabilización por 10 h

40	12	1.25	330	50	12.5	12.5
41	12	1.25	330	50	12.5	12.5
42	12	1.25	330	50	12.5	12.5

Aumentar la temperatura a 360 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 12.5 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 12.5 L/h  
Estabilización por 10 h

43	12	1.25	360	50	12.5	12.5
44	12	1.25	360	50	12.5	12.5
45	12	1.25	360	50	12.5	12.5



Disminuir la temperatura a 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, disminuir el flujo de aceite de soya a 10 mL/h, disminuir el flujo de H<sub>2</sub> a 10 L/h  
Estabilización por 10 h

46	15	1	330	40	10	10
47	15	1	330	40	10	10
48	15	1	330	40	10	10

Mantener la temperatura en 330 °C, disminuir la presión a 30 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 10 L/h  
Estabilización por 10 h

49	15	1	330	30	10	10
50	15	1	330	30	10	10
51	15	1	330	30	10	10

Mantener la temperatura en 330 °C, disminuir la presión a 20 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, mantener el flujo de H<sub>2</sub> en 10 L/h  
Estabilización por 10 h

52	15	1	330	20	10	10
53	15	1	330	20	10	10
54	15	1	330	20	10	10

Mantener la temperatura en 330 °C, aumentar la presión a 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, disminuir el flujo de H<sub>2</sub> a 8 L/h  
Estabilización por 10 h

55	15	1	330	50	10	8
56	15	1	330	50	10	8
57	15	1	330	50	10	8

Mantener la temperatura en 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, disminuir flujo de H<sub>2</sub> a 6 L/h  
Estabilización por 10 h

58	15	1	330	50	10	6
59	15	1	330	50	10	6
60	15	1	330	50	10	6



Mantener la temperatura en 330 °C, mantener la presión en 50 kg/cm<sup>2</sup>, mantener el flujo de aceite de soya en 10 mL/h, disminuir flujo de H<sub>2</sub> a 4 L/h  
Estabilización por 10 h

61	15	1	330	50	10	4
62	15	1	330	50	10	4
63	15	1	330	50	10	4

**Apéndice B.**

Resultados de la cromatografía realizada en el IMP.

Factores:

---

Balance	LHSV	T	PRESIÓN	Relación H <sub>2</sub> /AS
	1/h	°C	kg/cm <sup>2</sup>	ft <sup>3</sup> /bbl
1	1	300	50	5614.6
2	1	300	50	5614.6
3	1	300	50	5614.6
4	1	330	50	5614.6
5	1	330	50	5614.6
6	1	330	50	5614.6
7	1	360	50	5614.6
8	1	360	50	5614.6
9	1	360	50	5614.6
10	0.75	300	50	5614.6
11	0.75	300	50	5614.6
12	0.75	300	50	5614.6
13	0.75	330	50	5614.6
14	0.75	330	50	5614.6
15	0.75	330	50	5614.6
16	0.75	360	50	5614.6
17	0.75	360	50	5614.6
18	0.75	360	50	5614.6
19	1.75	300	50	5614.6
20	1.75	300	50	5614.6
21	1.75	300	50	5614.6
22	1.75	330	50	5614.6
23	1.75	330	50	5614.6
24	1.75	330	50	5614.6
25	1.75	360	50	5614.6
26	1.75	360	50	5614.6
27	1.75	360	50	5614.6
28	1.5	300	50	5614.6
29	1.5	300	50	5614.6



30	1.5	300	50	5614.6
31	1.5	330	50	5614.6
32	1.5	330	50	5614.6
33	1.5	330	50	5614.6
34	1.5	360	50	5614.6
35	1.5	360	50	5614.6
36	1.5	360	50	5614.6
37	1.25	300	50	5614.6
38	1.25	300	50	5614.6
39	1.25	300	50	5614.6
40	1.25	330	50	5614.6
41	1.25	330	50	5614.6
42	1.25	330	50	5614.6
43	1.25	360	50	5614.6
44	1.25	360	50	5614.6
45	1.25	360	50	5614.6
46	1	330	40	5614.6
47	1	330	40	5614.6
48	1	330	40	5614.6
49	1	330	30	5614.6
50	1	330	30	5614.6
51	1	330	30	5614.6
52	1	330	20	5614.6
53	1	330	20	5614.6
54	1	330	20	5614.6
55	1	330	50	4491.7
56	1	330	50	4491.7
57	1	330	50	4491.7
58	1	330	50	3368.8
59	1	330	50	3368.8
60	1	330	50	3368.8
61	1	330	50	2245.8
62	1	330	50	2245.8
63	1	330	50	2245.8



Balance de materia obtenido para cada balance:

Balance	Duración	Líquido (Entrada) (Triglicéridos)	Gas (Entrada) (H <sub>2</sub> )	Masa total Entrada	Gas (Salida)	Líquido Salida	Masa total salida	Perdida o ganancia
	(h)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	%peso
1	15	151.12	12.40	163.51	23.67	131.50	155.17	5.10
2	15	153.82	12.41	166.23	23.68	135.40	159.08	4.30
3	15	152.74	12.43	165.16	23.67	134.23	157.90	4.40
4	15	152.11	12.37	164.48	28.48	142.42	170.89	-3.90
5	15	153.39	12.45	165.84	28.48	144.33	172.80	-4.20
6	15	153.82	12.35	166.17	28.48	146.33	174.81	-5.20
7	15	152.74	12.46	165.20	33.28	124.32	157.60	4.60
8	15	152.11	12.39	164.50	33.28	136.65	169.92	-3.30
9	15	153.39	12.41	165.80	33.28	136.17	169.45	-2.20
10	20	152.77	12.40	165.17	23.54	138.50	162.04	1.90
11	20	152.74	12.42	165.16	23.54	137.00	160.53	2.80
12	20	152.11	12.42	164.53	23.54	147.90	171.44	-4.20
13	20	153.39	12.42	165.81	28.33	133.33	161.66	2.50
14	20	152.77	12.42	165.19	28.34	139.99	168.33	-1.90
15	20	154.08	12.40	166.49	28.34	143.64	171.98	-3.30
16	20	152.11	12.43	164.54	33.14	126.13	159.27	3.20
17	20	153.39	12.42	165.81	33.14	127.86	161.00	2.90
18	20	152.77	12.43	165.20	33.15	137.01	170.15	-3.00
19	8.6	154.08	12.43	166.51	20.78	149.72	170.51	-2.40
20	8.6	151.90	14.56	166.46	19.49	149.97	169.46	-1.80
21	8.6	153.39	12.61	166.00	20.84	139.68	160.52	3.30
22	8.6	152.77	12.45	165.22	39.91	128.78	168.69	-2.10
23	8.6	154.08	14.52	168.61	33.92	127.61	161.52	4.20
24	8.6	151.90	12.48	164.38	33.86	127.73	161.59	1.70
25	8.6	153.71	12.68	166.38	34.99	136.55	171.54	-3.10
26	8.6	152.77	14.26	167.03	36.02	134.68	170.70	-2.20
27	8.6	154.08	12.93	167.01	36.78	132.73	169.51	-1.50
28	10	151.90	12.44	164.34	21.82	147.61	169.44	-3.10
29	10	153.71	12.40	166.10	24.89	133.41	158.29	4.70
30	10	150.73	12.40	163.13	25.01	143.35	168.35	-3.20
31	10	154.08	12.39	166.47	33.11	135.19	168.30	-1.10
32	10	151.90	12.44	164.34	31.93	129.95	161.88	1.50
33	10	153.71	12.40	166.11	33.38	129.57	162.95	1.90
34	10	150.73	12.42	163.15	34.00	125.23	159.23	2.40



35	10	149.19	12.43	161.62	34.70	121.58	156.29	3.30
36	10	151.90	12.40	164.30	34.13	134.11	168.24	-2.40
37	12	153.71	12.42	166.13	24.59	147.02	171.61	-3.30
38	12	150.73	12.40	163.12	26.79	143.02	169.81	-4.10
39	12	149.19	12.40	161.59	26.09	139.87	165.96	-2.70
40	12	151.16	12.39	163.55	32.04	125.62	157.66	3.60
41	12	153.71	12.43	166.13	34.32	126.66	160.98	3.10
42	12	150.73	12.40	163.13	32.76	123.04	155.79	4.50
43	12	149.19	12.41	161.60	30.54	134.46	165.00	-2.10
44	12	151.16	12.40	163.57	28.15	130.18	158.33	3.20
45	12	154.62	12.40	167.01	27.44	132.73	160.17	4.10
46	15	150.73	12.42	163.15	26.52	131.24	157.77	3.30
47	15	149.19	12.48	161.67	26.34	131.93	158.27	2.10
48	15	151.16	12.35	163.52	26.16	130.49	156.65	4.20
49	15	154.62	12.40	167.02	28.66	134.52	163.18	2.30
50	15	151.43	12.43	163.85	29.19	138.59	167.79	-2.40
51	15	149.19	12.41	161.60	29.56	137.05	166.61	-3.10
52	15	151.16	12.43	163.59	28.93	141.54	170.46	-4.20
53	15	154.62	12.38	167.00	28.38	133.44	161.82	3.10
54	15	151.43	12.44	163.87	28.52	127.82	156.33	4.60
55	15	149.94	9.93	159.87	22.63	131.49	154.11	3.60
56	15	151.16	9.93	161.10	22.46	143.15	165.61	-2.80
57	15	154.62	9.92	164.54	21.49	146.17	167.66	-1.90
58	15	151.43	7.42	158.84	17.87	135.57	153.44	3.40
59	15	149.94	7.45	157.39	20.09	143.91	164.00	-4.20
60	15	151.65	7.45	159.10	21.87	142.32	164.19	-3.20
61	15	154.62	4.96	159.58	16.15	140.08	156.23	2.10
62	15	151.43	4.98	156.40	17.51	133.58	151.09	3.40
63	15	149.94	4.96	154.91	17.80	130.75	148.55	4.10



Materia no convertida y productos líquidos obtenidos a la salida del reactor:

Balance	Flujo de Aceite de Soya	Flujo de Hidrógeno	H <sub>2</sub> O (Salida)	Triglicéridos No Convertidos (Salida)	Oxigenados (Salida)	Diesel Verde (Salida)
	(mL/h)	(L/h std)	(g)	(g)	(g)	(g)
1	10	10	8.97	48.35	3.76	70.42
2	10	10	8.97	49.92	2.53	73.99
3	10	10	8.81	49.55	1.75	74.11
4	10	10	8.38	35.10	3.52	95.41
5	10	10	8.43	35.67	1.31	98.91
6	10	10	8.43	35.98	0.74	101.18
7	10	10	8.27	27.84	1.77	86.44
8	10	10	8.54	30.59	0.91	96.60
9	10	10	8.43	30.68	0.79	96.26
10	7.5	7.5	8.78	56.40	0.40	72.92
11	7.5	7.5	8.91	55.58	0.58	71.93
12	7.5	7.5	8.73	60.61	0.67	77.89
13	7.5	7.5	8.64	37.62	0.28	86.79
14	7.5	7.5	8.79	39.65	0.14	91.41
15	7.5	7.5	9.18	40.59	0.13	93.73
16	7.5	7.5	8.68	32.85	1.52	83.08
17	7.5	7.5	8.87	33.45	1.38	84.15
18	7.5	7.5	8.73	35.65	1.99	90.63
19	17.5	17.5	8.66	38.78	19.33	82.95
20	17.5	17.5	8.55	38.90	19.38	83.14
21	17.5	17.5	8.61	35.98	17.97	77.11
22	17.5	17.5	8.23	17.11	3.65	99.79
23	17.5	17.5	8.32	16.89	4.61	97.79
24	17.5	17.5	8.16	16.99	2.63	99.95
25	17.5	17.5	8.37	15.24	0.88	112.06
26	17.5	17.5	8.35	15.15	1.34	109.84
27	17.5	17.5	8.33	15.19	1.08	108.13
28	15	15	8.64	47.86	13.34	77.77
29	15	15	8.73	42.95	12.44	69.29
30	15	15	8.57	46.51	12.42	75.85
31	15	15	8.52	26.83	8.18	91.66
32	15	15	8.41	25.78	7.13	88.63
33	15	15	8.47	25.65	8.54	86.91



34	15	15	8.38	22.17	3.28	91.40
35	15	15	8.29	21.39	3.28	88.62
36	15	15	8.45	24.03	3.41	98.22
37	12.5	12.5	9.09	51.70	11.31	74.92
38	12.5	12.5	8.85	50.38	11.00	72.79
39	12.5	12.5	8.78	49.09	10.76	71.24
40	12.5	12.5	9.00	28.21	13.54	74.86
41	12.5	12.5	9.13	28.43	11.97	77.14
42	12.5	12.5	8.97	27.62	9.08	77.37
43	12.5	12.5	8.93	27.60	2.79	95.14
44	12.5	12.5	9.09	26.49	2.95	91.65
45	12.5	12.5	9.33	26.89	3.05	93.46
46	10	10	8.93	32.77	3.32	86.23
47	10	10	8.79	32.71	3.69	86.75
48	10	10	8.85	32.44	3.97	85.23
49	10	10	8.47	35.10	5.31	85.63
50	10	10	8.39	36.24	5.58	88.39
51	10	10	8.21	35.64	5.35	87.86
52	10	10	7.20	38.67	12.19	83.47
53	10	10	7.46	36.25	10.19	79.52
54	10	10	7.23	34.78	12.12	73.69
55	10	8	8.35	33.06	8.34	81.74
56	10	8	8.11	36.15	10.51	88.38
57	10	8	8.90	36.50	7.94	92.83
58	10	6	8.35	36.75	7.74	82.73
59	10	6	8.22	39.23	8.94	87.52
60	10	6	8.41	38.66	7.46	87.79
61	10	4	7.44	40.96	7.87	83.81
62	10	4	7.36	38.95	7.47	79.79
63	10	4	7.11	38.17	0.01	85.46



Compuestos presentes en la fase gas a la salida del reactor.

Balance	H <sub>2</sub>	C5=/C6+	Propano	Propileno	Ac. Sulfhídrico	i- Butano	n- Butano
	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)
1	12.71	0.04	4.41	0.27	0.23	0.02	0.03
2	12.71	0.04	4.41	0.27	0.23	0.02	0.04
3	12.70	0.05	4.41	0.27	0.22	0.02	0.03
4	13.37	0.11	5.12	0.30	0.25	0.01	0.06
5	13.38	0.11	5.12	0.30	0.25	0.01	0.06
6	13.38	0.11	5.12	0.30	0.25	0.01	0.06
7	13.40	0.19	5.76	0.32	0.27	0.03	0.09
8	13.40	0.19	5.77	0.32	0.27	0.02	0.09
9	13.40	0.19	5.77	0.31	0.27	0.02	0.09
10	12.83	0.05	4.37	0.28	0.22	0.02	0.03
11	12.83	0.05	4.37	0.28	0.21	0.01	0.03
12	12.83	0.05	4.37	0.28	0.21	0.02	0.03
13	13.55	0.11	5.07	0.31	0.24	0.02	0.06
14	13.55	0.11	5.08	0.31	0.24	0.02	0.06
15	13.55	0.11	5.08	0.32	0.24	0.02	0.06
16	13.62	0.20	5.72	0.34	0.25	0.02	0.09
17	13.63	0.20	5.73	0.34	0.26	0.02	0.09
18	13.64	0.20	5.73	0.34	0.25	0.02	0.09
19	10.87	0.05	3.78	0.18	0.21	0.09	0.05
20	10.49	0.02	3.48	0.17	0.21	0.03	0.04
21	11.03	0.02	3.67	0.20	0.22	0.21	0.06
22	15.72	0.05	7.80	0.26	0.39	0.05	0.08
23	13.48	0.04	6.63	0.23	0.33	0.04	0.07
24	13.56	0.04	6.61	0.23	0.33	0.03	0.06
25	13.88	0.16	6.34	0.23	0.33	0.03	0.10
26	14.29	0.17	6.52	0.24	0.34	0.03	0.11
27	14.18	0.19	6.27	0.29	0.34	0.02	0.11
28	12.01	0.06	3.85	0.22	0.22	0.02	0.04
29	13.85	0.04	4.32	0.26	0.26	0.02	0.04
30	13.99	0.02	4.35	0.26	0.27	0.02	0.04
31	13.37	0.04	6.34	0.29	0.33	0.23	0.08
32	12.95	0.05	6.18	0.27	0.31	0.11	0.06



33	13.02	0.08	7.08	0.32	0.35	0.12	0.07
34	13.69	0.22	5.57	0.31	0.31	0.03	0.11
35	13.63	0.42	5.88	0.31	0.32	0.09	0.13
36	13.74	0.23	5.58	0.31	0.31	0.03	0.11
37	13.71	0.12	4.25	0.27	0.23	0.03	0.04
38	14.34	0.08	4.88	0.32	0.26	0.02	0.04
39	14.44	0.06	4.66	0.30	0.26	0.03	0.04
40	14.58	0.06	5.78	0.28	0.26	0.03	0.05
41	14.63	0.13	6.85	0.33	0.31	0.01	0.06
42	14.02	0.12	6.48	0.31	0.29	0.01	0.06
43	13.30	0.15	4.62	0.32	0.26	0.01	0.11
44	12.31	0.17	4.31	0.29	0.23	0.01	0.11
45	12.29	0.13	3.94	0.27	0.21	0.01	0.10
46	10.81	0.11	4.87	0.27	0.22	0.01	0.05
47	10.95	0.08	4.84	0.27	0.22	0.01	0.04
48	10.76	0.07	4.85	0.27	0.22	0.01	0.04
49	11.39	0.08	5.13	0.40	0.22	0.01	0.04
50	11.86	0.06	5.18	0.40	0.23	0.01	0.04
51	12.03	0.06	5.28	0.40	0.24	0.01	0.04
52	12.56	0.11	4.64	0.69	0.21	0.01	0.05
53	12.46	0.13	4.57	0.67	0.21	0.01	0.05
54	12.59	0.12	4.62	0.70	0.21	0.01	0.04
55	8.62	0.04	4.14	0.29	0.18	0.01	0.03
56	8.50	0.04	4.25	0.28	0.18	0.01	0.03
57	8.04	0.03	4.13	0.27	0.18	0.01	0.03
58	4.74	0.02	3.38	0.21	0.14	0.01	0.03
59	5.42	0.02	3.92	0.22	0.17	0.01	0.03
60	5.96	0.02	4.17	0.23	0.19	0.01	0.03
61	2.66	0.01	2.57	0.15	0.10	0.00	0.02
62	2.81	0.02	2.92	0.18	0.12	0.00	0.02
63	2.91	0.02	2.95	0.19	0.12	0.01	0.02



Continuación compuestos presentes en la fase gas a la salida del reactor.

Balance	n- Pentano	CO <sub>2</sub>	Etileno	Etano	Metano	CO
	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)
1	0.02	3.84	0.00	0.08	0.27	1.75
2	0.02	3.84	0.00	0.08	0.27	1.75
3	0.02	3.84	0.00	0.08	0.27	1.75
4	0.04	6.33	0.01	0.27	0.42	2.18
5	0.05	6.33	0.01	0.27	0.42	2.17
6	0.04	6.33	0.00	0.27	0.42	2.18
7	0.08	9.40	0.00	0.52	0.60	2.62
8	0.08	9.40	0.00	0.52	0.60	2.62
9	0.08	9.40	0.00	0.52	0.60	2.62
10	0.03	3.72	0.00	0.10	0.29	1.60
11	0.03	3.72	0.00	0.09	0.29	1.62
12	0.03	3.72	0.00	0.10	0.29	1.59
13	0.05	6.19	0.00	0.28	0.45	1.99
14	0.05	6.19	0.00	0.28	0.44	1.99
15	0.06	6.19	0.00	0.29	0.45	1.98
16	0.09	9.23	0.00	0.54	0.63	2.40
17	0.09	9.23	0.00	0.53	0.63	2.40
18	0.08	9.24	0.00	0.53	0.63	2.40
19	0.00	3.36	0.00	0.04	0.19	1.97
20	0.00	3.04	0.00	0.04	0.18	1.80
21	0.00	3.29	0.00	0.04	0.19	1.92
22	0.00	10.79	0.00	0.27	0.43	4.06
23	0.00	9.09	0.00	0.23	0.36	3.42
24	0.00	9.03	0.00	0.23	0.36	3.36
25	0.00	9.63	0.00	0.45	0.53	3.31
26	0.00	9.91	0.00	0.46	0.55	3.41
27	0.00	10.82	0.00	0.51	0.52	3.53
28	0.00	3.26	0.00	0.05	0.21	1.87
29	0.00	3.69	0.00	0.06	0.25	2.09
30	0.00	3.68	0.00	0.06	0.25	2.07
31	0.02	8.75	0.00	0.24	0.35	3.07



32	0.01	8.43	0.00	0.23	0.34	2.98
33	0.02	8.77	0.00	0.25	0.35	2.95
34	0.08	9.58	0.00	0.51	0.53	3.06
35	0.10	9.70	0.00	0.53	0.53	3.06
36	0.07	9.64	0.00	0.52	0.53	3.09
37	0.02	3.68	0.00	0.06	0.24	1.94
38	0.00	4.35	0.00	0.08	0.27	2.15
39	0.00	3.96	0.00	0.08	0.27	2.00
40	0.01	7.69	0.00	0.27	0.42	2.62
41	0.02	8.50	0.00	0.30	0.43	2.75
42	0.02	8.15	0.00	0.28	0.40	2.61
43	0.06	8.04	0.00	0.47	0.58	2.61
44	0.07	7.25	0.01	0.43	0.54	2.42
45	0.07	7.12	0.00	0.41	0.53	2.36
46	0.03	7.28	0.00	0.24	0.32	2.31
47	0.02	7.10	0.00	0.24	0.32	2.26
48	0.02	7.11	0.00	0.24	0.32	2.25
49	0.02	8.15	0.00	0.26	0.29	2.66
50	0.02	7.99	0.00	0.27	0.31	2.81
51	0.02	8.06	0.00	0.27	0.31	2.84
52	0.03	7.12	0.01	0.27	0.26	2.97
53	0.02	6.77	0.00	0.27	0.27	2.96
54	0.03	6.67	0.01	0.27	0.27	2.98
55	0.01	6.82	0.00	0.24	0.39	1.84
56	0.01	6.75	0.00	0.23	0.38	1.80
57	0.01	6.48	0.00	0.22	0.36	1.72
58	0.01	7.32	0.00	0.22	0.32	1.48
59	0.01	8.06	0.00	0.24	0.36	1.64
60	0.01	8.80	0.00	0.27	0.41	1.80
61	0.01	8.73	0.00	0.22	0.35	1.33
62	0.01	9.42	0.00	0.25	0.38	1.39
63	0.01	9.53	0.00	0.25	0.38	1.41

Por otra parte, los compuestos presentes en fase líquida sin considerar el agua y triglicéridos no convertidos se muestran en el Apéndice C; cabe mencionar que esos resultados también se obtuvieron de la cromatografía, aunque los porcentajes de participación de las rutas de reacción se calcularon, mientras que los resultados de los



compuestos tipo no parafínico se presentaran a continuación:

Balance	Ácidos						
	Olefinas	Isoparafinas	Naftenos	carboxílicos o Ésteres	Alcoholes	Aldehídos	Otros
	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)	(g)
1	1.24	1.37	2.98	3.42	0.15	0.00	0.19
2	1.75	1.32	1.70	1.82	0.17	0.22	0.31
3	1.96	1.98	1.63	1.20	0.20	0.00	0.35
4	1.14	3.58	3.21	1.89	0.08	0.00	1.56
5	0.87	3.65	5.25	0.99	0.04	0.00	0.28
6	3.74	1.76	3.86	0.26	0.03	0.00	0.45
7	2.15	3.40	3.65	0.00	0.00	0.00	1.77
8	2.30	2.86	4.58	0.00	0.00	0.00	0.91
9	2.90	2.74	4.22	0.00	0.00	0.00	0.79
10	0.92	1.42	2.60	0.28	0.07	0.00	0.06
11	0.90	1.26	1.88	0.50	0.07	0.00	0.00
12	0.76	1.19	2.19	0.52	0.10	0.00	0.05
13	0.88	1.81	3.06	0.07	0.03	0.00	0.18
14	1.18	1.92	3.13	0.00	0.00	0.00	0.14
15	0.33	1.73	4.19	0.00	0.00	0.00	0.13
16	1.70	1.61	5.09	0.00	0.00	0.00	1.52
17	2.99	2.51	4.62	0.18	0.00	0.00	1.20
18	2.88	2.52	4.43	0.39	0.20	0.00	1.40
19	4.67	0.56	2.41	18.90	0.36	0.00	0.07
20	4.68	0.56	2.41	18.94	0.36	0.00	0.07
21	4.34	0.52	2.24	17.57	0.34	0.00	0.07
22	1.33	2.02	3.65	3.23	0.15	0.00	0.28
23	1.02	2.01	4.26	4.24	0.15	0.00	0.23
24	1.62	2.01	2.96	2.15	0.15	0.00	0.33
25	2.22	2.69	3.62	0.28	0.00	0.00	0.60
26	1.66	2.51	4.91	0.34	0.07	0.00	0.93
27	1.89	2.53	4.16	0.30	0.04	0.00	0.75
28	3.78	0.86	2.71	12.72	0.09	0.09	0.45
29	3.53	0.68	2.35	11.93	0.08	0.10	0.32
30	3.51	0.94	2.72	11.76	0.09	0.06	0.52
31	2.46	1.41	2.36	6.75	0.26	0.08	1.09
32	2.06	1.37	2.77	5.55	0.36	0.09	1.13
33	2.65	1.32	1.76	7.37	0.14	0.07	0.96



34	2.44	1.89	4.19	1.43	0.26	0.00	1.58
35	1.90	2.00	4.28	1.33	0.26	0.00	1.70
36	3.14	1.85	4.26	1.61	0.28	0.00	1.51
37	3.82	1.26	2.45	10.52	0.12	0.13	0.55
38	3.71	1.22	2.38	10.22	0.12	0.13	0.53
39	3.63	1.20	2.33	10.00	0.11	0.12	0.52
40	2.43	0.45	2.58	12.58	0.12	0.12	0.73
41	2.17	0.81	2.55	11.07	0.12	0.12	0.66
42	2.28	1.09	3.69	8.34	0.13	0.08	0.54
43	2.79	1.43	5.36	1.36	0.12	0.00	1.31
44	1.09	1.90	6.20	1.00	0.12	0.00	1.83
45	3.21	2.43	5.11	1.44	0.11	0.00	1.51
46	1.56	1.79	4.48	2.21	0.09	0.00	1.02
47	1.99	1.38	3.54	2.62	0.08	0.00	0.99
48	2.39	0.95	2.52	2.96	0.07	0.00	0.93
49	4.41	1.09	2.90	4.21	0.06	0.08	0.95
50	4.30	1.13	3.14	4.17	0.06	0.08	1.27
51	4.77	1.12	2.83	4.50	0.07	0.09	0.69
52	11.83	0.52	2.91	10.67	0.06	0.35	1.11
53	10.41	0.57	3.20	9.05	0.05	0.11	0.98
54	11.27	0.40	2.15	10.49	0.06	0.52	1.05
55	4.82	0.67	3.05	6.31	0.13	0.74	1.15
56	5.49	0.89	3.72	7.57	0.14	0.82	1.98
57	5.19	0.58	3.02	6.41	0.16	0.82	0.55
58	3.20	1.15	2.28	5.64	0.13	0.10	1.87
59	3.31	1.04	2.43	6.07	0.13	0.11	2.63
60	3.47	1.39	2.39	5.88	0.14	0.10	1.34
61	4.16	1.48	2.48	6.49	0.14	0.06	1.18
62	4.17	1.54	1.92	6.15	0.11	0.00	1.22
63	3.68	1.25	2.74	6.08	0.16	0.11	1.01



## Apéndice C.

Datos utilizados para calcular la contribución de cada ruta de reacción

Balance	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
CO <sub>2</sub> (g)	3.84	3.84	3.84	6.33	6.33	6.33	9.40	9.40	9.40	3.72
CO(g)	1.75	1.75	1.75	2.18	2.17	2.18	2.62	2.62	2.62	1.60
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.28	0.00
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.04	0.00	0.00	0.05	0.00	0.07	0.14	0.33	0.51	0.09
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.22	0.44	0.58	0.00
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18	0.32	0.36	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	1.78	0.35	0.09	0.00	0.28	0.09	0.22	2.83	0.37	0.50
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.05	0.05	0.05	0.10	0.11	0.12	0.21	0.32	0.35	0.10
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.07	0.07	0.07	0.11	0.13	0.12	0.21	0.29	0.32	0.11
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	4.81	5.29	5.27	7.18	7.40	7.60	6.75	7.71	7.97	5.53
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	4.20	4.57	4.57	5.83	5.91	6.07	5.49	6.31	6.55	4.58
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	28.31	30.79	30.93	39.64	40.42	41.73	33.59	35.23	35.47	29.92
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	24.36	26.52	25.97	32.11	32.18	33.27	26.96	28.45	28.70	24.63
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.42	0.61	0.62	0.87	0.87	0.91	0.82	0.83	0.84	0.52
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.29	0.30	0.30	0.43	0.43	0.45	0.45	0.59	0.59	0.39
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.22	0.24	0.24	0.34	0.36	0.37	0.41	0.52	0.55	0.31
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.16	0.18	0.17	0.24	0.24	0.25	0.24	0.32	0.36	0.21
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.01	0.10	0.10	0.20	0.23	0.24	0.36	0.56	0.64	0.28
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.07	0.08	0.08	0.11	0.13	0.13	0.18	0.29	0.33	0.15
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.03	0.03	0.03	0.08	0.11	0.12	0.21	0.37	0.41	0.16
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.03	0.03	0.04	0.14	0.18	0.20	0.37	0.64	0.76	0.30
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.03	0.05	0.09	0.10	0.04
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.07	0.10	0.18	0.22	0.09
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.11	0.14	0.06
DC (%)	16.35	16.77	17.04	14.17	14.19	14.27	12.06	11.62	11.93	16.35
DCX (%)	35.92	36.84	37.30	41.23	41.36	41.47	43.36	41.77	42.87	38.08
DO (%)	47.73	46.39	45.66	44.60	44.44	44.26	44.58	46.61	45.20	45.57



Balance	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
CO <sub>2</sub> (g)	3.72	3.72	6.19	6.19	6.19	9.23	9.23	9.24	3.36	3.04
CO(g)	1.62	1.59	1.99	1.99	1.98	2.40	2.40	2.40	1.97	1.80
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.43	0.38	0.00	0.00
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.09	0.11	0.56	0.72	0.76	0.00	0.00
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.13	0.16	0.63	0.81	0.90	0.00	0.00
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.39	0.50	0.57	0.00	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	1.83	0.34	0.00	0.77	5.09	0.44	2.38	1.38	0.00	0.00
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.00	0.00	0.11	0.14	0.13	0.35	0.42	0.48	0.00	0.00
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.07	0.07	0.12	0.13	0.12	0.33	0.40	0.45	0.00	0.00
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	5.12	5.63	6.46	6.74	6.43	6.82	7.14	7.99	6.14	6.15
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	4.30	4.78	5.66	6.02	5.84	6.18	6.28	7.08	4.67	4.68
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	30.09	33.28	35.52	35.97	35.06	28.35	26.25	28.90	36.14	36.25
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	24.80	27.85	30.69	32.23	31.42	25.94	23.23	25.50	26.30	26.35
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.58	0.69	0.74	0.80	0.77	0.83	0.85	0.95	0.60	0.60
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.35	0.35	0.42	0.47	0.55	0.62	0.66	0.73	0.32	0.32
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.22	0.24	0.32	0.35	0.34	0.52	0.61	0.71	0.30	0.29
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.18	0.20	0.24	0.26	0.24	0.30	0.34	0.43	0.18	0.18
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.13	0.13	0.23	0.28	0.29	0.52	0.66	0.80	0.21	0.21
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.08	0.08	0.12	0.15	0.16	0.32	0.45	0.52	0.13	0.13
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.06	0.04	0.11	0.15	0.15	0.29	0.46	0.52	0.10	0.10
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.07	0.06	0.20	0.30	0.32	0.59	0.87	1.05	0.17	0.17
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.00	0.00	0.03	0.04	0.02	0.08	0.17	0.20	0.00	0.00
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.01	0.00	0.07	0.07	0.09	0.16	0.25	0.30	0.06	0.06
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	0.12	0.15	0.23	0.00	0.00
DC (%)	16.19	16.25	13.06	12.77	12.06	10.74	10.59	10.74	21.36	21.47
DCX (%)	37.13	38.01	40.65	39.65	37.66	41.27	40.64	41.35	36.38	36.29
DO (%)	46.68	45.74	46.29	47.58	50.29	47.99	48.77	47.92	42.26	42.24



Balance	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
CO <sub>2</sub> (g)	3.29	10.79	9.09	9.03	9.63	9.91	10.82	3.26	3.69	3.68
CO(g)	1.92	4.06	3.42	3.36	3.31	3.41	3.53	1.87	2.09	2.07
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18	0.16	0.17	0.00	0.00	0.00
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.27	0.25	0.25	0.00	0.00	0.00
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.39	0.36	0.00	0.00	0.00
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.25	0.25	0.24	0.00	0.00	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	0.23	0.23	0.00	0.00	0.00
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.00	0.11	0.11	0.11	0.25	0.25	0.24	0.00	0.00	0.00
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.00	0.13	0.13	0.13	0.24	0.23	0.23	0.11	0.09	0.10
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	5.70	7.77	7.62	7.78	9.02	8.90	8.73	5.75	5.11	5.62
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	4.34	6.01	5.84	6.06	7.04	6.87	6.78	4.40	3.94	4.28
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	33.62	43.60	42.40	43.99	45.99	44.90	44.29	33.13	29.58	32.25
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	24.44	32.62	31.90	32.75	35.46	34.14	33.91	25.03	22.28	24.44
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.56	0.82	0.80	0.84	0.94	0.90	0.90	0.60	0.52	0.59
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.30	0.41	0.42	0.39	0.58	0.57	0.56	0.31	0.28	0.31
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.27	0.39	0.39	0.39	0.54	0.54	0.52	0.29	0.25	0.28
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.17	0.24	0.24	0.24	0.31	0.32	0.31	0.18	0.16	0.18
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.20	0.23	0.23	0.24	0.46	0.48	0.46	0.21	0.18	0.21
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.12	0.13	0.13	0.13	0.24	0.20	0.22	0.12	0.10	0.12
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.09	0.09	0.09	0.09	0.30	0.29	0.29	0.10	0.08	0.10
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.16	0.17	0.16	0.17	0.48	0.54	0.50	0.17	0.14	0.17
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.06	0.00	0.00	0.00
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.05	0.05	0.04	0.05	0.15	0.16	0.15	0.03	0.02	0.03
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.19	0.12	0.15	0.00	0.00	0.00
DC (%)	21.27	15.62	15.59	15.53	14.39	14.45	13.86	20.73	20.61	20.51
DCX (%)	36.48	41.53	41.46	41.70	41.89	42.06	42.54	36.18	36.34	36.36
DO (%)	42.24	42.86	42.95	42.77	43.72	43.49	43.61	43.09	43.05	43.14



Balance	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
CO <sub>2</sub> (g)	8.75	8.43	8.77	9.58	9.70	9.64	3.68	4.35	3.96	7.69
CO(g)	3.07	2.98	2.95	3.06	3.06	3.09	1.94	2.15	2.00	2.62
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.28	0.26	0.32	0.00	0.00	0.00	0.08
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.03	0.06	0.00	0.36	0.34	0.41	0.11	0.10	0.10	0.09
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.10	0.10	0.09	0.45	0.43	0.50	0.14	0.14	0.13	0.14
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.31	0.29	0.34	0.00	0.00	0.00	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.28	0.27	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.28	0.27	0.31	0.12	0.12	0.11	0.12
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.12	0.12	0.11	0.27	0.26	0.30	0.12	0.12	0.11	0.12
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	6.99	6.76	6.64	7.50	7.24	8.10	5.45	5.28	5.17	5.21
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	5.81	5.59	5.54	6.18	5.97	6.66	4.72	4.59	4.49	5.41
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	38.81	37.40	36.93	34.53	33.63	36.95	29.35	28.52	27.91	28.13
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	31.13	30.05	29.57	28.19	27.44	30.18	25.01	24.30	23.78	27.87
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.72	0.70	0.67	0.86	0.82	0.93	0.57	0.55	0.54	0.55
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.43	0.41	0.41	0.55	0.54	0.58	0.36	0.35	0.34	0.40
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.38	0.37	0.36	0.52	0.50	0.57	0.32	0.31	0.31	0.32
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.23	0.22	0.22	0.29	0.28	0.31	0.20	0.20	0.19	0.21
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.23	0.21	0.22	0.50	0.48	0.54	0.26	0.25	0.25	0.22
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.13	0.12	0.12	0.28	0.28	0.30	0.15	0.15	0.15	0.14
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.10	0.10	0.10	0.29	0.26	0.34	0.14	0.14	0.14	0.11
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.18	0.16	0.17	0.55	0.52	0.61	0.29	0.28	0.27	0.22
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.09	0.09	0.09	0.03	0.03	0.03	0.00
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.04	0.05	0.02	0.16	0.16	0.18	0.06	0.06	0.06	0.06
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.14	0.13	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00
DC (%)	14.36	14.47	13.94	13.25	13.13	13.29	18.64	17.83	18.12	12.71
DCX (%)	40.97	40.85	41.39	41.51	41.62	41.47	35.30	36.10	35.81	37.36
DO (%)	44.67	44.68	44.67	45.24	45.25	45.24	46.06	46.07	46.07	49.93



Balance	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
CO <sub>2</sub> (g)	8.50	8.15	8.04	7.25	7.12	7.28	7.10	7.11	8.15	7.99
CO(g)	2.75	2.61	2.61	2.42	2.36	2.31	2.26	2.25	2.66	2.81
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.08	0.11	0.39	0.42	0.45	0.22	0.18	0.14	0.11	0.10
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.12	0.12	0.43	0.48	0.56	0.33	0.26	0.18	0.14	0.15
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.17	0.18	0.57	0.61	0.66	0.42	0.33	0.23	0.18	0.19
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.10	0.00	0.36	0.41	0.46	0.27	0.14	0.00	0.00	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	0.00	0.00	0.31	0.36	0.38	0.26	0.13	0.00	0.00	0.00
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.15	0.15	0.31	0.35	0.37	0.27	0.22	0.17	0.14	0.15
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.14	0.14	0.30	0.32	0.34	0.23	0.20	0.17	0.15	0.15
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	5.44	5.70	7.22	7.15	7.23	6.69	6.69	6.53	6.82	7.04
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	6.04	6.25	7.48	7.34	7.54	6.68	6.55	6.26	5.53	5.76
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	28.57	27.52	31.77	29.86	29.55	30.15	31.42	31.95	34.22	35.23
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	28.08	27.24	32.20	30.66	30.54	29.32	30.26	30.48	27.04	28.03
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.59	0.63	0.85	0.86	0.88	0.78	0.73	0.66	0.65	0.67
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.46	0.49	0.62	0.62	0.65	0.61	0.57	0.52	0.45	0.47
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.36	0.37	0.53	0.56	0.49	0.09	0.26	0.42	0.39	0.38
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.26	0.27	0.36	0.36	0.37	0.32	0.32	0.31	0.24	0.25
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.27	0.28	0.46	0.50	0.52	0.41	0.37	0.33	0.32	0.33
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.16	0.18	0.30	0.34	0.38	0.29	0.25	0.21	0.18	0.19
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.15	0.16	0.26	0.29	0.30	0.22	0.19	0.16	0.16	0.18
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.28	0.32	0.51	0.56	0.65	0.50	0.44	0.37	0.34	0.37
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.03	0.04	0.07	0.11	0.14	0.10	0.08	0.06	0.06	0.06
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.05	0.07	0.13	0.16	0.15	0.13	0.12	0.11	0.09	0.10
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.09	0.11	0.13	0.15	0.14	0.14	0.13	0.11	0.00	0.00
DC (%)	12.24	12.09	12.14	12.35	12.23	12.12	12.25	12.28	13.68	14.41
DCX (%)	37.87	37.80	37.41	37.02	36.87	38.18	38.47	38.84	41.87	40.97
DO (%)	49.89	50.11	50.46	50.63	50.90	49.70	49.28	48.88	44.45	44.62



Balance	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
CO <sub>2</sub> (g)	8.06	7.12	6.77	6.67	6.82	6.75	6.48	7.32	8.06	8.80
CO(g)	2.84	2.97	2.96	2.98	1.84	1.80	1.72	1.48	1.64	1.80
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.13	0.04	0.00	0.07	0.14	0.15	0.16	0.11	0.12	0.12
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.14	0.14	0.14	0.12	0.16	0.18	0.17	0.12	0.13	0.13
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.18	0.06	0.00	0.11	0.19	0.21	0.23	0.16	0.17	0.17
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.14	0.12	0.11	0.11	0.16	0.18	0.18	0.14	0.16	0.14
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.16	0.13	0.13	0.11	0.16	0.18	0.17	0.15	0.16	0.16
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	6.99	6.36	6.08	5.60	5.94	6.42	6.75	6.39	6.77	6.77
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	5.62	4.29	4.13	3.74	6.10	6.49	7.03	5.91	6.36	6.18
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	35.21	32.91	31.35	29.05	28.89	31.12	32.92	31.71	33.46	33.73
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	27.63	21.27	20.65	18.41	28.58	30.18	33.18	28.81	30.55	30.49
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.67	0.61	0.59	0.53	0.65	0.70	0.74	0.64	0.70	0.65
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.46	0.37	0.37	0.31	0.48	0.52	0.55	0.47	0.51	0.49
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.42	0.41	0.39	0.36	0.41	0.45	0.47	0.37	0.43	0.35
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.25	0.21	0.20	0.18	0.27	0.29	0.31	0.26	0.28	0.27
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.33	0.36	0.34	0.31	0.30	0.33	0.33	0.24	0.27	0.25
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.18	0.19	0.18	0.17	0.20	0.22	0.23	0.17	0.19	0.18
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.16	0.20	0.19	0.18	0.15	0.18	0.16	0.11	0.12	0.12
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.34	0.40	0.37	0.36	0.32	0.36	0.35	0.22	0.25	0.22
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.05	0.05	0.05	0.05	0.04	0.05	0.04	0.04	0.04	0.04
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.09	0.09	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.06	0.07	0.07
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DC (%)	14.53	17.78	18.30	18.76	10.63	10.64	10.43	8.80	8.82	8.89
DCX (%)	41.19	42.59	41.77	41.91	39.49	39.96	39.24	43.46	43.31	43.49
DO (%)	44.27	39.64	39.93	39.33	49.87	49.40	50.33	47.75	47.87	47.62



Balance	61	62	63
CO <sub>2</sub> (g)	8.73	9.42	9.53
CO(g)	1.33	1.39	1.41
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (g)	0.13	0.12	0.12
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (g)	0.15	0.13	0.14
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (g)	0.15	0.15	0.14
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (g)	0.00	0.00	0.00
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (g)	0.00	0.00	0.00
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (g)	0.15	0.15	0.14
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (g)	0.16	0.15	0.16
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (g)	7.24	6.78	6.85
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (g)	5.41	5.18	5.02
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (g)	34.37	32.53	32.22
C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (g)	25.31	24.48	23.21
C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (g)	0.68	0.66	0.63
C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (g)	0.45	0.44	0.41
C <sub>21</sub> H <sub>44</sub> (g)	0.36	0.34	0.33
C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> (g)	0.24	0.23	0.23
C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> (g)	0.26	0.24	0.24
C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> (g)	0.18	0.17	0.17
C <sub>25</sub> H <sub>52</sub> (g)	0.13	0.12	0.12
C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> (g)	0.22	0.21	0.21
C <sub>27</sub> H <sub>56</sub> (g)	0.04	0.04	0.04
C <sub>28</sub> H <sub>58</sub> (g)	0.06	0.06	0.06
C <sub>29</sub> H <sub>60</sub> (g)	0.00	0.00	0.00
DC (%)	7.56	7.29	7.46
DCX (%)	49.75	49.50	50.35
DO (%)	42.70	43.21	42.19