

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

DESARROLLO DE UN MODELO INTEGRADO DE FORMULACIÓN Y PREDICCIÓN DE CALIDADES DE GASOLINAS CON ETANOL Y MTBE PARA UNA REFINERÍA

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por la Br. Fuentes F., Alejandra C.,
Para optar al Título
de Ingeniero Químico

Caracas, 2011

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

DESARROLLO DE UN MODELO INTEGRADO DE FORMULACIÓN Y PREDICCIÓN DE CALIDADES DE GASOLINAS CON ETANOL Y MTBE PARA UNA REFINERÍA

TUTOR ACADÉMICO: Prof. Lara, Alí G., M.Sc.

TUTOR INDUSTRIAL: Ing. Álvarez, Luis M.

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por la Br. Fuentes F., Alejandra C.,
Para optar al Título
de Ingeniero Químico

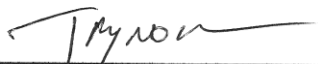
Caracas, 2011

Caracas, Mayo de 2011

Los abajo firmantes, miembros del Jurado designado por el Consejo de Escuela de Ingeniería Química, para evaluar el Trabajo Especial de Grado presentado por la Bachillera Alejandra Carolina Fuentes Fuentes, titulado:

**“DESARROLLO DE UN MODELO INTEGRADO DE
FORMULACIÓN Y PREDICCIÓN DE CALIDADES DE
GASOLINAS CON ETANOL Y MTBE PARA UNA REFINERÍA”**

Consideran que el mismo cumple con los requisitos exigidos por el plan de estudio conducente al título de Ingeniero Químico, y sin que esto signifique que se hacen solidarios con las ideas expuestas por el autor, lo declaran **APROBADO**



Prof. Trino Romero
Tutor Académico



Ing. Luis M., Alvarez
Tutor Industrial



Prof. Luis García
Jurado



Prof. Francisco Yáñez
Jurado

DEDICATORIA

Ante todo quiero dedicar este Trabajo a Dios Todopoderoso, que nunca me ha desamparado, ni en los buenos ni malos momentos.

A mis padres Gladys Fuentes y Raúl Fuentes por siempre creer en mí y darme su apoyo en todo momento. Por motivarme a seguir adelante y no dejarme caer en los malos momentos.. Ustedes han contribuido mucho a que yo pudiese llegar hasta donde he llegado. ¡Los amo!!!

A mi hermanito Raúl Alejandro, que más que un hermano es como hijo para mí y a quien adoro!. Espero ésta sea una pequeña motivación para que logres tus metas por igual cuando crezcas.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar a Dios Todopoderoso por permitirme llegar hasta donde he llegado.

A la Ilustre Universidad Central de Venezuela por ser mucho más que una casa de estudios, por ser un segundo hogar para mí. Por constituir una etapa importante e inolvidable en mi vida, tantos momentos, anécdotas, amigos. Indudable decir que es la principal universidad de Venezuela y bien merecido lo tiene.

A mis padres Gladys y Raúl por su apoyo incondicional, por su paciencia, por sus consejos, por siempre ayudarme a avanzar y no sentir miedo de las nuevas situaciones que se presentan. Gracias por estar siempre pendiente de mí, por cuidarme y quererme. Gracias por darme el impulso para llegar hasta aquí. Gracias con todo mi corazón!

A mi hermanito Raúl Alejandro por siempre demostrarme su amor y cariño. Te adoro!

A mi querido Carlos que siempre me ha apoyado y ha estado allí para mí, en la buenas y en las malas. Que me ha ayudado para lo que sea sin jamás tener un reproche. Gracias por no perder la fé en mí en ningún momento y por siempre darme palabras de aliento en los momentos más críticos. Te amo!

A todos los profesores que contribuyeron a mi formación como ingeniera a lo largo de estos años en la universidad. Su sabiduría quedará conmigo. Gracias por contribuir a hacer grande a la UCV.

Al profesor Humberto Kum, por ayudarme en el momento que más necesitaba y asesorarme a tomar las mejores decisiones para llevar a cabo mi tesis. Gracias!

A mi tutor académico Alí Lara por ayudarme y asesorarme con calma y dedicación a la elaboración de este Trabajo. Sin duda la mejor elección como tutor.

A mi tutor Luis Álvarez por dame la oportunidad de desarrollar un trabajo tan importante, y confiar en mis capacidades y habilidades para tener un desempeño satisfactorio en el mismo.

A todos mis amigos que siempre me han apoyado y se preocupado por mí, brindándome siempre su cariño y apoyo, en especial: Jheny Blanco, Dairis Zambrano, Wendy Castellanos, Mariangel Pesquera, Erika Rico, Enmanuel Mestanza y Giancarlo Del Pino. Los quiero mucho!

A mi compañera de oficina durante casi un año Helen Vallera, quien compartió conmigo muchos momentos críticos de la tesis, altas y bajas, pero siempre estuvo allí para ayudarme incondicionalmente. Sé que gané una amiga.

A PDVSA-Intevep por constituir un espacio de aprendizaje y enseñanzas fundamentales para dar inicio a mi vida profesional.

A todas las personas de la Gerencia de Calidad de Productos de PDVSA Intevep que me ayudaron y aconsejaron a lo largo del desarrollo de la tesis: María Valentina González, Yamarú Durán, Lourdes Arias, Luis Álvarez, Antonio Tenorio, Tonny Zapata, Lenny Salas, Arnoldo Bruss, Romily Figuera, Mariana Mayz, Marilia Dominguez y Luis Jiménez.

Fuentes F., Alejandra C.

DESARROLLO DE UN MODELO INTEGRADO DE FORMULACIÓN Y PREDICCIÓN DE CALIDADES DE GASOLINAS CON ETANOL Y MTBE PARA UNA REFINERÍA

Tutor académico: Prof. Lara, Alí G., M.Sc. **Tutor industrial:** Ing. Álvarez, Luis M.

Tesis. Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química.

2011, 164 pp.

Palabras claves: Gasolinas, Etanol, MTBE, Octanajes, Programación Lineal.

Resumen. En el presente Trabajo Especial de Grado desarrolló un modelo integrado de formulación y predicción de calidades de gasolinas con etanol y MTBE para una refinería, el cual corresponde a un plan de la empresa estatal PDVSA con miras a la incorporación del etanol en el “pool” de componentes de gasolina local, con el propósito de contribuir al incremento de su producción a nivel nacional. Se establecieron como variables independientes cada uno de los componentes integrantes del “pool” de gasolinas local, y como dependientes los parámetros de calidad de mayor relevancia presentados en normas venezolanas. Se seleccionó un diseño de experimento que permitió determinar las mezclas a evaluar. Se caracterizaron los componentes midiéndose las propiedades evaporativas, antidetonantes y el contenido de parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos y oxigenados. Los datos obtenidos se ingresaron en Statgraphics® consiguiéndose ecuaciones para cada una de las variables dependientes en función de los porcentajes en volumen de los componentes. Dichas ecuaciones fueron ingresadas a Excel® formando un sistema de ecuaciones que se solucionó mediante la aplicación del complemento Solver. Una vez resuelto el sistema, se planteó una serie de “recetas” que consideraron la presencia de ambos oxigenados y de cada uno de ellos individualmente. Las mismas se formularon y fueron analizadas en laboratorio determinando sus valores de octanaje, destilación y presión de vapor. Para las propiedades evaporativas, se comparó lo obtenido con respecto a lo predicho por el modelo de regresión lineal y propiedades aditivas. Se planteó el desarrollo de una herramienta computacional que permitió establecer la factibilidad de producción de gasolina de 91 octanos RON para una demanda dada. Como resultados, se tuvo que el diseño de experimento “especial cúbico” es el más adecuado para la formulación de gasolinas a partir de 9 componentes; el octanaje RON y MON presentaron un mejor ajuste al modelo de regresión lineal en presencia de etanol y MTBE para el primero, y para el segundo se obtuvo en presencia de etanol como único oxigenado de la mezcla. Las propiedades evaporativas presentaron un mejor ajuste al modelo lineal en las variables relacionadas a la etapa inicial de la destilación, y al de regresión lineal en aquellas implicadas en las etapas media y final de dicho proceso. La herramienta computacional es efectiva para determinar si los requerimientos de insumo pueden ser satisfechos una demanda planteada.

ÍNDICE DE CONTENIDO

CAPÍTULO I. FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN	3
I.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	3
I.2 ANTECEDENTES	5
I.3 OBJETIVOS	8
I.3.1 Objetivo general	8
I.3.2 Objetivos específicos	8
CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO	9
II.1 GASOLINA.....	9
II.2 PROPIEDADES DE LA GASOLINA.....	9
II.2.1 Octanaje o número de octano	9
II.2.2 Pistoneo	10
II.2.3 Volatilidad.....	10
II.2.4 Perfil de destilación.....	11
II.2.5 Presión de vapor	11
II.3 GASOLINA OXIGENADA.....	12
II.3.1 Etanol.....	12
II.3.2 Metil Terc-Butil Éter (MTBE)	13
II.4 DISEÑO DE EXPERIMENTO	13
II.4.1 Factor.....	14
II.4.2 Nivel	14
II.4.3 Diseño de experimento factorial completo a dos (2) niveles	14
II.4.4 Diseño de experimento factorial completo a tres (3) niveles	15
II.4.5 Diseño de experimento factorial fraccionado.....	15
II.4.6 Diseño experimental de mezclas	16
II. 5 PARÁMETROS ESTADÍSTICOS	17
II.5.1 Coeficiente de determinación	17
II.5.2 Error estándar de estimación	17
II.5.3 Valor-p	17
CAPÍTULO III. MARCO METODOLÓGICO	18
III.1 SELECCIÓN DEL DISEÑO DE EXPERIMENTO	18

III.2	DESARROLLO DE FASE EXPERIMENTAL.....	19
III.2.1	Caracterización de componentes	20
III.2.2	Preparación de las mezclas.....	22
III.2.3	Propiedades evaporativas	23
III.2.4	Propiedades antidetonantes	28
III.2.5	Propiedades de balance de masa.....	31
III.3	REGRESIÓN LINEAL Y ANÁLISIS DE VARIANZA.....	31
III.4	VALIDACIÓN.....	33
III.5	COMPARACIÓN DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS	34
III.6	DESARROLLO DE HERRAMIENTA COMPUTACIONAL	35
	CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	37
IV.1	SELECCIÓN DEL DISEÑO DE EXPERIMENTO	37
IV.2	PREPARACIÓN Y EVALUACIÓN DE LOS COMPONENTES Y LAS MEZCLAS	42
IV.2.1	Evaluación de Componentes	42
IV.2.2	Evaluación de las mezclas.....	48
IV.3	DESARROLLO DEL MODELO MATEMÁTICO CON BASE EN EL ANÁLISIS MULTIVARIABLE.....	50
IV.3.1	Validación	55
IV.4	COMPARACIÓN DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS.....	62
IV.5	DESARROLLO DE HERRAMIENTA COMPUTACIONAL.....	72
	CAPÍTULO V. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	76
V.1	CONCLUSIONES	76
V.2	RECOMENDACIONES	78
	CAPÍTULO VI. BIBLIOGRAFÍA	79
	CAPÍTULO VII. APÉNDICES	81
	APÉNDICE A. MATRIZ DE EXPERIMENTOS.....	81
	APÉNDICE B. MASAS CALCULADAS PARA LAS MEZCLAS DE LA MATRIZ EXPERIMENTAL	84
	APÉNDICE C. RESULTADOS OBTENIDOS PARA CADA MEZCLA DE LA MATRIZ DE EXPERIMENTOS.....	88
	APÉNDICE D. LISTA DE MEZCLAS ELIMINADAS DEL MODELO DE REGRESIÓN	100

APÉNDICE E. COMPARACIÓN DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS PARA LAS MEZCLAS DE LA MATRIZ EXPERIMENTAL	102
APÉNDICE F. RECETAS SELECCIONADAS MEDIANTE LA APLICACIÓN DE SOLVER	128
APÉNDICE G. RESULTADOS DE PROPIEDADES ANTIDETONANTES PARA LAS RECETAS SELECCIONADAS	134
APÉNDICE H. RESULTADOS DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS PARA LAS RECETAS SELECCIONADAS	136
APÉNDICE I. CONTENIDO DE PARAFINAS, OLEFINAS, NAFTENOS, AROMÁTICOS Y OXIGENADOS EN MEZCLAS DE VALIDACIÓN	139
APÉNDICE J. RESULTADOS MOSTRADOS POR LA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL	139
APÉNDICE K. EQUIPOS EMPLEADOS	145

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura N°1: Esquema de fabricación de etanol. (Guerra, 2008).....	13
Figura N°2. Diagrama de la programación empleada en la herramienta	36
Figura N°3. Octanaje RON experimental y por regresión lineal	56
Figura N°4. Octanaje MON experimental y por regresión lineal	58
Figura N°5. IAD experimental y por regresión lineal.....	59
Figura N°6. Sensibilidad experimental y por regresión lineal	61
Figura N°7. Comparación de presión de vapor	63
Figura N°8. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE)	64
Figura N° 9. Comparación de temperatura a un 10% de evaporado (T10)	65
Figura N°10. Comparación de temperatura a un 50% de evaporado (T50)	66
Figura N°11. Comparación de temperatura a un 90% de evaporado (T90)	68
Figura N°12. Comparación de punto final de ebullición (PFE)	69
Figura N°13. Comparación de evaporado a 70°C (E70)	70
Figura N°14. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV)	71
Figura N°15. Esquema de la refinería mostrado en la herramienta computacional	73
Figura N°16. Tanque de insumo de herramienta computacional	74
Figura N°17. Comparación de presión de vapor (RVP) para mezclas de dos (2) componentes.....	102
Figura N°18. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de dos (2) componentes	103
Figura N°19. Comparación de temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de dos (2) componentes.....	104
Figura N°20. Comparación de temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de dos (2) componentes.....	105
Figura N°21. Comparación de temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de dos (2) componentes.....	106
Figura N°22. Comparación de punto final de ebullición (PFE) para mezclas de dos (2) componentes.....	107
Figura N°23. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de dos (2) componentes	108
Figura N°24. Comparación de evaporado a 70°C (E70) para mezclas de dos (2) componentes.....	109

Figura N°25. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de tres (3) componentes	110
Figura N°26. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de tres (3) componentes	111
Figura N°27. Comparación de temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de tres (3) componentes	112
Figura N°28. Comparación de temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de tres (3) componentes	113
Figura N°29. Comparación de temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de tres (3) componentes	114
Figura N°30. Comparación de punto final de ebullición (PFE) para mezclas de tres (3) componentes.....	115
Figura N°31. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de tres (3) componentes	116
Figura N°32. Comparación de evaporado a 70°C (E70) para mezclas de tres (3) componentes.....	117
Figura N°33. Comparación de presión de vapor (RVP) para mezclas de ocho (8) componentes.....	118
Figura N°34. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de ocho (8) componentes	119
Figura N°35. Comparación de temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de ocho (8) componentes	120
Figura N°36. Comparación de temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de ocho (8) componentes	121
Figura N°37. Comparación de temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de ocho (8) componentes	122
Figura N°38. Comparación de punto final de ebullición (PFE) para mezclas de ocho (8) componentes	123
Figura N°39. Comparación de evaporado a 70°C (E70) para mezclas de ocho (8) componentes.....	124
Figura N°40. Representación del cuadro de diálogo mostrado por la herramienta al requerirse un volumen dentro de lo disponible	143
Figura N°41. Representación del cuadro de diálogo mostrado por la herramienta al requerirse un volumen fuera de lo disponible	144
Figura N°42. Equipo de destilación Herzog, modelo HDA 628	145
Figura N°43. Equipo de medición de presión de vapor Herzog, modelo HVP 976..	146
Figura N°44. Motor de combustión interna usado para la determinación de las propiedades de octanaje RON Y MON. Motor CFR, marca Waukesha.....	146

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla N°1 Modelo de la matriz experimental	19
Tabla N°2. Características de los grupos ASTM D86.....	24
Tabla N°3. Programa de experimentos a realizar	25
Tabla N°4. Condiciones durante la prueba (ASTM D86)	26
Tabla N°5. Condiciones de operación del equipo para el método RON y MON - ASTM D 2699, ASTM D 2700.....	29
Tabla N°6. Casos establecidos para la selección de recetas de Gasolinas de 91 octanos (G-91).....	34
Tabla N°7. Variables dependientes	38
Tabla N°8. Número de puntos exigidos en diseños reticulares.....	40
Tabla N°9. Número de experimentos para 9 factores y niveles 2,3,8 y 9	42
Tabla N°10. Caracterización de los componentes de la refinería	44
Tabla N°11. Requisitos para gasolina de 91 octanos norma NVF-764 “Gasolinas para motores de combustión interna”.....	45
Tabla N°12. Valor de parámetros estadísticos de cada una de las propiedades antidetonantes.....	51
Tabla N°13. Valor de parámetros estadísticos de cada una de las propiedades evaporativas.....	54
Tabla N°14. Resultados de gasolinas formuladas de 91 octanos	56
Tabla N°15. Requerimiento de componente verificados por la herramienta para un volumen máximo disponible de 100.000Bbls.....	75
Tabla N°16 Requerimiento de componente verificados por la herramienta para un volumen máximo disponible de 1000Bbls.....	75
Tabla N°17. Matriz experimental para dos (2) componentes	81
Tabla N°18. Matriz experimental para dos (2) componentes. (Continuación)	81
Tabla N°19. Matriz experimental para tres (3) componentes	82
Tabla N°20. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación).....	82
Tabla N°21. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación).....	82
Tabla N°22. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación).....	82
Tabla N°23. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación).....	83
Tabla N°24. Matriz experimental para ocho (8) componentes	83
Tabla N°25. Matriz experimental para nueve (9) componentes	83

Tabla N°26. Masas calculadas para mezclas de dos (2) componentes	84
Tabla N°27. Masas calculadas para mezclas de tres (3) componentes	85
Tabla N°28. Masas calculadas para mezclas de tres (3) componentes. (Continuación)	86
Tabla N°29. Masas calculadas para mezclas de ocho (8) componentes	87
Tabla N°30. Masas calculadas para mezclas de ocho (8) componentes. (Continuación)	87
Tabla N°31. Masas calculadas para mezclas de nueve (9) componentes	87
Tabla N°32. Masas calculadas para mezclas de nueve (9) componentes. (Continuación).....	87
Tabla N°33. Resultados de los ensayos de determinación de octanajes RON, MON, IAD y sensibilidad	88
Tabla N°34. Resultados de los ensayos de determinación de octanajes RON, MON, IAD y Sensibilidad (Continuación).....	89
Tabla N°35. Resultados de los ensayos de determinación de octanajes RON, MON, IAD y Sensibilidad (Continuación).....	90
Tabla N°36. Resultados del ensayo de perfil de destilación	91
Tabla N°37. Resultados del ensayo de perfil de destilación (Continuación).....	92
Tabla N°38. Resultados del ensayo de perfil de destilación (Continuación).....	93
Tabla N°39. Resultados del ensayo de presión de vapor e IBV	94
Tabla N°40. Resultados del ensayo de presión de vapor. (Continuación).....	95
Tabla N°41. Resultados del ensayo de presión de vapor. (Continuación).....	96
Tabla N°42. Valores determinados de IBV, Sensibilidad e IAD.....	97
Tabla N°43. Valores determinados de IBV, Sensibilidad e IAD (Continuación).....	98
Tabla N°44. Valores determinados de IBV, Sensibilidad e IAD (Continuación).....	99
Tabla N°45. Valores atípicos retirados del modelo de regresión lineal para las propiedades antidetonantes	100
Tabla N°46. Valores atípicos retirados del modelo de regresión lineal para las propiedades evaporativas	100
Tabla N°47. Valores atípicos retirados del modelo de regresión lineal para las propiedades evaporativas (continuación).....	101
Tabla N°48. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	103
Tabla N°49. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en presión de vapor (RVP) para mezclas de dos (2) componentes	103

Tabla N°50. Valores de punto inicial de ebullición (PIE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	104
Tabla N°51. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de dos (2) componentes	104
Tabla N°52. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	105
Tabla N°53. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de dos (2) componentes	105
Tabla N°54. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	106
Tabla N°55. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de dos (2) componentes	106
Tabla N°56. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	107
Tabla N°57. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de dos (2) componentes	107
Tabla N°58. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	108
Tabla N°59. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto final de ebullición (PFE) para mezclas de dos (2) componentes	108
Tabla N°60. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	109
Tabla N°61. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de dos (2) componentes	109
Tabla N°62. Valores de evaporado a 70°C (E70) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31	110
Tabla N°63. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en evaporado a 70°C (E70) para mezclas de dos (2) componentes	110
Tabla N°64. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	111
Tabla N°65. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en presión de vapor (RVP) para mezclas de tres (3) componentes	111
Tabla N°66. Valores de punto inicial de ebullición (PIE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	112
Tabla N°67. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de tres (3) componentes	112

Tabla N°68. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	113
Tabla N°69. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de tres (3) componentes.....	113
Tabla N°70. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	114
Tabla N°71. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de tres (3) componentes.....	114
Tabla N°72. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	115
Tabla N°73. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de tres (3) componentes.....	115
Tabla N°74. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	116
Tabla N°75. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto final de ebullición (PFE) para mezclas de tres (3) componentes	116
Tabla N°76. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	117
Tabla N°77. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de tres (3) componentes.....	117
Tabla N°78. Valores de evaporado a 70°C (E70) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118	118
Tabla N°79. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en evaporado a 70°C (E70) para mezclas de tres (3) componentes	118
Tabla N°80. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	119
Tabla N°81. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en presión de vapor (RVP) para mezclas de ocho (8) componentes	119
Tabla N°82. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	120
Tabla N°83. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de ocho (8) componentes	120
Tabla N°84. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	121
Tabla N°85. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de ocho (8) componentes.....	121
Tabla N°86. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	122

Tabla N°87. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de ocho (8) componentes.....	122
Tabla N°88. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	123
Tabla N°89. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de ocho (8) componentes.....	123
Tabla N°90. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	124
Tabla N°91. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto final de ebullición (PFE) para mezclas de ocho (8) componentes	124
Tabla N°92. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129	125
Tabla N°93. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en evaporado a 70°C (E70) para mezclas de ocho (8) componentes	125
Tabla N°94. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	125
Tabla N°95. Valores de punto inicial de ebullición (PIE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	125
Tabla N°96. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	126
Tabla N°97. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	126
Tabla N°98. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	126
Tabla N°99. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	126
Tabla N°100. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	126
Tabla N°101. Valores de evaporado a 70°C (E70) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130	127
Tabla N°102. Receta seleccionada para caso I a (G-91/ EtOH+MTBE)	128
Tabla N°103. Receta seleccionada para caso I b (G-91/ EtOH+MTBE)	129
Tabla N°104. Receta seleccionada para caso II a (G-91/ EtOH)	130
Tabla N°105. Receta seleccionada para caso II b (G-91/ EtOH)	131
Tabla N°106. Receta seleccionada para caso III a (G-91/ MTBE)	132
Tabla N°107. Receta seleccionada para caso III b (G-91/ MTBE)	133
Tabla N°108. Resultados de octanaje RON experimental y de regresión lineal.....	134

Tabla N°109. Resultados de octanaje MON experimental y de regresión lineal.....	134
Tabla N°111. Resultados de octanaje IAD experimental y de regresión lineal	135
Tabla N°110. Resultados de IAD experimental y de regresión lineal	135
Tabla N°112. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de presión de vapor (RVP)	136
Tabla N°113. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de punto inicial de ebullición (PIE)	136
Tabla N°114. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de temperatura a un 10% de evaporado (T10).....	137
Tabla N°115. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de temperatura a un 50% de evaporado (T50).....	137
Tabla N°116. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de temperatura a un 90% de evaporado (T90).....	137
Tabla N° 117. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de punto final de ebullición (PFE)	138
Tabla N°118. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de evaporado a 70°C (E70)	138
Tabla N°119. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de índice de bloqueo por vapor (IBV).....	138
Tabla N°120. Contenido de parafinas presente en los casos planteados (%v).....	139
Tabla N°121. Contenido de olefinas presente en los casos planteados (%v).....	139
Tabla N°122. Contenido de naftenos presente en los casos planteados (%v).....	140
Tabla N°123. Contenido de aromáticos presente en los casos planteados (%v).....	140
Tabla N°124. Contenido de benceno presente en los casos planteados (%v)	140
Tabla N°125. Contenido de olefinas + aromáticos presente en los casos planteados (%v)	141
Tabla N°126. Contenido de oxigenados presente en los casos planteados (%v)	141
Tabla N°127. Contenido de azufre presente en los casos planteados (%p).....	141
Tabla N°128. Contenido de oxígeno presente en los casos planteados (%p).....	142

INTRODUCCIÓN

En el siguiente Trabajo Especial de Grado se desarrolló un modelo integrado que permitió la formulación y predicción de calidades de gasolinas de 91 octanos RON con etanol y MTBE para una refinería, y el desarrollo de una herramienta computacional que considera las facilidades de la misma para determinar los requerimientos de insumos, capacidad de almacenamiento y demanda del producto terminado.

En el capítulo I se presenta el planteamiento del problema, referido a la necesidad de determinar los sinergismos que presenta el etanol con los demás hidrocarburos conformantes de la gasolina de 91 octanos, con miras de la incorporación del primero en el “pool” de gasolinas local como mejorador principal de octanaje. En la sección de antecedentes se señalan cada uno de los trabajos o investigaciones previas tomados como referencia para la elaboración de éste trabajo. Asimismo, se muestran cada uno de los objetivos planteados para llevar a cabo la presente investigación.

En el capítulo II se muestra el marco teórico, en donde son definidos cada uno de los conceptos esenciales para el mejor entendimiento del presente trabajo y su alcance. Se precisa el concepto de gasolina, así como sus propiedades antidetonantes y evaporativas, igualmente se hace referencia al diseño de experimento, tipos y características principales de éstos.

En el capítulo III se contiene el marco metodológico, en donde son reseñados cada uno de los pasos y procedimientos seguidos para completar los requerimientos del presente trabajo. Se describen las consideraciones tomadas para la selección del diseño de experimento, la validación y desarrollo de la herramienta computacional. Asimismo se muestran los pasos seguidos en la fase experimental para el correcto desempeño en cada uno de los ensayos de laboratorio.

En el capítulo IV se presentan los resultados correspondientes con lo planteado en los objetivos que fueron obtenidos a lo largo de la investigación así como el análisis de

cada uno de ellos en función a lo esperado y a los casos de estudio planteados previamente.

Posterior a los resultados, se muestran en el capítulo V cada una de las conclusiones obtenidas a través del presente Trabajo Especial de grado, así como las recomendaciones aportadas con miras a mejorar futuros estudios en la misma línea de investigación.

Finalmente, se muestra en la sección de apéndices cada una de las tablas y figuras que contienen datos de gran relevancia y que complementan lo mostrado en el trabajo, a fin de permitir al lector un mayor entendimiento de los alcances obtenidos en la presente investigación, entre los que destacan los valores de contenido en hidrocarburos de las mezclas, determinados mediante balances de masa; asimismo, se muestra la comparación entre la predicción del modelo lineal y de regresión lineal sobre las mezclas de la matriz experimental, a fin de resaltar la efectividad del modelo desarrollado.

CAPÍTULO I

FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN

I.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La gasolina es esencialmente una mezcla de hidrocarburos, que con el fin de mejorarle su poder antidetonante, mejor conocido como octanaje, se le incorporan otros compuestos químicos, tales como los hidrocarburos oxigenados. En su formulación se mezclan componentes obtenidos a partir de procesos de refinación, cuyo producto final contiene fácilmente doscientos o más hidrocarburos diferentes, que pueden ser combinados de acuerdo a las especificaciones de calidad requeridas. Debido a que algunas de las propiedades de las mezclas de gasolinas se caracterizan por su comportamiento no lineal con respecto a los componentes que la conforman, se han generado diversas metodologías que permiten estimar dichas propiedades, las cuales dependen de la cantidad y del tipo de hidrocarburo presente en cada gasolina.

Tener disponible los modelos que permitan predecir las calidades de gasolinas es de vital importancia para optimizar el desempeño de una refinería desde el punto de vista técnico-económico, por lo cual es necesario el desarrollo de herramientas computacionales que permitan la predicción de la calidad del producto terminado, basándose en las propiedades de los componentes de partida y en la interacción o sinergismos de sus distintos componentes.

En la búsqueda de compuestos que proporcionen un mejor desempeño a la gasolina, se tiene que el etanol es uno de los mejoradores de octanaje más ampliamente utilizado, debido a su alto contenido de oxígeno de 34,8% p/p, el cual le permite que se lleve a cabo una combustión más completa, favorece la reducción de emisiones contaminantes (HC no quemados, CO, CO₂ y NO_x) que contribuyen al efecto invernadero en el planeta debido a la sustitución de combustibles de origen fósiles y desde el punto de vista económico para Venezuela contribuye al desarrollo del sector agroindustrial generando bienestar social y fuentes de empleo.

Otro componente que se ha usado como aditivo para las gasolinas ha sido el metil-ter-butil-éter (MTBE), debido a que aumenta el número de octano. A pesar de lo antes mencionado, en EE.UU. se han implementado regulaciones que impiden su uso, principalmente para promover e incentivar el uso del Etanol de producción nacional como sustituto. En Venezuela, la empresa PDVSA posee un plan nacional con miras a la introducción del etanol en el “pool” de gasolinas de consumo local, en conjunto con el MTBE. Se considerarán ambos oxigenados, puesto que la sola producción de etanol no cubre la demanda existente en el mercado interno de acuerdo a proyecciones realizadas por dicha empresa.

Aunque hay trabajos referentes al área de optimización de crudos y de gasolinas, no se ha desarrollado un modelo que permita predecir el efecto de estos dos oxigenados en el “pool” de componentes de una refinería. De esta manera, para que se pueda implementar este plan, se necesita desarrollar un modelo de predicción que permita determinar con precisión las calidades de las mezclas de gasolinas con etanol y MTBE con base en el diseño de experimentos, la evaluación en laboratorio de los sinergismos de mezclas de componentes para los octanajes y propiedades evaporativas, la validación del modelo y su aplicación. Y en segundo lugar, es necesario la elaboración de una herramienta computacional que permita la optimización del proceso de formulación, considerando las facilidades existentes en una refinería entre las que destacan: la capacidad de producción y almacenamiento de los componentes, la capacidad de almacenamiento de la gasolina terminada, la demanda del producto, entre otras.

En síntesis, en este trabajo especial de grado, se desarrollará un modelo integrado de formulación y predicción de calidades de gasolinas con Etanol y MTBE con el fin de contar con una herramienta que permita la manufactura de gasolinas con ambos oxigenados, considerando un caso tipo de las facilidades de infraestructura y demanda del producto terminado en una refinería.

I.2 ANTECEDENTES

En términos económicos, el poder predecir el comportamiento de una mezcla con componentes oxigenados tales como Etanol y MTBE, resulta altamente beneficioso para una refinería, pues permite la optimización de la producción de la misma a fin de obtener los productos requeridos con las especificaciones establecidas. (De Abreu, 2007).

Anteriormente, se han realizado diversos estudios relacionados al área de optimización de crudos y el modelado de propiedades de mezcla de gasolinas; para este último se tiene el trabajo realizado por Celta, Llatas y Saab en 1995, quienes propusieron modelos de predicción que permiten conocer la calidad de las gasolinas a partir de las correlaciones matemáticas basadas en la composición detallada, es decir, parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos y oxigenados (PONA0x). El planteamiento de dicho trabajo, se fundamenta en determinar modelos que contribuyan a un mejor entendimiento de las formulaciones de gasolinas no tradicionales para optimizar las operaciones de mezcla ofreciendo una herramienta confiable en la determinación rápida de la calidad final del producto. En este estudio se seleccionó una metodología que consideraba el uso de modelos de regresión para la predicción de variables de calidad. Se estableció entonces el uso de diseños centrales compuestos, ya que permite el ajuste de modelos de superficies cuadráticas completas para describir el comportamiento no lineal. Los experimentos combinaron diseños factoriales a dos niveles (fraccionados o no), con puntos adicionales en cada una de las dimensiones del experimento (punto estrella). En dicho trabajo se concluyó que la estimación de calidad a partir de la composición química representa una ventaja competitiva, debido a que es independiente del origen de los componentes, por lo que es necesario solamente el conocimiento de la composición y la calidad de los mismos. Esto significa mayor flexibilidad y conocimiento de comportamiento frente a escenarios de regulación de composición de las gasolinas.

Con respecto a la adición de oxigenados en la formulación de gasolinas, Chevron en 1996, en su revista técnica sobre gasolinas para motor, indica que el incremento en el

contenido de oxígeno en dichos combustibles a través de la adición de oxigenados conlleva a la disminución de la relación aire-combustible, lo cual trae como resultados el incremento de oxígeno en la cámara de combustión, una combustión más completa y menos formación de monóxido de carbono (CO). Entre los oxigenados más utilizados en la actualidad destacan el Etanol, el metil ter-butil éter (MTBE), el ter-amil metil éter (TAME) y el etil ter-butil éter (ETBE).

Asimismo, en términos de toxicidad, Chevron (1996) sostiene que el uso de oxigenados contribuye de forma significativa a la conservación ambiental debido a su efecto reductor de CO, lo cual conlleva a una disminución de los gases de efecto invernadero en el planeta y de las secuelas negativas en la salud de seres humanos, animales y plantas. Con respecto al tema, aunque en la actualidad se ha presentado un decrecimiento en la utilización del MTBE en algunos países como Estados Unidos debido a medidas de proteccionismo de su economía, el estudio del 2001 de Carrasco y Guevara destaca que las concentraciones de MTBE en el agua ambiental no parecen tóxicas para los organismos acuáticos, excepto en caso de derrames de gasolinas; y en el caso de la toxicidad terrestre, igualmente se obtuvo que las concentraciones en el aire ambiental son bajas y que la semivida de este oxigenado es relativamente breve. Dicho trabajo se fundamentó en análisis ambientales del uso del MTBE como oxigenado en formulación de gasolinas basado sobre experiencias obtenidas en países desarrollados. Asimismo, los autores señalan que la producción de este aditivo es menos costosa que el plomo, aditivo altamente contaminante y nocivo a la salud, y que a diferencia de éste último puede ser producido en las mismas refinerías de petróleo; pues el plomo utilizado en la formulación de la gasolina es suministrado por la compañía Dupont, la única que provee este componente.

Para el año 2007, Álvarez en un estudio realizado con componentes de una refinería local, muestra los diversos pasos a seguir para la obtención de modelos de predicción de octanajes y propiedades aditivas en la formulación de gasolinas. En su estudio el autor hace especial énfasis en los sinergismos de mezcla que se presentaron entre dichos componentes y concluye que, al no tenerse información precisa de dichas

interacciones, la optimización no generaría una composición óptima lo cual puede resultar en un “pool” de octanaje más bajo o más alto de lo requerido. A fin de evitar esta situación, recomienda que en el proceso de mezcla se coloquen componentes con sinergia positiva dentro del mismo grado de gasolina y evitar o minimizar el uso de componentes con sinergia negativa.

Pico, Mora, Almaguer y Alfonso (2005) presentan un programa de cálculo de octanaje (RON) de mezclas de gasolina y alcohol etílico anhidro, en donde se estableció la realización de unos modelos para las dos refinerías productoras de gasolina más importantes de Cuba: La Habana y Santiago, que permitieron el desarrollo de una herramienta de cálculo rápido y confiable del valor de octanaje con el mismo error que la máquina de determinación experimental. En dichos modelos matemáticos se consideran las características de la gasolina de producción cubana y las peculiaridades del efecto del alcohol, que dieron lugar a un software que se denominó NAFTCOHOL®. Asimismo, Lundgren y Persson (2002) desarrollaron un modelo de predicción de operación de cada unidad de proceso para la refinería Nynas en Suecia, a través de la aplicación de programación lineal, con la finalidad de satisfacer la demanda existente minimizando los costos de la refinería. Como conclusión del estudio, se obtuvo un modelo útil en la planificación del sistema de producción, en especial en la fase de toma de decisiones.

Finalmente, para el año 2007, De Abreu D., desarrolló un modelo de simulación de refinerías con el propósito de contar con una herramienta que permita garantizar la máxima ganancia mediante el uso de técnicas de programación lineal. Para el desarrollo del modelo se consideraron los esquemas típicos de producción de una refinería venezolana y se seleccionaron tres crudos representativos: liviano, mediano y pesado. Una vez construido el modelo, se implementó en Microsoft Excel® y se evaluaron cuatro escenarios de tal forma de conocer su impacto sobre la ganancia de la refinería. La autora concluyó que el esquema de refinación orientado a la producción de diesel y al procesamiento de crudo pesado puede ser el de mayor demanda para los próximos años, en términos de rentabilidad económica.

I.3 OBJETIVOS

En base a la información presentada, en este trabajo de investigación se plantea el siguiente objetivo general y los objetivos específicos

I.3.1 Objetivo general

Desarrollar un modelo integrado de formulación y predicción de calidades de gasolinas con Etanol y MTBE con el fin de optimizar el desempeño de una refinería desde el punto de vista técnico.

I.3.2 Objetivos específicos

- (a) Establecer un diseño de experimento completo que considere el número y tipo de mezclas a realizar, considerando los sinergismos de mezclas que se pueden presentar entre todos los componentes de la formulación.
- (b) Realizar la preparación y evaluación de los componentes y las mezclas a nivel de laboratorio para las propiedades antidetonantes: octanaje de investigación (RON), octanaje motor (MON), índice antidetonante (IAD), sensibilidad (SENS); propiedades evaporativas: presión de vapor, destilación atmosférica y propiedades de balance de masa, utilizando las metodologías estandarizadas ASTM (Asociación Americana de Ensayo para Materiales).
- (c) Desarrollar un modelo matemático con base al análisis multivariable, utilizando el análisis de la varianza (ANOVA) para evaluar la precisión del mismo.
- (d) Comparar la predicción de propiedades evaporativas del modelo: presión de vapor y destilación, con respecto a la predicción lineal de las mismas.
- (e) Desarrollar una herramienta computacional que considere las facilidades existentes en la refinería: producción de los componentes, capacidad de almacenamiento y demanda del mercado local; que permita la preparación de las gasolinas oxigenadas con etanol y MTBE.

CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presenta la serie de conceptos teóricos que son necesarios para el entendimiento de los aspectos involucrados en el desarrollo de este proyecto.

II.1 GASOLINA

La gasolina es un combustible diseñado para motores de combustión interna, que posee un rango de ebullición que va desde los 30°C a 225°C. La gasolina convencional, es una mezcla de hidrocarburos derivados del petróleo crudo más ciertas cantidades de aditivos utilizados para mejorar su estabilidad, controlar la formación de depósitos en el motor y para modificar otras características de interés. Se obtiene a partir de la nafta de destilación directa, que es la fracción líquida más ligera del petróleo (exceptuando los gases). La nafta también se obtiene a partir de la conversión de fracciones pesadas del petróleo (gasoil de vacío) en unidades de proceso denominadas FCC craqueo catalítico fluidizado) o hidro craqueo.

II.2 PROPIEDADES DE LA GASOLINA

II.2.1 Octanaje o número de octano

Es la medida de la calidad y capacidad antidetonante de las gasolinas para evitar el “pistoneo” en los motores de ignición por chispa y se produzca la máxima cantidad de energía útil. Existen dos pruebas de laboratorio para medir el octanaje, las cuales se realizan en un motor monocilíndrico (CFR) operado a diferentes condiciones; la primera es el Número de Octano Research (RON) y la segunda el Número de Octano Motor (MON), RON simula condiciones poco severas de funcionamiento del motor; MON por su parte simula condiciones severas de funcionamiento de motor. Para una gasolina dada, RON es siempre mayor que MON. La diferencia entre las dos se llama sensibilidad de la gasolina.

El número de octano mostrado en las estaciones de servicio en el Índice Antidetonante (IAD), el cual se obtiene como el promedio del RON y el MON $[(RON+MON)/2]$. El IAD se utiliza como el valor a mostrar, pues la experiencia indica que es el mejor indicador de la capacidad antidetonante de la gasolina en la mayoría de los vehículos.

II.2.2 Pistoneo

Combustión violenta en los cilindros del motor que produce una detonación que, por su intensidad, puede causar daños serios al motor del vehículo. El pistoneo es el sonido de una combustión anormal. Una combustión normal en un motor de combustión interna es iniciada por una chispa, la llama es ventilada desde la bujía y viaja a través de la cámara de combustión, rápida y fluidamente hasta que casi todo el combustible se consume. Cuando la combustión es anormal, la última parte de la mezcla no quemada se enciende espontáneamente (autoignición) y se quema de forma rápida, causando que la presión en el cilindro se eleve de forma vertiginosa; esto crea el sonido de pistoneo característico. Un pistoneo ligero ocasional no daña a un motor, sin embargo, un pistoneo fuerte y prolongado puede resultar en: ruidos objetables, pérdida de poder, sobrecalentamiento de partes del motor y daño en el mismo. El golpeteo ocurre porque el poder antidetonante de la gasolina está por debajo de los requerimientos antidetonantes del motor en el momento.

II.2.3 Volatilidad

Una característica clave de la gasolina para el buen desempeño del vehículo es la volatilidad ó la tendencia de la gasolina a vaporizarse. La volatilidad es importante porque ni los líquidos ni los sólidos se queman, solo el vapor se quema. Por lo tanto la gasolina tiene que estar vaporizada antes de quemarse. La gasolina es formulada dependiendo del clima (invierno o verano) y condiciones ambientales para facilitar el encendido en frío, pero a la vez disminuir las emisiones evaporativas y evitar el bloqueo por vapor.

Tres propiedades son usadas para medir la volatilidad de la gasolina: presión de vapor, perfil de destilación y la relación vapor/líquido.

II.2.4 Perfil de destilación

La gasolina es una mezcla de más de cien hidrocarburos, muchos de los cuales tienen diferentes puntos de ebullición. El perfil de destilación es el conjunto de aumentos de temperatura a la cual es evaporada la mezcla para un serie fija de incrementos del porcentaje de volumen (5%, 10%, 20%, 30%, etc.) bajo condiciones específicas. La temperatura para el 10 % indica la facilidad de arranque en frío, el 50% indica la temperatura de calentamiento y aceleración, la temperatura para el 90% y el punto final de ebullición indica la cantidad relativa de componentes con altos puntos de ebullición en la gasolina.

II.2.5 Presión de vapor

Esta prueba mide la volatilidad y la tendencia inicial a la vaporización, así mismo la seguridad en el transporte.

Mayor volatilidad → implica → Mayor presión de vapor

Debe ser lo suficientemente alta para asegurar un fácil arranque del motor, pero no tan alta que pueda contribuir a que se forme bloqueo de vapor o excesiva emisión de vapores y pérdidas durante el funcionamiento. Es por esta razón que al formular una determinada gasolina, es muy importante tener en consideración el área geográfica y situación climática donde la misma va a ser utilizada. Por ejemplo, en épocas de invierno (en aquellos países donde existen cuatro estaciones) es necesario la utilización de una gasolina que sea fácilmente vaporizable a bajas temperaturas ambientales, ya que en caso contrario, se presentarían problemas de encendido y de operabilidad de los vehículos. Por otra parte una gasolina con alta volatilidad, que sea utilizada en la época de verano, donde existen altas temperaturas ambientales, podría traer problemas de taponamiento de vapor y los consiguientes problemas de

operabilidad de los vehículos; igualmente esta gasolina de verano, debe tener una volatilidad suficiente para proveer un encendido adecuado. (Mayz, 2009).

II.3 GASOLINA OXIGENADA

La gasolina oxigenada es la gasolina convencional a la cual se le han añadido oxigenados para incrementar el octanaje y/o reducir emisiones contaminantes. La gasolina oxigenada se requiere en países con inviernos marcados, en áreas metropolitanas que no cumplen la norma gubernamental de calidad estándar para el monóxido de carbono en algunos países. Los oxigenados mas comunes son el etanol y el metil ter-butil éter (MTBE). Asimismo se usan el ter-amil metil éter (TAME) y el etil ter-butil éter (ETBE).

II.3.1 Etanol

El alcohol etílico o etanol es un producto químico obtenido a partir de la fermentación de los azúcares que se encuentran en los productos vegetales, tales como cereales, remolacha, caña de azúcar, sorgo o biomasa. Dicho compuesto presenta un punto azeotropico a 78,3 °C, en donde la composición de la fase líquida y gaseosa se igualan y la ebullición es constante. El bioetanol (etanol a partir de la biomasa) al mezclarse con la gasolina produce un biocombustible de alto poder energético con características muy similares a la gasolina pero con una importante reducción de las emisiones contaminantes en los motores tradicionales de combustión. Generar etanol a partir de productos agrícolas presenta varias ventajas entre las cuales destacan las siguientes: reduce de emisiones contaminantes de monóxido de carbono (CO) e hidrocarburos con un bajo costo, reduce de la formación de lluvia ácida, es una fuente de combustible renovable, es fácil su producción y almacenamiento, no contamina el agua, aumenta el número de octanos y promueve una mejor combustión. (Guerra, 2008).

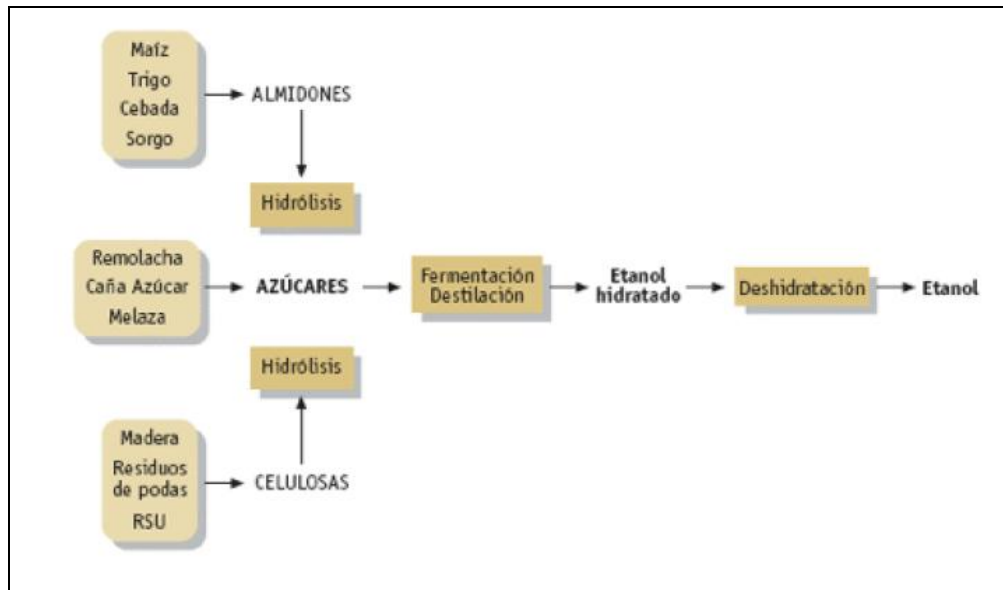


Figura No 1: Esquema de fabricación de etanol. (Guerra, 2008)

II.3.2 Metil Terc-Butil Éter (MTBE)

El MTBE (Metil Terc-Butil Éter) es un componente químico que proviene de la reacción química de metanol y del isobutileno. Pertenece a un grupo de compuestos químicos comúnmente conocidos como “oxigenantes” debido a que aumentan el oxígeno contenido en las gasolinas. El MTBE es volátil, inflamable y en forma líquida es incoloro; se disuelve fácilmente en el agua y puede formar mezclas explosivas con el aire. Es muy soluble con otros éteres y en alcohol. Es inestable en solución ácida. (Carrasco, 2001).

II.4 DISEÑO DE EXPERIMENTO

Es el plan formal para ejecutar los experimentos. Incluye la elección de respuestas, factores, niveles, bloques y tratamientos, así como la utilización de ciertas herramientas, llamadas agrupación, aleatorización y duplicación. (Álvarez, 2007).

La capacidad de experimentar está limitada por el costo en tiempo y en recursos humanos, Por lo tanto una organización óptima de la experimentación debe contemplar el menor número de experimentos que permita obtener la información buscada.

Cabe destacar, que el diseño experimental se aplica a sistemas en los cuales se observan una o más variables experimentales dependientes o respuestas, cuyo valor depende de los valores de una o más variables independientes controlables llamadas factores. En términos generales se puede afirmar que el diseño de experimentos propone, por un camino diferente, obtener la optimización de un proceso o producto con un mínimo de experimentos.

II.4.1 Factor

Es una variable que puede ser manejada de un modo controlado para estudiar su efecto y que tiene (o podría tener) influencia sobre la respuesta estudiada. Los factores se pueden clasificar en cualitativos y cuantitativos, teniéndose que son cualitativos cuando sus posibles valores no se pueden ordenar numéricamente, y cuantitativos cuando los valores posibles se pueden ordenar numéricamente. En el diseño experimental, cada factor representa una dimensión espacial, de manera que cuando se trabaja con varios factores, se tendrá un espacio multidimensional.

II.4.2 Nivel

Son los valores del factor que se van a examinar en el experimento. (Álvarez, 2007).

Para la elección de niveles, se debe definir el dominio experimental para cada factor es decir el intervalo de valores que puede tomar. También se debe considerar la forma en que se controlarán dichos factores para mantenerlos en los valores deseados y como se les medirá. Para esto es necesario conocer el proceso estudiado, mediante una combinación de experiencia práctica y comprensión teórica.

II.4.3 Diseño de experimento factorial completo a dos (2) niveles

Se entiende por diseño factorial a aquel en el que se investigan todas las posibles combinaciones de los niveles de los factores en cada experiencia. Son utilizados para estudiar el efecto conjunto de varios factores sobre una respuesta y se basan en la variación simultánea de un número limitado de niveles de los factores. (Vera, 2009).

Los planeamientos factoriales del tipo 2^k , donde k es el número de factores y 2 es el número de niveles, son los más comunes. El diseño requiere un experimento para cada una de las posibles combinaciones de los 2 niveles y de los k factores considerados. Para el diseño general 2^k el número de experimentos a realizar es $n=2^k$, es decir que cuando los factores aumentan, también aumenta el número de experimentos.

II.4.4 Diseño de experimento factorial completo a tres (3) niveles

El diseño 3^k , es un diseño que consta de k factores con tres niveles cada uno: nivel inferior (0), nivel intermedio (1) y nivel superior (2). Este diseño se utiliza cuando se quiere estimar el efecto cuadrático, es decir que la adición de un tercer nivel permite modelar con una relación cuadrática la relación entre la respuesta y cada factor, pero excepto para pequeños k , el diseño requiere de muchos experimentos. Además, se debe tener en cuenta que el diseño 3^k no es una buena elección como diseño de superficie de respuesta de segundo orden, ya que no es rotatable.

II.4.5 Diseño de experimento factorial fraccionado

En el diseño factorial, el número de experimentos puede ser muy elevado. Cuando hay más de 3 factores es posible realizar una simplificación suponiendo que las interacciones de orden 3 y superiores son despreciables. Es decir, es posible efectuar un diseño factorial parcial, sin que sea necesaria la determinación de todos los parámetros de interacción. De esta forma se puede disminuir el número de experimentos y aún determinar los efectos más importantes (principales y de interacciones de segundo orden). La lógica de esta aproximación es que los efectos de orden más grande son normalmente más pequeños que los efectos de los factores principales y los efectos de interacción entre dos factores. (vera, 2009).

II.4.6 Diseño experimental de mezclas

Cuando los factores son los componentes o ingredientes de una mezcla, sus niveles no son independientes y se deben utilizar diseños de mezcla. En estos diseños, los factores son los componentes de la mezcla y la respuesta es una función de la proporción de cada componente.

El sistema de coordenadas para un diseño de mezclas se denomina sistema de coordenadas simplex. Para el caso de tres componentes, las coordenadas pueden ser trazadas en un gráfico triangular. Los vértices del triángulo representan un componentes de la mezcla y son denotados de la siguiente forma $x_i = 1$, $x_j = x_k = 0$ para $i, j, k = 1, 2, 3$ y $i \neq j \neq k$. Los puntos interiores del triángulo representan mezclas en las cuales ninguno de los componentes está ausente. El centroide del triángulo corresponde a la mezcla con proporciones iguales de cada uno de los componentes ($\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}$). (Cornell, 1981).

Cabe destacarse que al trabajarse con mezclas, es importante tomar en cuenta las interacciones o sinergismos que en ellas presentan cada uno de los componentes integrantes. La sinergia se define como el efecto por el cual en la integración de varios elementos se produce una maximización de las cualidades de cada uno de los elementos con un resultado superior que el que se deriva de la simple suma de dichos elementos. (Casadesús, 2008).

Solo existe sinergia cuando el resultado o el objetivo alcanzado por un todo es mucho mayor siendo alcanzada en conjunto que si se consiguiera de los aportes de cada una de sus partes. Todo sistema es sinérgico cuando el examen de sus partes en forma aislada no puede explicar o predecir su comportamiento. La sinergia es, en consecuencia, un fenómeno que surge de las interacciones de las partes entre las partes o componentes de un sistema.

II. 5 PARÁMETROS ESTADÍSTICOS

II.5.1 Coeficiente de determinación

El coeficiente de determinación R^2 , mide la bondad de ajuste de la ecuación de regresión; es decir, da la proporción o porcentaje de la variación total en la variable dependiente Y explicada por las variables explicativas Xi conjuntamente. (Gujarati, 2003). Su fórmula simplificada es la siguiente:

$$R^2 = \frac{\text{Suma explicada de Cuadrados}}{\text{Suma total de cuadrados}}$$

Ec. 1

II.5.2 Error estándar de estimación

El error estándar de desviación muestra la desviación estándar de los residuos y trata de medir la diferencia promedio entre lo observado y lo estimado o esperado de acuerdo al modelo; se puede considerar como un indicador del grado de precisión con que la ecuación de regresión describe la relación entre las dos variables. Se expresa en la misma unidad de medida que está dada la variable dependiente Y.

La diferencia entre los términos “desviación estándar” y “error de estándar” es que la primera se refiere a los valores originales, mientras que la última está relacionada con valores calculados. Un estadístico es un valor calculado, obtenido con los elementos incluidos en una muestra.

II.5.3 Valor-p

El valor-p se puede definir como el menor nivel de significación al que se puede rechazar una hipótesis nula cuando es verdadera, es decir, es la probabilidad de llegar al resultado obtenido si la hipótesis nula es cierta.

Para los casos en que el valor-p es mayor a nivel de significación de 0,05 (95% nivel de confianza) ó 0,01 (99% de confianza) se acepta la hipótesis nula. Por su parte, en los casos en que el valor P es menor al nivel de significación se rechaza la hipótesis nula y se acepta la hipótesis alternativa.

CAPÍTULO III

MARCO METODOLÓGICO

En esta sección se presentan los pasos que se siguieron para lograr el cumplimiento de los objetivos planteados al inicio del presente trabajo.

III.1 SELECCIÓN DEL DISEÑO DE EXPERIMENTO

Para establecer el diseño de experimento, se determinó inicialmente las variables tanto dependientes como independientes. Las variables independientes se seleccionaron tomando como criterio los componentes del “pool” de gasolinas de las refinerías empleados en la producción actual de gasolina según las especificaciones de calidad establecida por la norma venezolana: FONDONORMA NVF-764 “Gasolinas para motores de combustión interna”. Cabe destacar que a diferencia del pool de componentes de las recetas empleadas en la refinería, se incluye el etanol como otro componente oxigenado, a fin de estudiar su interacción con los demás componentes.

Luego, se establecieron las variables dependientes a partir de los parámetros de calidad señalados en la nombrada norma NVF-764 para gasolinas de 91 octanos. Se establecieron los factores para el diseño de experimento, los cuales se corresponden a la cantidad de componentes empleados por la refinería para la elaboración de gasolinas. Luego, se seleccionaron los niveles del diseño que representaron las proporciones en volumen en la mezcla de cada uno de los factores o componentes a evaluar, los cuales afectaron directamente la cantidad de experimentos a realizarse. Dichos niveles se escogieron tomando en cuenta principalmente, las volatilidades de los componentes, con el propósito de evaluar la factibilidad de los ensayos comprendidos por propiedades evaporativas.

En la Tabla N° 1, se muestra un esquema de la matriz experimental planteada para cada nivel.

Tabla N° 1 Modelo de la matriz experimental

	Mezcla 1	Mezcla 2	...	Mezcla k
Componente 1	P ₁₁	P ₁₂		P _{1k}
Componente 2	P ₂₁	P ₂₂	...	P _{2k}
.	.	.		.
.
Componente n	P _{n1}	P _{n2}		P _{nk}

Donde:

P_{nk}: Proporción en volumen del componente n en la mezcla k.

A cada una de estas mezclas se les midió sus propiedades tanto evaporativas como antidetonantes. Cabe destacar que en el caso de cada uno de los componentes se determinaron además de las propiedades antes mencionadas, su composición detallada PONAOX (parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos y oxigenados), densidad y período de inducción, lo cual permitió establecer la composición de cada una de las mezclas a formular.

Con respecto a la selección del diseño de experimentos, la teoría señala que aquel a emplearse debe ser el que indique como planificar, diseñar u organizar la secuencia de experimentos de una forma lógica, de modo de minimizar el costo y la influencia del error experimental sobre la información buscada. Asimismo, tomando en cuenta que un diseño de experimentos es una técnica orientada a problemas multivariantes, el mismo debe proponer, por un camino eficiente la optimización de un proceso o producto con un mínimo de experimentos.

III.2 DESARROLLO DE FASE EXPERIMENTAL

Una vez establecidas las variables independientes, dependientes y el diseño de experimento, se procedió a realizar la fase experimental del trabajo:

III.2.1 Caracterización de componentes

Con la materia prima proporcionada (componentes de refinería) se llevó a cabo el proceso de caracterización de componentes, en donde se determinó el rango de ebullición, presión de vapor, densidad a 15 °C y a 20 °C, período de inducción, octanaje RON y MON, contenido de azufre y composición química (parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos y oxigenados) de cada uno de ellos. Cabe destacar que los análisis de contenido de azufre y composición química fueron realizados en los Laboratorios de Química Analítica de PDVSA Intevep

Los siguientes análisis forman parte de la caracterización de los componentes:

- **Determinación de densidad**

Se aplicó la norma ASTM D 4052 densidad y densidad relativa de líquidos por densimetría digital, la cual se utiliza para determinar la densidad de destilados del petróleo y aceites viscosos que pueden ser manipulados de manera normal como líquidos a temperaturas de prueba entre 15 y 35 °C. En este caso se determinaron las densidades a 15 y 20 °C de los componentes de la refinería antes mencionados.

Para llevar a cabo este análisis se utilizaron: un analizador digital de densidad *Anton Parr DMA 48*, baño circulante de temperatura, jeringa, adaptador de presión y termómetro. El procedimiento seguido fue el siguiente:

1. Se pone en funcionamiento el equipo de densidad.
2. Establecer la temperatura con la que se desea trabajar de la siguiente manera:
 - 2.1. Oprimir **F**, el número 300 y la tecla Enter
 - 2.2. Marcar la temperatura a la que desea realizar las medidas y oprimir enter.
3. Colocar aproximadamente 50 mL de muestra en un vial destinado para tal fin.
4. Colocar el vial en el porta-muestra automático.
5. Oprimir el botón START del densímetro.

- **Determinación de la estabilidad a la oxidación**

Se aplicó la norma COVENIN 873:1994 método de ensayo de determinación de la estabilidad a la oxidación, la cual se emplea se utiliza para establecer el período de inducción a la oxidación de las gasolinas en condiciones severas.

Para llevar a cabo este análisis se utilizaron: Bomba de oxidación *Petrotest DP*, empaadura, vástago de la bomba, medidor de presión, recipiente de vidrio con su tapa, baño para efectuar la oxidación, válvula de aguja y termómetro. Como reactivos se emplearon: Disolvente para goma, etilenglicol y oxígeno (extra seco). Finalmente, el procedimiento empleado fue el siguiente:

1. Se lava el recipiente de vidrio y su tapa con disolvente para goma (mezcla 50% vol. Tolueno y 50% vol. acetona).
2. Se coloca el recipiente y su tapa en una estufa entre 100 °C y 150 °C durante una hora como mínimo.
3. Se drena cualquier porción de gasolina de la bomba.
4. Se enfría la bomba y la gasolina a ser analizada, a una temperatura entre 15°C y 25°C.
5. Se coloca el recipiente de vidrio para la muestra dentro de la bomba y se vierten en el 50 mL de la muestra. Se tapa el recipiente.
6. Se tapa la bomba y se introduce oxígeno hasta una presión entre 689 kPa (100psi) y 703 kPa (102 psi).
7. Se permite que el gas contenido en la bomba escape lentamente para desalojar el aire contenido en la misma. Se libera la presión lentamente a través de la válvula de aguja a un flujo no menor de 344,7 kPa (50psi). Se repite el paso en busca de fugas.
8. Se coloca la bomba cargada en el baño termostático y se anota el instante de inmersión como tiempo inicial de la prueba. Se mantiene la temperatura del baño entre 98 °C y 102 °C.

9. Se anota el tiempo desde que la bomba es colocada en el baño hasta que alcance el punto de caída de presión de 14 psi, este tiempo es el período de inducción a la temperatura de ensayo.
10. Se enfría la bomba, se disminuye lentamente la presión de ésta y se procede a la limpieza de la misma y del recipiente que contiene la muestra.

III.2.2 Preparación de las mezclas

Para realizar las formulaciones correspondientes al diseño de experimento seleccionado. Se aplicó la norma ASTM D 4307 práctica estándar para la preparación de mezclas líquidas para usos analíticos, referida a la preparación de mezclas líquidas para análisis. Se prepararon las mezclas midiendo la masa a fin de evitar la expansión/dilatación térmica de los fluidos, y minimizar el error debido a la preparación de las mezclas.

Dado que para el desarrollo de este trabajo se requería determinar las propiedades tanto evaporativas como antidetonantes de las mezclas planteadas en la matriz experimental, la formulación de cada una de las anteriores debía contener la cantidad suficiente que permitiese la realización de los ensayos respectivos. Se estableció por lo tanto, que para los análisis de octanaje RON (Número octano de investigación) y MON (Número octano motor) se emplearía 1 litro de la mezcla formulada a fin de satisfacer el requerimiento de el motor monocilíndrico empleado para dicha medición. Por su parte, en el caso de los análisis de presión de vapor y perfil de destilación se emplearon 500 mL de la mezcla, tomándose en cuenta para ello que en el caso del último ensayo se requieren de 100 mL para su medición, sin embargo la misma debía repetirse en caso de no cumplirse alguno de los parámetros establecidos por la norma ASTM D 86 (Método estándar de prueba para destilación de productos de petróleo a presión atmosférica).

El único equipo requerido fue una balanza *Mettler PM 34*, y como materiales se utilizaron: Pipeta, Beaker de 3L, envase genérico de 1L y otro de 0,5L. El procedimiento fue el siguiente:

1. Conocidas las densidades a 20 °C, y el volumen requerido de la muestra (1,5 L), se determina la masa de cada uno de los componentes para cada mezcla.

$$D = \frac{m}{v} \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde:

D: densidad a 20°C (g/mL)

m: masa (g)

v: volumen (mL)

2. Se coloca el beaker en la balanza y se tara la misma.
3. Se añaden los componentes desde el menos volátil hasta el más volátil en el beaker, que en este caso sería el butano.
4. Se vierte la mezcla en los frascos de 1 litro y de 0,5 litros.

En la Tabla N° 2, se muestra el programa de experimentos realizados.

III.2.3 Propiedades evaporativas

Luego de la caracterización de componentes y preparación de mezclas se procedió a la determinación de las propiedades evaporativas entre las que se tiene: perfil de destilación, presión de vapor e índice de bloqueo por vapor.

- **Destilación**

Se determinó el rango de ebullición de las muestras aplicando la norma ASTM D 86 método estándar de prueba para destilación de productos de petróleo a presión atmosférica. La destilación se realizó en una unidad de destilación tipo batch a presión atmosférica bajo condiciones que están diseñadas para proveer un fraccionamiento aproximado de un plato teórico. El método es diseñado para el análisis de combustibles destilados; no aplica para productos contaminados con cantidades apreciables de material residual. Se decidió iniciar con dicho análisis, puesto que el mismo requiere de 100 mL de la sustancia para llevarse a cabo, y al retirar ésta cantidad se asegura que en el envase contenedor de la muestra se presente entre un 70% a 80% de la mezcla, lo cual es un requisito del ensayo de presión de

vapor (ASTM 5191) que garantiza el equilibrio líquido-vapor adecuado de la mezcla y finalmente su medición. Para este análisis, se utilizó un equipo de destilación Herzog HDA 628. Materiales: balón de destilación de 125 mL, cilindro receptor de 100 mL, cilindro de 10 mL para determinación del residuo de destilación. Reactivos: Tolueno, n-heptano, n-hexano y acetona.

El procedimiento experimental empleado fue el siguiente:

1. De acuerdo a su composición, presión de vapor, punto inicial de ebullición esperado (PIE) o punto final de ebullición esperado (PFE), o la combinación de éstos, se clasifica la muestra en uno de los cuatro grupos establecidos.
2. En el caso de los grupos 1 y 2 se debe almacenar la muestra a temperaturas por debajo de 10 °C. Por su parte las muestras ubicadas en el grupo 3 y 4 se deben almacenar a temperatura ambiente o temperaturas menores.
3. Se transfiere la muestra al cilindro receptor hasta la marca de 100 mL y se transfieren completamente el contenido del cilindro receptor en el balón de destilación, asegurándose que no quede líquido en el tubo de vapor.

Tabla N° 2. Características de los grupos ASTM D86

	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4
Muestra				
Características				
Tipo de Destilado				
Presión de vapor				
37,8 °C, kPa	>= 65,5	<65,5	<65,5	<65,5
100 °F, psi	>= 9,5	<9,5	<9,5	<9,5
(Métodos de prueba D323, D4953, D5190, D5191, D 5482, IP 69 o IP 394)				
Destilación, PIE °C			<=100	>100
°F			<=212	>212
PF °C	<=250	<=250	>250	>250
°F	<=482	<=482	>482	>482

Tabla N° 3. Programa de experimentos a realizar

Análisis experimentales	Cantidad	Equipo a emplear	Tiempo de duración del análisis	Cantidad de repeticiones	Producto
PONA	2 µL	Cromatógrafo de gases con detector de ionización a la llama (FID)	2 h	1	Composición de parafinas, olefinas, nafténicos y aromáticos en la sustancia (%P y %V)
Determinación de oxigenados	1 µL	Cromatógrafo de gases con detector de ionización a la llama selectiva para oxígeno	2h	1	Composición másica de cada componente oxigenado presente en la gasolina
Azufre en productos de petróleo	20 mL	Equipo de fluorescencia de RX de onda dispersiva	10 min.	1	Azufre total en productos de petróleo
Determinación de densidad (a 15 y 20 °C)	0,7 mL	Analizador digital de densidad	10 min	1	Densidad de destilados de petróleo
Determinación de la estabilidad a la oxidación.	50 mL	Bomba de oxidación	4 h	1	Período de inducción a la oxidación
Destilación de productos de petróleo a presión atmosférica	100 mL	Unidad de destilación de laboratorio tipo batch a presión atmosférica	1 h	1	Porcentaje evaporado o recuperado en función de temperatura de ebullición
Ensayo para presión de vapor de productos del petróleo	2,05 mL	Equipo de presión de vapor	5 min	1	Presión de vapor total ejercida en vacío por productos de petróleo
Ensayo para número de octano de investigación de combustible (RON)	1 L	Motor monocilíndrico de compresión variable	30 min	1	Número de octano de investigación (RON)
Ensayo para número de octano motor en combustibles (MON)	1 L	Motor monocilíndrico de compresión variable	30 min	1	Número de octano Motor (MON)

4. Se transfieren completamente el contenido del cilindro receptor en el balón de destilación, asegurándose que no quede líquido en el tubo de vapor.
5. Colocar el sensor de temperatura a través de un accesorio de ajuste diseñado para centrar mecánicamente el sensor en el cuello del balón.
6. Ajustar el tubo de vapor del balón en el condensador y se coloca el cilindro receptor que fue utilizado para medir la muestra, sin secar su interior, dentro del baño de temperatura controlada al final del tubo del condensador.
7. Regular el calentamiento procurando que el intervalo de tiempo entre el inicio del calentamiento y el punto inicial de ebullición (PIE) cumpla con lo especificado en la Tabla N° 4.

Tabla N° 4. Condiciones durante la prueba (ASTM D86)

		Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4
Temperatura del baño de enfriamiento	°C	0-1	0-5	0-5	0-60
	°F	32-34	32-40	32-40	32-140
Temperatura del baño alrededor del cilindro receptor	°C	13-18	13-18	13-18	(+/-) 3
	°F	55-65	55-65	55-65	(+/-) 5 temperatura de carga
Tiempo desde el inicio del calentamiento al punto inicial de ebullición, minutos		5-10	5-10	5-10	5-15
Tiempo desde el punto inicial de ebullición al 5% recuperado, segundos		60-100	60-100		
al 10% recuperado, minutos					
Promedio uniforme de volumen de condensación desde el 5% recuperado hasta 5ml en el balón, ml/min		4-5	4-5	4-5	4-5
Tiempo registrado de 5ml de residuo hasta el punto final, ml/min		5 máx	5 máx	5 máx	5 máx

8. Continuar regulando el calentamiento de modo que se obtenga un promedio de datos de condensación desde el 5 o 10% recuperado hasta 5 mL de residuo en el balón, entre 4 a 5mL por minuto.
9. Después que el balón se ha enfriado y no se observan más vapores, desconectar el balón del condensador, colocar su contenido en un cilindro graduado de 5 mL, y con el balón suspendido sobre el cilindro, permitir que el balón drene hasta que no se aprecie incremento en el volumen de líquido.

Medir el volumen en el cilindro graduado con una aproximación de 0,1 mL, y registrar como porcentaje de residuo.

10. Al finalizar el proceso, se imprimen los valores de las observaciones de lecturas de temperatura y volúmenes de condensado; igualmente se registran los valores de volumen del residuo y de pérdidas.

- **Medición de presión de vapor**

Por medio de la aplicación de la norma ASTM D 5191 método estándar de ensayo para presión de vapor de productos del petróleo método mini, se determinó la presión de vapor total ejercida en vacío por cada una de las muestras.

Cabe destacar que en los casos en que no se cumplía con los parámetros de la norma ASTM D 86 para el perfil de destilación, se repetía nuevamente el procedimiento única y exclusivamente cuando se determinaba el valor de presión de vapor en el equipo Mini RVP Herzog modelo HVP-970, a fin de evitar que la mezcla perdiese la relación líquido-vapor adecuada. Los equipos requeridos fueron los siguientes: equipo Mini RVP *Herzog modelo HVP-970* y bomba de vacío. Entre los materiales usados está la jeringa. Siendo los reactivos: ciclopentano, tolueno y acetona. El procedimiento experimental fue el siguiente:

1. Se obtiene la muestra en un envase de 1 L, llenándolo entre 70 y 80% de su capacidad y se almacena en un baño de hielo apropiado o refrigerador.
2. Se agita la muestra refrigerada vigorosamente y se regresa al baño de enfriamiento o refrigerador por un mínimo de 2 minutos y se repite el procedimiento anterior un par de veces más.
3. Se utiliza ciclopentano y tolueno como muestras de control de calidad para comprobar que el equipo de presión de vapor está efectivamente operativo. Se registra el valor de DVPE y se compara con el criterio de decisión para control estadístico.
4. Se debe limpiar la cámara de ensayo con acetona entre una muestra y otra y se emplea una bomba para hacer vacío a fin de lograr dicho vacío en la cámara

de ensayo y luego se toman 2,05 mL de la muestra previamente enfriada y saturada con aire, y se introduce dicha muestra dentro de una cámara de ensayo evacuada, y termostáticamente controlada.

5. Después de la introducción en la cámara, la muestra es mantenida hasta alcanzar el equilibrio térmico a la temperatura de ensayo 37,8 °C (100 °F), en donde se activa una alarma indicando el valor en la pantalla de la presión de vapor total que es convertida a presión de vapor seca equivalente (DVPE).

- **Cálculo del índice de bloqueo por vapor (IBV)**

Posterior a la realización del perfil de destilación y la medición de presión de vapor en cada mezcla, se procedió al cálculo del índice de bloqueo por vapor mediante la siguiente ecuación:

$$IBV = RVP + 0,13 * E70. \quad \text{Ec. 3}$$

Donde:

IBV: índice de bloqueo por vapor

RVP: presión de vapor reid

E70: evaporado a 70°C

III.2.4 Propiedades antidetonantes

Una vez establecidas las propiedades evaporativas de cada una de las mezclas formuladas, se procedió a determinar las propiedades antidetonantes de las mismas.

- **Determinación de octanaje RON y MON**

Se procedió a llevar a cabo la medición de propiedades antidetonantes; dichas muestras fueron enviadas al laboratorio de CFR en la Gerencia Técnica de Calidad de Productos de PDVSA Intevep. Para la determinación del octanaje se aplicaron las normas ASTM D 2699 método estándar para la determinación del número octano de investigación en motores de encendido por chispa y ASTM D 2700 método estándar para la determinación del número octano motor en motores de encendido por chispa.

En la Tabla N° 5 se observan las condiciones de operación del motor monocilíndrico RON y MON al momento de la medición del octanaje.

Tabla N° 5. Condiciones de operación del equipo para el método RON y MON -
ASTM D 2699, ASTM D 2700

Condición	Método		Unidad
	Research	Motor	
Velocidad del motor	600 ± 6	900 ± 9	r.p.m
Aceite del cárter	SAE 30	SAE 30	-
Presión de aceite a la temperatura de operación	25 a 30	25 a 30	psi
Temperatura del aceite del cárter	135 ± 15	135 ± 15	° F
Temperatura del refrigerante	212 ± 3	212 ± 3	° F
Temperatura del aire de admisión a 26,0 in Hg	67	100 ± 5	° F
Avance de la chispa antes del punto muerto superior	13	Variable	Grados

Se requirió de un motor monocilíndrico marca *Waukesha* de compresión variable e instrumentación y equipos auxiliares, buretas con capacidad de 200 mL a 500 mL y se siguió el procedimiento a continuación:

1. Se inicia la preparación del equipo, encendiendo el mismo y llenando con combustible patrón para poner el equipo en condiciones de operación.
2. Se deja el equipo en funcionamiento hasta que las temperaturas alcancen los parámetros indicados en la tabla No 4.
3. Se verifica que el motor esté funcionando en condiciones de operación estándar, con un combustible de intensidad de pistoneo promedio y se procede a calibrar.
4. Se introduce la muestra de combustible y se establece la proporción de la mezcla aire-combustible óptimo, variando el nivel de combustible variando una válvula hasta que la mezcla llega a su máxima capacidad de pistoneo.
5. Se varía la relación de compresión para así colocar el indicador del medidor de pistoneo en un valor de aproximadamente 50 ± 1 divisiones.

6. A la relación de compresión mostrada en el indicador se le suma una compensación de presión atmosférica debida a la altura de las instalaciones de PDVSA-Intevep con respecto al nivel del mar.
 7. Con la relación de compresión compensada, se establecen valores tentativos de octanaje RON y MON de acuerdo a tablas de intensidad de golpeteo a presión barométrica estándar y se prepara la muestra patrón de un combustible primario de referencia para la calibración del equipo a base de n-heptano (0 octanos) e iso-octano (100 octanos) con un octanaje parecido al de la muestra, teniendo un margen de variación de ± 2 octanos.
 8. Moviendo la perilla para el ajuste de la relación aire-combustible, se busca la máxima intensidad de pistoneo de la muestra patrón, y se ajusta la lectura del indicador dial hasta llegar a la correspondiente al número de octanos RON o MON del combustible de referencia preparado.
 9. Se ajusta la aguja del visor de pistoneo hasta llegar a 50 ± 1 divisiones en el visor con la perilla de calibración.
 10. Se purga el sistema abriendo y cerrando la válvula varias veces, hasta no observarse burbujas en la tubería. Una vez calibrado el motor se introduce la muestra de combustible.
 11. Se ajusta la intensidad de pistoneo estándar subiendo o bajando la altura del cilindro hasta que la aguja alcance las 50 ± 1 divisiones, observando el resultado en el indicador, al cual se le realiza luego la respectiva compensación de la presión barométrica.
 12. Al obtenerse el número de octanos RON o MON según fuese el caso, se verifica que el resultado no varíe en ± 2 octanos de acuerdo con el octanaje del combustible de referencia usado.
- **Cálculo del índice antidetonante (IAD) y sensibilidad (SENS)**

Posterior a la medición de octanaje RON y MON, se procedió al cálculo del índice antidetonante (IAD) y de la sensibilidad (SENS) de cada mezcla. Para ello se utilizaron las siguientes ecuaciones respectivamente:

$$IAD = \frac{(RON + MON)}{2} \quad \text{Ec. 4}$$

$$SEN = RON - MON \quad \text{Ec. 5}$$

Donde:

IAD: índice antidetonante

RON: octanaje de investigación

MON: octanaje motor

III.2.5 Propiedades de balance de masa

Finalmente, luego de evaluar tanto las propiedades evaporativas como antidetonantes de las mezclas formuladas, y de conocer la composición detallada de cada uno de los componentes del pool de gasolinas, se procedió a la determinación del contenido de parafinas, olefinas, naftenos, aromáticos y oxigenados de cada una de dichas mezclas a través de las propiedades de balances de masa, ya sea en volumen o en masa según sean los requerimientos de la norma FONDONORMA NVF-764 “Gasolina para motores de combustión interna”. Para cada caso se aplicó la siguiente ecuación:

$$\% P_k = \frac{\sum_{i=1}^n X_{P_i} * C_i}{\sum_{i=1}^n C_i} \quad \text{(Ec. 6)}$$

Donde:

%P: porcentaje de la composición P en la mezcla k (volumen ó masa).

X_i: fracción de P del componente i (volumen ó masa).

C_i: cantidad del componente i en la mezcla k (volumen ó masa).

III.3 REGRESIÓN LINEAL Y ANÁLISIS DE VARIANZA

Una vez obtenidos los resultados se ingresaron los datos en el programa estadístico Statgraphics Centurion versión XV, con el fin de realizar una regresión multivariable y el análisis de varianza; dichos datos incluyeron también los resultados de la fase de

caracterización de componentes. Se procedió a la aplicación del análisis multivariable, función incluida en el programa. Para cada uno de los parámetros analizados en laboratorio, se repitió el procedimiento, estableciendo en cada caso al primero como variable dependiente y a todos los componentes del “pool” como variables independientes. Luego de ejecutarse el proceso de regresión lineal múltiple, se encontró una relación entre cada una de las variables dependientes Y_i y el conjunto de variables independientes X_i que se aproximara a la relación que realmente existe entre las variables y la cual era desconocida, con la finalidad de poder predecir valores de Y , a partir de valores de X . El modelo que se obtuvo para cada variable dependiente fue expresado como:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 \chi_{1i} + \beta_2 \chi_{2i} + \dots + \beta_k \chi_{ki} + \varepsilon_i \quad (\text{Ec. 7})$$

Donde:

β_i : coeficientes de regresión

X_{ki} : Valor de la variable independiente k

Y_i : Valor de la variable dependiente i

ε : Error de la variable modelada

Los coeficientes fueron estimados mediante el método de los mínimos cuadrados y se tomaron los valores de regresión lineal R^2 , y de regresión lineal ajustado como parámetros de determinación de la regresión, para definir el porcentaje de variación total en Y debida a la variación de X . Posteriormente se procedió a realizar el análisis de varianza, el cual permitió obtener el error asociado al modelo de esa variable mediante la determinación de los parámetros: coeficiente de determinación R^2 , error absoluto medio, error estándar del estimado y valor p . Cada uno de dichos parámetros fue calculado por el programa, y permitieron en conjunto evaluar la precisión del modelo y observaciones atípicas que pudieron afectar de forma significativa al mismo.

Una vez realizadas la regresión lineal múltiple y el análisis de varianza a los resultados experimentales de cada una de las variables dependientes estudiadas, se

obtuvo una serie de ecuaciones, en donde quedaron establecidas las relaciones de las mismas con las variables independientes para un 95% de nivel de confianza. Cada una de dichas ecuaciones se ingresó al programa computacional Excel®, donde se obtuvo la solución del sistema de n ecuaciones mediante la aplicación del complemento *Solver* incluido en dicha herramienta, y utilizando como restricciones del primero las especificaciones de calidad de gasolinas de 91 octanos, lo cual limitó la superficie de respuesta con el fin de obtener soluciones factibles que correspondiesen con las calidades de las gasolinas comerciales. Se plantearon 21 ecuaciones en total, tomándose en cuenta las propiedades antidetonantes, evaporativas y de balance de masa.

III.4 VALIDACIÓN

Luego de resolver el sistema de ecuaciones, se procedió al planteamiento de una serie de recetas acordes a las restricciones establecidas por la norma FONDONORMA NVF-764, variándose en cada caso los valores de la función objetivo fijada. Posterior a esto, se seleccionaron aquellas recetas que presentaron mayor holgura con respecto a los límites de la norma, y que además ofrecieron formulaciones rentables en términos económicos para la refinería, es decir, menor dependencia de los componentes que implican mayores costos de producción.

Una vez escogidas las recetas, se les realizaron los respectivos análisis de presión de vapor, destilación y octanajes, a fin de comprobar si los valores que se obtuvieron del modelo se encontraban acordes a los valores experimentales y así validar el modelo desarrollado. Para lograr esto, se establecieron tres casos base de interés para la predicción de recetas tipo en la refinería, entre los que se encuentran: Gasolina de 91 octanos con etanol y MTBE, gasolina de 91 octanos con etanol y gasolina de 91 octanos con MTBE. Cabe destacar que al momento de plantear dichas recetas, se trató de lograr recetas similares a lo producido por la refinería, permitiendo así la obtención de soluciones económicamente factibles al momento de reproducirse las mismas en cantidades masivas.

Tabla No 6. Casos establecidos para la selección de recetas de Gasolinas de 91 octanos (G-91)

CASOS	I	a	n-1HC
		b	n-2HC
	II	a	n-MTBE
		b	(n-MTBE)- 2HC
	III	a	(n-Etanol)- 1HC
		b	(n-Etanol)- 2HC

Donde:

n: número total de componentes (9)

HC: hidrocarburo

Una vez realizados los análisis experimentales requeridos, se procedió a determinar el error real del modelo de regresión lineal en cada una de las recetas planteadas, a través de la siguiente ecuación:

$$Error = \frac{V_{pred} - V_{obt}}{V_{obt}} * 100 \quad (Ec. 8)$$

Donde:

Error: Error real del modelo de regresión lineal

V_{pred}: Valor predicho por el modelo de regresión

V_{obt}: Valor obtenido por el método de ensayo

III.5 COMPARACIÓN DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS

A partir de las propiedades evaporativas: presión de vapor y destilación, de cada uno de los componentes de partida empleados en la formulación de las mezclas, se procedió a realizar la predicción utilizando ecuaciones de propiedades aditivas como la siguiente:

$$P_k = \sum_{i=1}^n \chi_i \cdot P_i \quad (Ec. 9)$$

Donde:

P : Propiedad evaporativa de la mezcla k

X_i : Composición en volumen del componente i en la mezcla k

P_i : es la propiedad evaporativa a evaluar del componente i .

A continuación, se determinó el error real del modelo lineal empleando la Ecuación N°8. Con el objetivo de comparar cual tipo de modelo de predicción de la propiedad evaporativa se ajusta más a los valores obtenidos por los métodos de ensayo estandarizados para las propiedades de presión de vapor y destilación, se analizaron los resultados de ambos modelos de predicción empleados: regresión lineal múltiple y modelo lineal para propiedades aditivas, y se empleó la ecuación N°9 para determinar el porcentaje de desviación en cada uno de ellos con respecto al valor experimental.

III.6 DESARROLLO DE HERRAMIENTA COMPUTACIONAL

Posteriormente, tomando en cuenta las facilidades de la refinería como volúmenes de insumo disponible y capacidad de tanques se establecieron los datos requeridos, planteando diversas situaciones factibles en dichas instalaciones: G-91 con etanol y MTBE, G-91 con etanol y G-91 con MTBE. Se ingresaron los valores de los requerimientos (variables dependientes) en el modelo ya validado, a fin de obtener una serie de respuestas que indiquen las composiciones necesarias de cada uno de los componentes (variables independientes) para lograr soluciones factibles con el fin de predecir gasolinas de 91 octanos RON. La herramienta se diseñó con el propósito de predecir la formulación de combustibles que incluyan Etanol y MTBE en su composición, a fin de satisfacer una demanda dada del mercado local, tomando en cuenta la disponibilidad de componentes en la refinería y aplicando el modelo desarrollado para obtener las “recetas” factibles de acuerdo a los casos de estudio planteados. Para la realización de esto se empleó Microsoft Excel®, utilizando de éste el complemento *solver* para resolver sistemas de ecuaciones, la aplicación de macros y programación a través de Visual Basic para aplicaciones. Asimismo se

plantearon dos valores para volumen máximo disponible en cada uno de los tanques, con la finalidad de considerar casos críticos de exceso e insuficiencia de insumos en la refinería y mediante ello verificar la efectividad de la herramienta para aceptar o rechazar una receta propuesta en términos de producción. A continuación en la figura N° 3 se muestra el diagrama de flujo empleado para la programación de la herramienta computacional:

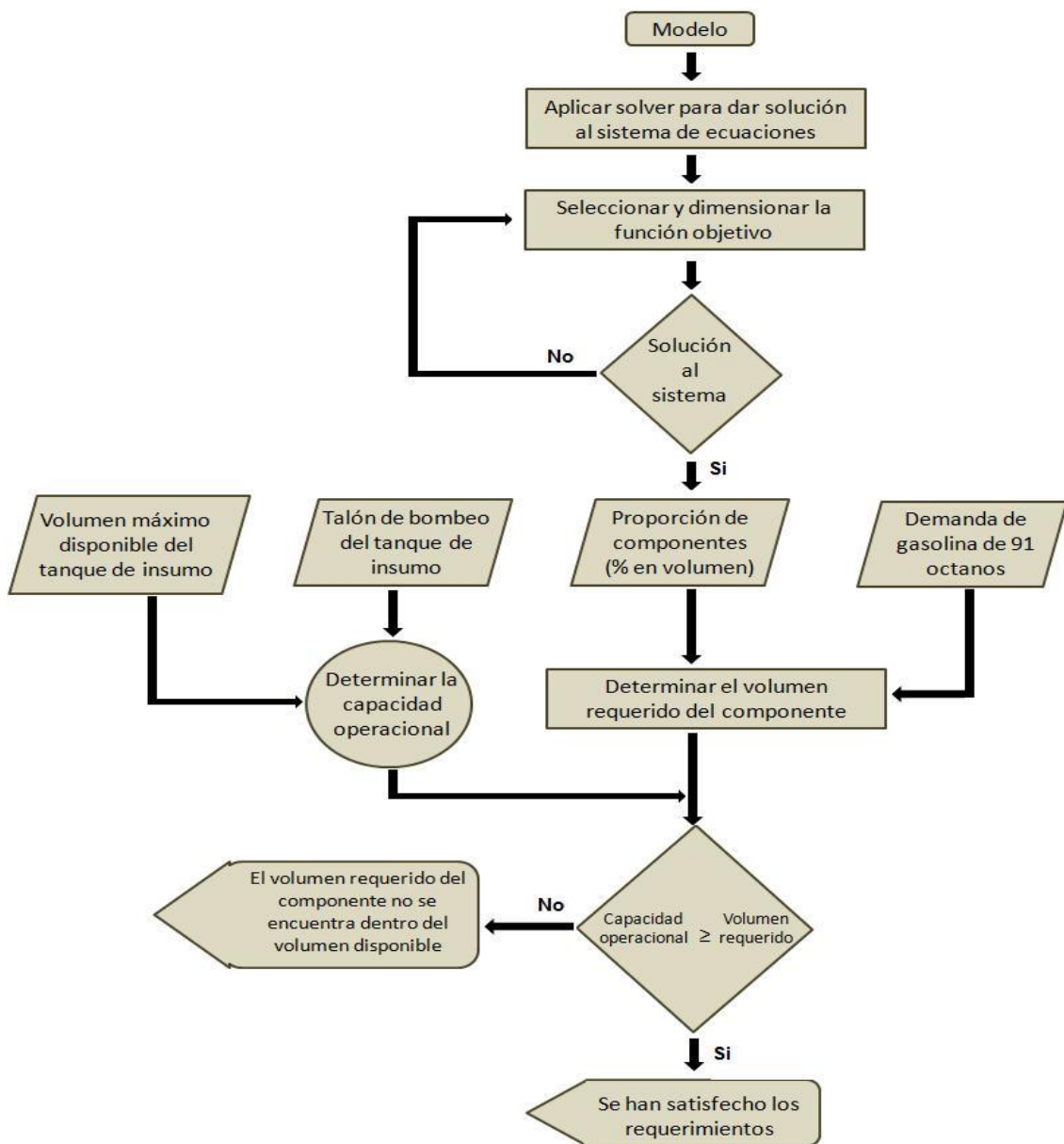


Figura N°2. Diagrama de la programación empleada en la herramienta

CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En esta sección se presentan cada uno de los resultados obtenidos, para el cumplimiento de los objetivos definidos al inicio del trabajo especial de grado.

IV.1 SELECCIÓN DEL DISEÑO DE EXPERIMENTO

Como variables independientes se tomaron los componentes empleados actualmente para la producción de gasolina de 91 octanos en una refinería: LVN (nafta virgen liviana), LKN (nafta de coquificación liviana), HCCN (nafta de craqueo catalítico pesada), alquilato, nafta tops (nafta de tope), TAME (ter-amil-metil-éter), MTBE (metil-terbutil-éter), etanol y butano.

Por su parte, en el caso de las variables dependientes, se seleccionaron los parámetros mostrados en la norma FONDONORMA NVF-764 “Gasolinas para motores de combustión interna” que poseen mayor relevancia en la estimación de calidad de gasolinas. En la tabla N°7, se muestran cada una de las variables dependientes del estudio.

Cabe resaltar, que los parámetros índice antidetonante (IAD), sensibilidad (SENS) e índice de bloqueo por vapor (IBV), a pesar de ser dependientes de otros parámetros como RON, MON y RVP, se consideraron como variables dependientes, con el propósito de obtener ecuaciones que modelen directamente su comportamiento y minimicen el error de la predicción.

Tomando en cuenta que en la teoría de diseño de experimentos, se presenta una variedad de diseños con características particulares para estudios de un tipo en específico, se tomó aquel que permitiese obtener la mayor cantidad de información con un mínimo de experimentos y que tomase en cuenta el tipo de factores establecidos, así como lo establecido previamente para la determinación de niveles. De acuerdo a las características del estudio, se seleccionó el diseño de tipo factorial,

puesto que el mismo considera todas las posibles combinaciones de los niveles de los factores en cada experiencia, basándose en la variación simultánea de un número limitado de niveles de los factores. Dentro de dicho diseño, se tiene un caso especial que es el diseño de mezclas, en donde los factores son los componentes de la mezcla y la respuesta es una función de la proporción de cada componente; el mismo se ajusta de forma adecuada a los requerimientos de este estudio, pues ambas condiciones se cumplen, teniéndose como factores cada uno de los componentes empleados en la refinería para la producción de gasolina de 91 octanos, y como respuesta una función que varía de acuerdo a los porcentajes en volumen que se emplean de dichos componentes.

Tabla N° 7. Variables dependientes

Variable dependiente	Nombre completo de la variable	Tipo de propiedad	Ecuación
RON	Número de octano de investigación	Antidetonante	-
MON	Número de octano motor	Antidetonante	-
IAD	Índice antidetonante	Antidetonante	$IAD = (RON + MON)/2$
Sensibilidad	Sensibilidad	Antidetonante	$SENS = RON - MON$
DVPE	Presión de vapor Reid	Evaporativa	-
PIE	Punto inicial de ebullición	Evaporativa	-
T10	Temperatura a 10% de destilado	Evaporativa	-
T50	Temperatura a 50% de destilado	Evaporativa	-
T90	Temperatura a 90% de destilado	Evaporativa	-
PFE	Punto final de ebullición	Evaporativa	-
E70	Porcentaje evaporado a 70°C.	Evaporativa	-
IBV	Índice de bloqueo por vapor	Evaporativa	$IBV = RVP + 0,13*(E70)$

Los factores establecidos para el diseño de experimento se corresponden a la cantidad de componentes empleados por la refinería para la elaboración de gasolinas; es decir nueve (9) factores.

Dado que para el diseño factorial se presentan dos tipos: el factorial a dos niveles y a tres niveles, fue necesario seleccionar aquel que permitiese obtener información más completa para el estudio. Se optó por el diseño factorial de tres niveles debido a la necesidad de tener un buen conocimiento sobre las interacciones de cada uno de los componentes, pues al añadirse un tercer nivel se permite modelar de forma más óptima la relación entre la respuesta y cada factor.

En la ecuación No 10, se muestra el número de mezclas requerido para un retículo de tres niveles factorial:

$$K = \frac{(m + q - 1)!}{m!(q - 1)} \quad (\text{Ec. 10})$$

Donde:

k = número de mezclas

m = nivel

q = componentes

$$K = \frac{(3 + 9 - 1)!}{3!(9 - 1)} = 165$$

Sin embargo, en un diseño factorial completo a tres niveles se presenta un inconveniente, y es que el mismo requiere de muchos experimentos, lo cual no es factible debido a la limitación de tiempo y recursos. Por lo tanto, se seleccionó el diseño factorial fraccionado (o incompleto), que para un diseño de nivel tres es conocido como *especial cúbico*, con el cual es posible realizar una simplificación de los experimentos y aún así determinar los efectos más importantes.

Una vez seleccionado el diseño de experimentos, se procedió a escoger cada uno de los niveles que constituirían el espacio muestral a evaluar en el laboratorio. Cabe

destacar que en el caso del butano, estudios previos indicaron que al combinarse éste componente en proporciones de $\frac{1}{2}$ y $\frac{1}{3}$ en una mezcla, no es factible la realización del análisis de presión de vapor, perfil de destilación y medición de octanajes, por considerarse como inestable dada la alta volatilidad que posee el mencionado componente. Sin embargo fue necesario establecer un diseño de experimentos que considerase de forma factible los múltiples sinergismos de mezcla que dicho componente presenta con los demás empleados por la refinería; se decidió por lo tanto seleccionar niveles de la matriz de experimentos que permitiesen agregar el butano en proporciones que diesen como resultado mezclas factibles de analizar en el laboratorio. Es importante señalar que la relevancia del butano en la formulación de gasolinas radica, en que el mismo contribuye al ajuste de la presión de vapor de la gasolina terminada, pues su volatilidad ayuda a que la relación aire/combustible sea la adecuada para el arranque, permitiendo un mejor encendido en frío para el automóvil.

Tabla N°8. Número de puntos exigidos en diseños reticulares

Número de componentes q	Tipo de retícula			
	Cuadrático nivel=2	Especial cúbico nivel=2	Cúbico nivel=3	Cuártico nivel=4
3	6	7	10	15
4	10	14	20	35
5	15	25	35	70
6	21	41	56	126
8	36	92	120	330

Dado que una de las principales características que debe poseer un diseño factorial fraccionado es que permita explorar el dominio experimental tan bien como sea posible, se acotó la superficie de soluciones, tomando los niveles mayores y menores de la matriz experimental: niveles 2,3 y 8. Asimismo, se agregó al espacio muestral el centroide nivel=9 a fin de contar con el mayor número de mezclas que permitiesen evaluar las interacciones con el butano. Al seleccionarse los dos niveles mayores de la matriz, se garantizó la formulación de mezclas que contendrían butano en proporciones mucho menores que en el nivel=2 y nivel=3, y que por lo mismo

permitirían la realización de los diversos ensayos requeridos para llevar a cabo el estudio. En la ecuación N° 11, se muestra el número de mezclas requerido para el diseño especial cúbico sin incluir el centroide:

$$k = \frac{q(q+1)}{2} + \frac{q(q-1)(q-2)}{6} \quad (\text{Ec.11})$$

Donde:

k : número de mezclas

q : componentes (9)

$$k = \frac{9(10)}{2} + \frac{9(8)(7)}{6} = 129$$

Para cada nivel se realizó el cálculo y la identificación del número de mezclas mediante la aplicación de la ecuación de la teoría combinatoria (Ec.12), y se consideraron como mezclas no factibles todas aquellas que tuviesen al butano en proporciones de $\frac{1}{2}$ y $\frac{1}{3}$.

$$C(n,k) = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (\text{Ec. 12})$$

Donde:

n : número total de factores

k : nivel

$C(n,k)$: número de experimentos para n factores a un nivel k .

Se obtuvo un total de 130 mezclas con 94 factibles y 36 no factibles. A las mismas se añadieron los 9 componentes puros, los cuales fueron analizados por igual dando un total de 139 mezclas correspondientes a la matriz experimental y 103 mezclas factibles.

La selección del diseño especial cúbico permitió prescindir de 36 experimentos que se incluían en el diseño cúbico, contribuyendo así a la reducción de muestras para trabajar, horas-hombre empleadas para la realización de análisis y recursos materiales

a utilizar, sin afectar la determinación de los sinergismos más importantes para el desarrollo de este estudio.

Tabla N° 9. Número de experimentos para 9 factores y niveles 2, 3, 8 y 9

Factor = 9		
Nivel	Número de experimentos	Experimentos factibles
2	36	28
3	84	56
8	9	9
9	1	1
Total	130	94

En el apéndice A, se muestra la matriz experimental final obtenida para el diseño especial cúbico seleccionado.

IV.2 PREPARACIÓN Y EVALUACIÓN DE LOS COMPONENTES Y LAS MEZCLAS

Una vez seleccionado el diseño de experimentos, se procedió a la preparación y evaluación de los componentes y mezclas involucrados en el plan de experimentación.

IV.2.1 Evaluación de Componentes

Establecidos cada uno de los componentes a emplear: LVN (nafta virgen liviana), LKN (nafta de coquificación liviana), HCCN (nafta de craqueo catalítico pesada), alquilato, nafta tops (nafta de tope), TAME (ter-amil-metil-éter), MTBE (metil-terbutil-éter), etanol y butano; se realizaron los análisis de: perfil de destilación, contenido de oxigenados, densidad, contenido de azufre, octanajes y período de inducción a fin de obtener la caracterización fisicoquímica requerida de cada uno de dichos componentes.

Cabe destacar que los valores de octanaje RON y MON, destilación y presión de vapor del butano fueron proporcionados por la Gerencia Técnica de Calidad de Productos.

En la tabla N° 10 se muestra la caracterización de cada uno de los componentes seleccionados de la refinería para la realización de este Trabajo Especial de Grado.

Propiedades antidetonantes

Con respecto a las propiedades antidetonantes, Se puede denotar de lo observado en dicha tabla, que los valores de octanaje RON de los componentes LVN y Nafta Tops son considerablemente bajos, 70 y 66 octanos respectivamente, con respecto a un índice de 91 octanos de una gasolina terminada. Esto es lógico si se observa el contenido de hidrocarburos en cada uno de ellos; ambos poseen alto contenidos de parafinas lineales y bajo contenido de aromáticos.

Las parafinas lineales tienden a detonar fácilmente por incremento de presión debido a su estructura química, sin embargo las iso-parafinas o parafinas ramificadas no lo hacen pues son más estables que las primeras. Igualmente, en el caso de los aromáticos, su estructura cíclica y de dobles enlaces permite que la molécula sea más resistente a una detonación al efectuarse incremento de presión y temperatura sobre la misma; sin embargo, estos últimos hidrocarburos poseen restricciones ambientales que limitan su uso en las gasolinas debido a su carácter cancerígeno. En el caso del LVN y la nafta tops, los valores de parafinas lineales y de aromáticos registrados, conllevan a una peor capacidad antidetonante bajo efectos de presión y temperatura, es decir menores valores de octanaje.

Con respecto a esto, se puede observar en la tabla N° 10 que el LKN y el HCCN poseen bajos porcentajes de parafinas lineales y a su vez alto contenido de aromáticos, lo cual trae como consecuencia un incremento en el número de octanos RON en relación a los registrados por el LVN y la Nafta Tops.

Tabla N° 10. Caracterización de los componentes de la refinería

PROPIEDADES	LVN	LKN	HCCN	Alquilato	MTBE	TAME	Nafta Tops	Butano	Etanol
Parafinas (%V)	37.74	9.33	4.85	0.93	0.56	2.82	31.64	100.00	0.24
Iso-Parafinas (%V)	44.01	29.15	21.63	84.96	1.49	27.10	41.59	0.00	0.47
Olefinas (%V)	0.92	22.60	18.78	3.45	0.53	17.07	2.43	0.00	0.00
Naftenos (%V)	14.92	12.07	13.34	1.77	0.50	3.39	19.35	0.00	0.25
Aromáticos (%V)	2.30	25.92	38.50	6.35	0.07	2.21	4.96	0.00	0.15
Benceno (%V)	1.02	0.59	0.38	0.20	0.03	0.80	1.99	0.00	0.01
Olefinas + Aromáticos (%V)	3.22	48.52	57.28	9.80	0.60	19.28	7.38	0.00	0.15
Oxigenados (%P)	0.00	0.00	0.00	0.00	97.13	49.05	0.00	0.00	98.98
Oxigenados (%V)	0.00	0.00	0.00	0.00	98.85	47.37	0.00	0.00	98.89
MTBE (%P)	0.00	0.00	0.00	0.00	96.84	4.34	0.00	0.00	0.00
TAME (%P)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	44.71	0.00	0.00	0.00
Oxígeno (%P)	0.0	0.0	0.0	0.0	17.6	7.8	0.0	0.0	31.6
Presión de vapor (psi)	13.3	11.7	6.4	3.7	8.0	4.6	9.6	71.9	2.2
Azufre (ppm)	37.7	1010.0	679.0	25.8	7.2	72.0	15.9	0.0	0.0
<i>Destilación, (°C)</i>	-	-	-	-	-	-	-	-	-
P.I.E	36.7	37.1	40.5	49.6	52.0	59.2	37.7	-	76.8
10%	45.4	43.2	54.9	82.4	53.4	69.6	47.4	32.7	78.0
50%	56.9	49.6	116.1	103.3	54.6	76.8	66.4	37.8	78.4
90%	87.7	67.1	189.0	161.2	55.8	95.4	93.9	38.9	78.4
P.F.E	113.8	86.7	220.3	216.9	75.7	159.1	126.9	38.9	86.5
Evap a 70°C (%V)	72.6	93.6	17	3.9	96.3	11.3	57.2	-	0
Residuo (%V)	0.8	0.6	0.9	1.1	0.6	1.1	0.6	-	0
Índice de Bloqueo de Vapor	22.7	23.9	8.6	4.2	20.5	6.1	17.0	-	2.2
RON	70.0	88.2	89.4	89.9	102.4	99.6	66.0	97.3	100.8
MON	69.5	78.8	80.0	88.7	99.5	88.4	66.0	91.1	95.8
IAD	69.8	83.5	84.7	89.3	101.0	94.0	66.0	94.2	98.3
Sensibilidad	0.5	9.4	9.4	1.2	2.9	11.2	0.0	6.2	5.0
Periodo de Inducción (min)	>240	65	>240	>240	>240	105	>240	-	>240
Densidad a 15°C (g/cm3)	0.671	0.667	0.759	0.705	0.745	0.735	0.685	-	0.795
Densidad a 20°C (g/cm3)	0.666	0.662	0.754	0.701	0.740	0.731	0.679	0.621	0.790
<i>Oxigenados</i>	-	-	-	-	-	-	-	-	-
MTBE (%P)	0.06	0.00	0.00	0.00	101.79	3.38	0.00	0.00	0.00
TAME (%P)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.16	94.67	0.00	0.00	0.00
ETANOL (%P)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	90.85

Tabla N° 11. Requisitos para gasolina de 91 octanos norma NVF-764 “Gasolinas para motores de combustión interna”

Restricciones para gasolina de 91 octanos		
Propiedad	Mínimo	Máximo
Contenido de azufre (%P)	-	0.10
Destilación	-	-
Punto inicial (°C)	30	-
10% volumen evaporado (°C)	-	70
50% volumen evaporado (°C)	77	121
90% volumen evaporado (°C)	-	195
Punto final (°C)	-	225
Residuo de destilación (%V)	-	2
Benceno (%V)	-	1.2
Aromáticos (%V)	-	35
Olefinas + Aromáticos (%V)	-	45
Oxígeno* (%P)	-	3.7
Presión de vapor (psi)	-	9.5
Índice de bloqueo de vapor (IBV)	-	14.5
Número de octanos RON	91	-
Número de octanos IAD	87	-
Nota:		
<i>*Oxígeno: En el caso de gasolina formulada con éteres el contenido máximo de oxígeno es de 2,7%p. En el caso de alcoholes el contenido máximo de oxígeno es 3,7%p.</i>		

Por otra parte, se tienen tres componentes oxigenados en el “pool” de la refinería; un alcohol: etanol, y dos éteres: MTBE y TAME. Los mismos son componentes empleados en la actualidad con el fin de mejorar el índice de octano de una gasolina, pues la alta presencia de oxígeno en cada una de dichas moléculas, como se puede corroborar en el porcentaje de oxigenados de la tabla N° 10, contribuye a llevarse a cabo una combustión más completa en la cámara, lo cual conlleva a mayores índices de octanaje RON señalados igualmente en la tabla de caracterización.

Propiedades Evaporativas

Con respecto a las propiedades evaporativas, se tiene que para el caso de presión de vapor, los componentes etanol y butano destacan por poseer los valores más bajo y alto respectivamente. Ambas situaciones son completamente lógicas debido a las estructuras químicas que ambos componentes presentan. En el caso del etanol, la

presencia de un grupo hidroxilo conlleva a un enlace del tipo puente de hidrógeno, lo cual incrementa la fuerza de atracción intermolecular de la misma; destacando que el análisis de presión de vapor se realizó a una temperatura de 37,8 °C (100°F) en cada uno de los componentes del “pool” seleccionados, para el etanol se requiere de mayor energía calórica que la disponible para volatilizar las moléculas correspondientes, lo cual se traduce en un valor de presión de vapor mucho menor con respecto a los demás hidrocarburos estudiados. Por su parte, el butano es una parafina lineal que presenta en su haber cuatro átomos de carbono, lo cual la hace una molécula de bajo peso molecular y que por lo tanto requiere de poca energía calórica para su volatilización, dada la linealidad de su estructura química que disminuye la fuerza de atracción molecular.

Por su parte, los éteres MTBE y TAME presentan valores de presión relativamente altos debido a que son compuestos volátiles. En el caso del LKN, LVN y la nafta tops tales componentes muestran valores altos de presión de vapor; dicha situación responde a que los tres componentes son obtenidos a partir de fracciones de tope de unidades de la refinería, implicando un incremento considerable en su volatilidad dada la presencia de hidrocarburos de cadenas cortas y que por tanto poseen valores bajos de peso molecular.

Continuando con las propiedades evaporativas, se tienen los perfiles de destilación de cada uno de los componentes del “pool” de gasolinas. Se puede decir que los valores presentados en cada uno de dichos perfiles se mantienen de forma general dentro de las restricciones establecidas. Sin embargo, en el caso de la temperatura a un 50% de evaporado (T50), se pudo notar que el LVN, LKN, MTBE, TAME, nafta tops y butano presentaban valores inferiores a los 77°C. Ésta situación se presenta debido a que cada uno de esos componentes requiere de menor temperatura para llevar a cabo el cambio de fase líquido-vapor. La importancia de la determinación del perfil de destilación radica, en que la misma es característica de cada hidrocarburo e indica la volatilidad del mismo, relacionándose con el arranque, el calentamiento y la

tendencia de bloqueo de vapor a condiciones de altas temperaturas o de elevada altitud en el motor del vehículo.

Por otra parte, el índice de bloqueo de vapor (IBV) del LVN, LKN, MTBE y la nafta tops muestran valores superiores a los 14,5. Tomando en cuenta que el IBV se obtiene a partir de una relación matemática entre la presión de vapor y el porcentaje de volumen evaporado a 70 °C (E70), se puede denotar la relación que dicho parámetro presenta en cada componente, pues en los casos en que los valores de E70 y la presión de vapor dieron mayores, son los mismos en los que índice de bloqueo por vapor supera los 14,5 psi. La importancia de mantener bajo el IBV se halla en que dicho valor es un indicativo del límite en el cual se corre el riesgo de que el vapor de gasolina llegue a los inyectores, provocando problemas de encendido en el vehículo

Contenido de Azufre

En el caso del contenido de azufre, la nafta de coquificación liviana (LKN) presentó un valor notablemente alto con respecto a los demás integrantes del “pool” de gasolinas, al igual que el HCCN. Dicha situación pudo ser consecuencia de que ambos componentes provienen de fracciones pesadas de petróleo dentro del proceso de refinación, las cuales poseen por lo general altos valores de azufre y que requieren como tal de un proceso de hidrosulfuración posterior, a fin de retirar tal impureza. La presencia de azufre en el combustible debe ser regulada, pues el mismo se convierte en óxidos de azufre en los gases de escape, el cual envenena temporalmente el catalizador de los vehículos y su vez aumenta las emisiones al ambiente de CO, NOx, dióxido de azufre y otros gases tóxicos.

Período de inducción

Finalmente, en el caso del análisis del período de inducción se pudo notar que el LKN y el TAME presentaron valores por debajo de 240 minutos. Esto indica que ambos componentes se oxidan más rápidamente respecto a los demás, siendo esto una situación que debe tomarse en cuenta al momento de la formulación de gasolinas,

pues se debe evitar producir una gasolina que se oxide de forma acelerada durante el proceso de almacenamiento y traslado, trayendo como consecuencia una alteración en las propiedades físico-químicas de la misma.

IV.2.2 Evaluación de las mezclas

Posterior a la fase de caracterización de componentes se procedió a la formulación de cada una de las mezclas contempladas en la matriz de experimentos planteada. En el apéndice B se muestra la masa en gramos de los componentes, requerido para cada mezcla.

En el apéndice C se muestran los resultados obtenidos en los ensayos de perfil de destilación, presión de vapor y octanajes RON y MON para cada una de las mezclas que conformaron la matriz de experimentos, así como los valores de índice de bloqueo de vapor (IBV), sensibilidad e índice antidetonante (IAD) determinados a partir de dichos resultados.

Propiedades antidetonantes

Al observar los resultados de octanajes RON y MON obtenidos de los laboratorios CFR de la Gerencia Técnica de Calidad de Productos realizados a cada una de las 94 mezclas formuladas, se pudo notar que los valores más bajos (menores a 70) se obtuvieron en las mezclas binarias y ternarias conformadas por al menos uno de los siguientes componentes: LVN, LKN ó nafta tops, lo cual está acorde a lo observado en los resultados de la tabla de caracterización, pues dichos componentes poseen los menores valores de número de octanos RON y MON. Dicha situación se pudo corroborar en las mezclas del nivel 8 destacan las número 128 y 129 que no poseen en su formulación LKN y LVN respectivamente y que contaron con los valores más altos de octanaje.

En el caso de las mezclas de mayor valor de octanaje RON y MON, resalta la presencia de al menos algún oxigenado en cada una de las mismas. De las 94 mezclas formuladas, 22 presentaron octanajes superiores a 100 en número de octanos RON, y

de estas últimas 19 contaron con la presencia de etanol. Asimismo, en las mezclas de 8 componentes, destaca la número 121 en donde no se cuenta con dicho componente y se obtuvo como resultado el menor octanaje de las nueve mezclas integrantes de ese nivel de experimentación. Dicha situación reitera la alta capacidad antidetonante de este componente y su condición de aditivo oxigenante ideal para la formulación de gasolinas de 91 octanos.

Propiedades evaporativas

En el caso del punto inicial de ebullición (PIE), los valores de las matrices de 8 y 9 componentes indican la presencia de gran cantidad de volátiles, cuyas interacciones conllevaron a un requerimiento menor de energía para lograr el evaporamiento de la primera gota de mezcla. Únicamente en las mezclas que no contaron con etanol (121), butano (122) y nafta tops (123) se lograron valores de ebullición inicial que cumplieron con la norma.

Asimismo, para el parámetro de temperatura a un 10% de evaporado (T10), se observaron tres valores que sobrepasaron los de 70°C establecido. En cada una de esas mezclas se contó con la presencia de alquilato combinado con HCCN, TAME o ambas. Dichos componentes presentaron junto al etanol los valores más altos de T10 con respecto a los demás integrantes del “pool”, sin embargo sólo el alquilato superó los 70 °C. Ésta situación señala que la interacción del alquilato con HCCN y TAME conlleva a altos valores de temperatura a un 10% de evaporado.

Con respecto a los valores de T50 (Temperatura a 50% de evaporado), destaca que la mayoría de las mezclas formuladas no cumplieron con el requerimiento establecido para este parámetro al momento de la destilación (de 77°C a 121 °C). Tal tendencia presenta lógica, si se toma en cuenta que la mayoría de los componentes empleados en la refinería para el “pool” de gasolinas presentaron valores notablemente bajos de T50 en su caracterización. Lo obtenido indica que, los sinergismos de mezcla entre los componentes seleccionados tienden generalmente a temperaturas inferiores a un 50% de evaporado en el proceso de destilación.

Con respecto a la presión de vapor (RVP) obtenida en cada una de las mezclas formuladas, se pudo presenciar que todas aquellas que presentaron al menos dos de los siguientes componentes en su conformación: LVN, LKN y nafta tops, obtuvieron valores de RVP mayores a los 9,5 psi; lo obtenido es lógico si se toma en cuenta que los tres componentes ya mencionados presentaron los mayores valores de presión de vapor en el proceso de caracterización. Sin embargo, en los casos de 8 y 9 componentes, los cuales presentan un comportamiento más similar a una gasolina terminada, se pudo notar un incremento substancial del RVP llegando a valores de 14 y 15 psi, indicando así una muy alta volatilidad consecuencia de la presencia de butano en su conformación; lo señalado pudo verificarse con la mezcla 122, la cual se conformó por 8 componentes sin incluir butano y su presión de vapor se mantuvo inferior a 9,5 psi. Tal situación indica que la presencia de butano en proporciones superiores a un 10% conlleva a un incremento contraproducente en la volatilidad de una mezcla de gasolina.

IV.3 DESARROLLO DEL MODELO MATEMÁTICO CON BASE EN EL ANÁLISIS MULTIVARIABLE

Una vez obtenidos los resultados de los ensayos aplicados a cada una de las 94 mezclas formuladas, y posterior al ingreso de los mismos en el programa estadístico Statgraphics Centurion XV®, se obtuvo cada una de las ecuaciones de predicción, Y_i (variable dependiente) en función de X_i (variable independiente).

A continuación se muestran cada una de las ecuaciones de regresión lineal obtenidas para cada uno de los parámetros de octanaje:

Número de Octanos de Investigación (RON):

$$\begin{aligned} \text{RON [OCTANOS]} = & 7014.14 - 69.3848*\text{LVN}[\%] - 69.3117*\text{LKN}[\%] \\ & 69.2687*\text{HCCN}[\%] - 69.2289*\text{ALQUILATO}[\%] - 69.002*\text{MTBE}[\%] \\ & 69.1996*\text{TAME}[\%] - 69.4184*\text{NAFTA TOPS}[\%] - 68.8886*\text{BUTANO}[\%] - \\ & 68.9335*\text{ETANOL} [\%] \end{aligned} \quad (\text{Ec. 11})$$

Número de Octanos Motor (MON):

$$\text{MON [OCTANOS]} = 1475.88 - 13.9961*\text{LVN}[\%] - 14.007*\text{LKN}[\%] - 13.9614*\text{HCCN}[\%] - 13.8629*\text{ALQUILATO}[\%] - 13.7588*\text{MTBE}[\%] - 13.8928*\text{TAME}[\%] - 14.044*\text{NAFTA TOPS}[\%] - 13.787*\text{BUTANO} [\%] - 13.7882*\text{ETANOL}[\%]$$

Índice Antidetonante (IAD):

$$\text{IAD} = 4698.35 - 46.2295*\text{LVN}[\%] - 46.1944*\text{LKN}[\%] - 46.1497*\text{HCCN}[\%] - 46.0745*\text{ALQUILATO}[\%] - 45.9017*\text{MTBE}[\%] - 46.0784*\text{TAME}[\%] - 46.2732*\text{NAFTA TOPS}[\%] - 45.8698*\text{BUTANO}[\%] - 45.8896*\text{ETANOL}[\%]$$

(Ec. 12)

Sensibilidad:

$$\text{SENSIBILIDAD} = 5.41398 - 0.0498615*\text{LVN}[\%] + 0.0360688*\text{LKN}[\%] + 0.0330012*\text{HCCN}[\%] - 0.0211778*\text{ALQUILATO}[\%] + 0.0771765*\text{MTBE}[\%] + 0.0220112*\text{TAME}[\%] - 0.0495095*\text{NAFTA TOPS}[\%] + 0.209557*\text{BUTANO}[\%] + 0.158379*\text{ETANOL}[\%]$$

(Ec. 13)

Tabla N° 12. Valor de parámetros estadísticos de cada una de las propiedades antidetonantes

Propiedad	Variable Dependiente	R^2	R^2 ajustado	Error estándar del estimado	Error absoluto medio	Valor P
Antidetonante	RON	92,2898	91,4001	2,38836	1,66457	0,0000
	MON	90,6530	89,5882	1,71513	1,23552	0,0000
	IAD	93,3068	92,5037	1,80009	1,25833	0,0000
	Sensibilidad	89,5269	88,2866	1,21133	0,90984	0,0000

De acuerdo a lo expresado en la tabla N° 12, referida a los parámetros estadísticos de las propiedades antidetonantes, se puede notar que en cada una de las 4 variables modeladas tanto el coeficiente de determinación (R^2) como el ajustado son mayores a 85. Tal situación es consecuencia de la eliminación en cada variable de las observaciones con residuos estudentizados en valor absoluto mayores a 3 ó 2 dependiendo el caso, pues los mismos afectaban de forma negativa el modelo. Aquellos estudentizados por encima de 3 se consideran por el programa Statgraphics® como valores aberrantes que deben tener un tratamiento por separado; sin embargo, los valores superiores a 2 que fueron retirados en este caso, son aquellos

señalados por el programa por poseer residuos muy cercanos a límites problemáticos. Dichas observaciones eliminadas del programa, se muestran el apéndice D, las mismas contribuyeron a aumentar la explicabilidad de cada variable dependiente a partir de las variables independientes.

Con respecto al error estándar del estimado, se denota que en todos los casos el valor supera la unidad, siendo mayor en los octanajes y disminuyendo para el IAD y la sensibilidad. Dado que el error estándar del estimado se da en la unidad de medida en que está la variable dependiente Y, se puede decir entonces, que los octanajes RON y MON presentan una desviación aproximada de 2,39 y 1,72 octanos respectivamente en relación a lo esperado por el modelo lineal, lo cual debe tomarse en cuenta dada la importancia que el octanaje posee para la formulación de una gasolina terminada.

Con respecto al valor-p, se observa que en cada una de las cuatro variables mostradas el mismo fue igual a cero. Tal resultado indica que se rechaza la hipótesis nula establecida por el programa estadístico, la cual plantea que no existe una relación estadísticamente significativa entre la variable dependiente e independientes con un nivel de confianza de 95%, lo cual conlleva a determinar que sí existe dicha relación entre las variables para las propiedades antidetonantes.

A continuación se muestran cada una de las ecuaciones de regresión lineal obtenidas para cada una de las propiedades evaporativas.

Presión de Vapor (RVP):

$$\begin{aligned} \text{RVP [psi]} = & 1579.91 - 15.6767*\text{LVN}[\%] - 15.6766*\text{LKN}[\%] - \\ & 15.7387*\text{HCCN}[\%] - 15.7605*\text{ALQUILATO}[\%] - 15.718*\text{MTBE}[\%] - \\ & 15.7543*\text{TAME}[\%] - 15.7007*\text{NAFTA TOPS}[\%] - 15.1734*\text{BUTANO}[\%] - \\ & 15.7213*\text{ETANOL}[\%] \end{aligned} \quad (\text{Ec. 14})$$

Punto inicial de ebullición (P.I.E):

$$\begin{aligned} \text{P.I.E}[\text{°C}] = & -12965.5 + 129.987*\text{LVN}[\%] + 129.984*\text{LKN}[\%] + \\ & 130.067*\text{HCCN}[\%] + 130.155*\text{ALQUILATO}[\%] + 130.172*\text{MTBE}[\%] + \\ & 130.221*\text{TAME}[\%] + 130.025*\text{NAFTA TOPS}[\%] + 128.918*\text{BUTANO}[\%] + \\ & 130.157*\text{ETANOL}[\%] \end{aligned} \quad (\text{Ec. 15})$$

Temperatura a 10% de evaporado (T10):

$$\begin{aligned}
 T10 \text{ [}^\circ\text{C]} = & -17111.0 + 171.54*LVN[\%] + 171.502*LKN[\%] + \\
 & 171.739*HCCN[\%] + 171.837*ALQUILATO[\%] + 171.643*MTBE[\%] + \\
 & 171.812*TAME[\%] + 171.611*NAFTA \text{ TOPS}[\%] + 170.341*BUTANO[\%] + \\
 & 171.674*ETANOL[\%]
 \end{aligned}
 \tag{Ec. 16}$$

Temperatura a 50% de evaporado (T50):

$$\begin{aligned}
 T50 \text{ [}^\circ\text{C]} = & 65.699 - 0.0727987*LVN[\%] - 0.160824*LKN[\%] + \\
 & 0.263914*HCCN[\%] + 0.328299*ALQUILATO[\%] - 0.161234*MTBE[\%] + \\
 & 0.128052*TAME[\%] + 0.018279*NAFTA \text{ TOPS}[\%] - \\
 & 0.310792*BUTANO[\%] - 0.0722322*ETANOL[\%]
 \end{aligned}
 \tag{Ec. 17}$$

Temperatura a 90% de evaporado (T90):

$$\begin{aligned}
 T90 \text{ [}^\circ\text{C]} = & 99.6178 - 0.120727*LVN[\%] - 0.241752*LKN[\%] + \\
 & 1.67147*HCCN[\%] + 0.599909*ALQUILATO[\%] - 0.282665*MTBE[\%] - \\
 & 0.0591003*TAME[\%] - 0.082318*NAFTA \text{ TOPS}[\%] - \\
 & 0.531429*BUTANO[\%] - 0.294347*ETANOL[\%]
 \end{aligned}
 \tag{Ec. 18}$$

Punto final de ebullición (P.F.E):

$$\begin{aligned}
 PFE \text{ [}^\circ\text{C]} = & 144.559 - 0.236634*LVN[\%] - 0.393086*LKN[\%] + \\
 & 1.9261*HCCN[\%] + 1.65145*ALQUILATO[\%] - 0.417951*MTBE[\%] + \\
 & 0.0116236*TAME[\%] - 0.189282*NAFTA \text{ TOPS}[\%] + 2.4932*BUTANO[\%] \\
 & - 0.631425*ETANOL[\%]
 \end{aligned}
 \tag{Ec. 19}$$

% Evaporado a 70 °C (E70):

$$\begin{aligned}
 E70 \text{ [}^\circ\text{C]} = & 38494.6 - 384.233*LVN[\%] - 384.042*LKN[\%] - \\
 & 384.869*HCCN[\%] - 384.992*ALQUILATO[\%] - 383.944*MTBE[\%] - \\
 & 384.705*TAME[\%] - 384.374*NAFTA \text{ TOPS}[\%] - 382.356*BUTANO[\%] - \\
 & 384.41*ETANOL[\%]
 \end{aligned}
 \tag{Ec. 20}$$

Índice de Bloqueo por Vapor (I.B.V):

$$\begin{aligned}
 I.B.V = & 20.602 + 0.012813*LVN[\%] + 0.03519*LKN[\%] - \\
 & 0.13186*HCCN[\%] - 0.16564*ALQUILATO[\%] + 0.00963239*MTBE[\%] -
 \end{aligned}
 \tag{Ec. 21}$$

CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

$$0.126306*\text{TAME}[\%] - 0.0297085*\text{NAFTA} \quad \text{TOPS}[\%] + 0.731331*\text{BUTANO}[\%] - 0.0513111*\text{ETANOL}[\%]$$

Tabla N° 13. Valor de parámetros estadísticos de cada una de las propiedades evaporativas

Propiedad	Variable Dependiente	R^2	R^2 ajustado	Error estándar del estimado	Error absoluto medio	Valor P
Evaporativa	RVP	96,8490	96,5193	0,46033	0,33348	0,0000
	P I E	88,6238	87,4603	2,39488	1,78231	0,0000
	T10	92,7774	92,0216	2,22484	1,69184	0,0000
	T50	90,7208	89,7609	3,38598	2,41879	0,0000
	T90	95,5982	95,1481	7,43108	5,19357	0,0000
	P F E	86,6121	85,2583	19,52610	14,79500	0,0000
	E70	95,0537	94,5360	5,26859	3,79407	0,0000
IBV	96,8796	96,5530	0,91118	0,62474	0,0000	

De acuerdo a lo mostrado en la tabla N° 13, se denota que en relación al coeficiente de terminación (R^2), todas las variables con excepción del punto inicial de ebullición (P.I.E) y del punto final de ebullición (P.F.E) poseen valores por encima del 90%; lo cual indica que en esos dos casos es menor el porcentaje de variabilidad explicada por la recta de regresión. Igualmente, en el caso del coeficiente ajustado (R^2 ajustado), se denota un comportamiento similar al de R^2 , puesto que el anterior es una corrección de éste último dada la amplitud de la muestra. Cabe destacar que, al igual que con las propiedades antidetonantes, aquí se eliminaron las observaciones con residuos estudentizados mayores a 3 ó 2 bien sea el caso, en valor absoluto debido a su influencia negativa en el modelo, contribuyendo así a incrementar el efecto de las variables independientes sobre la variable dependiente.

Con respecto al error estándar del estimado, se tienen que el PFE y la temperatura a un 90% de evaporado (T90) poseen una desviación estándar de residuos de aproximadamente 20 °C y de 7°C, respectivamente, lo cual indica que la precisión de la ecuación de regresión en ambos casos no es tan acertada con respecto a las de las otras variables, específicamente presión de vapor (RVP) e índice de bloqueo por vapor (IBV), quienes presentaron errores cercanos a 0, señalando así que la diferencia entre lo observado y lo estimado por el modelo es pequeña. Tal situación

con las nombradas variables es debido a que las mismas representan las temperaturas finales del proceso de destilación, etapa en la cual los componentes más pesados que residen en el balón terminan por pasar a la fase de vapor. Cabe destacar que dada la variedad de mezclas planteadas en la matriz experimental, en donde se combinaron componentes de mayor volatilidad que otros, se obtuvo una serie de valores diversos como T90 y PFE, lo cual conllevó a una desviación de residuos mucho mayor con respecto a otras propiedades evaporativas.

Finalmente, al observar los valores p de cada una de las propiedades evaporativas, se observa que los mismos dieron cero en cada caso, contrastando así la hipótesis nula establecida y afirmando que sí hay una relación estadísticamente significativa entre las variables independientes y cada una de las variables dependientes con un nivel de confianza de 95%.

En el Apéndice D se señalan las mezclas eliminadas en cada variable dependiente por considerarse que poseían valores atípicos que afectaban la efectividad del modelo.

IV.3.1 Validación

Una vez determinadas las ecuaciones de regresión lineal e ingresadas al programa computacional Excel®, se seleccionaron las recetas mostradas en el apéndice E. Posteriormente, se procedió a realizar los ensayos de medición de octanajes RON y MON, destilación y presión de vapor a dichas recetas, obteniendo los resultados mostrados en la tabla N° 14.

De acuerdo a lo obtenido por el método de ensayo ASTM D 2699 y ASTM D 2700 para octanajes RON y MON respectivamente, se procedió a realizar una comparación de los mismos con respecto a lo predicho por el modelo en las recetas seleccionadas. Las magnitudes de los resultados alcanzados experimentalmente y su desviación con respecto a lo estimado por el modelo lineal se muestra en el Apéndice F del presente trabajo.

CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Tabla N° 14. Resultados de gasolinas formuladas de 91 octanos

Método, Norma	Gasolina de 91 octanos (G-91)					
	Caso I a	Caso I b	Caso II a	Caso II b	Caso III a	Caso III b
Destilacion ASTM D86-07a	-	-	-	-	-	-
Punto Inicial	40,9	39,6	40,2	39,4	41,3	40,9
10% Volumen evaporado	50,2	52,3	53,1	52,6	57,1	57,2
50% Volumen evaporado	79,9	81,0	83,1	67,6	80,8	81,2
90% Volumen evaporado	165,7	162,2	166,4	166,4	163,7	163,0
Punto Final	215,1	213,9	216,4	213,6	214,1	215,4
Residuo de destilacion, %V	0,8	0,8	0,8	0,8	0,9	0,9
Porcentaje evaporado a 70°C	45,5	44,6	44,4	52,0	34,6	34,8
Presion de vapor, psi/ ASTM D5191-06e1	8,15	8,35	8,15	8,20	7,18	7,21
I.B.V (Indice de Bloqueo por Vapor)	14,1	14,1	13,9	15,0	11,7	11,7
RON, Adm/ ASTM D2699-07	90,1	88,5	89,3	88,8	88,7	88,0
MON, Adm/ASTM D2700-7a	81,1	80,5	81,2	80,6	80,8	81,2
Sensibilidad	9,0	8,0	8,1	8,2	7,9	6,8
IAD	85,6	84,5	85,3	84,7	84,8	84,6

- Número de octano de investigación (RON)

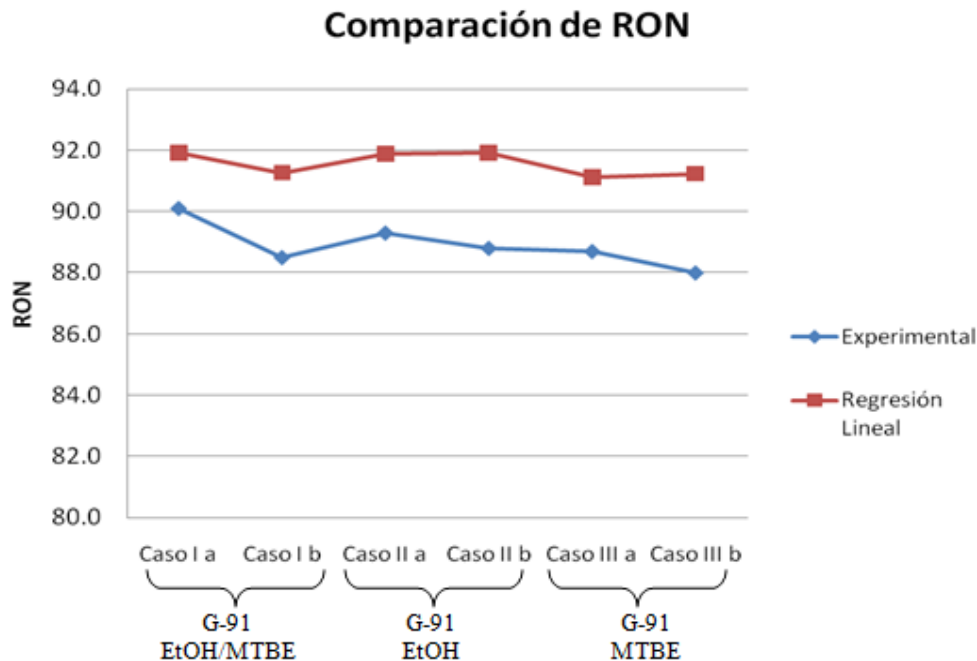


Figura N° 3. Octanaje RON experimental y por regresión lineal

De acuerdo a lo observado en la figura N° 3, se denota una tendencia similar de los valores de octanaje RON obtenidos por el modelo con respecto a los resultados experimentales, destacando máximos en los casos I a y II b, y valores mínimos en los casos I b y III b para ambas situaciones. Sin embargo, cabe destacar que para el caso I a (G-91 con etanol y MTBE) y el III b (G-91 con MTBE) se presentó el menor y mayor residuo respectivamente; Dado que el primero no contaba con un hidrocarburo en su formulación, butano, el cual es un componente de alta volatilidad y por tanto inestable para ensayos evaporativos, es posible decir que la ausencia del mismo en la mezcla planteada contribuyó a un valor más desviado de octanaje RON con respecto al estimado por el modelo de regresión lineal y que por lo mismo, el sinergismo que éste presenta con los demás componentes no es favorable en términos de número octano de investigación.

Sin embargo, una receta que no cuente con butano en su formulación no es del todo beneficioso en términos de motor, puesto que éste componente es importante para la estabilización del proceso de encendido y arranque en frío, asociado al octanaje RON.

En el caso de la mezcla III b, no se contó con la presencia de etanol, LKN y butano. Tales ausencias, en especial del etanol y butano, conllevó a una desviación mayor del resultado experimental con respecto a lo esperado, pues el primero es un componente oxigenado que posee un octanaje superior a 100 octanos según la tabla N°10 de caracterización, y el butano, a pesar de ser inestable en términos de volatilidad, posee un número de octanos RON superior a los 95 octanos.

- **Número de octano motor (MON)**

De acuerdo a lo mostrado en la figura N°4 referido al octanaje MON, es posible señalar que entre la predicción del modelo regresión lineal y lo obtenido mediante los ensayos de laboratorio, se presentaron residuos pequeños en ciertos casos lo cual conllevó a mantenerse una tendencia similar en tales puntos. Dichos casos fueron el I a y el II a y II b (gasolina con etanol), donde para el primero no se contó con la

presencia de butano, en el segundo de MTBE y para el último de MTBE, TAME y butano.

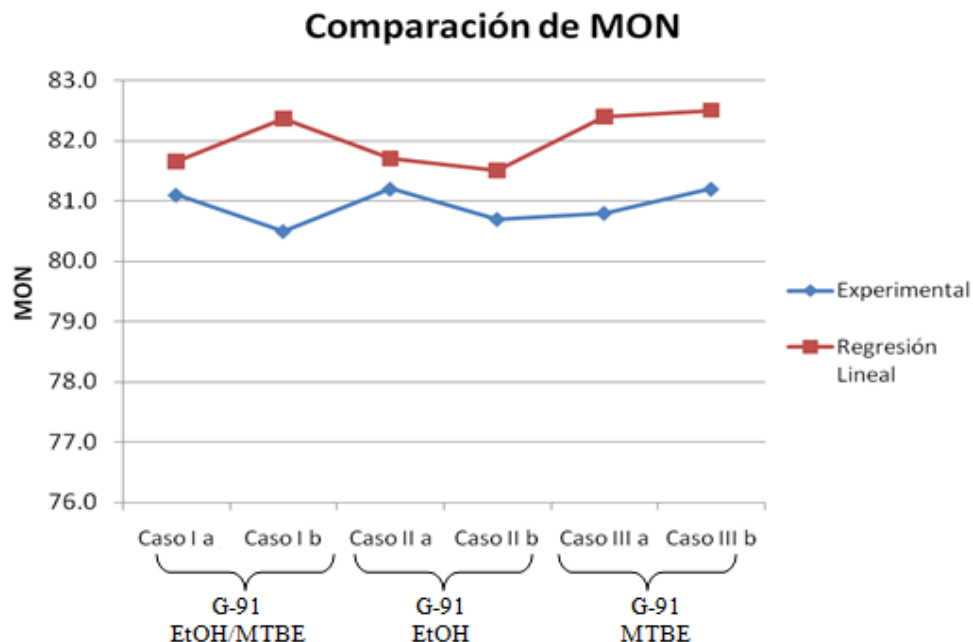


Figura N° 4. Octanaje MON experimental y por regresión lineal

La cercanía que ambas estimaciones, tanto experimental como por regresión lineal, presentado en el caso I a, corrobora lo nombrado en la comparación de octanaje RON, donde se estableció que al retirar el butano de la mezcla la aproximación de la regresión lineal con respecto a la situación real fue mejor, lo cual puede estar asociado a la inestabilidad que dicho componente posee en términos de propiedades evaporativas lo cual afecta mediciones de otros ensayos entre ellos determinación de número de octanos.

Asimismo, los casos II a y II b (G-91 con etanol) presentaron una buena aproximación a lo estimado por el modelo de regresión lineal, pese a que en sus formulaciones no se contó con MTBE para ambos casos y TAME para el segundo, los cuales son éteres empleados actualmente en el país para el aumento del octanaje debido a su alta capacidad antidetonante. Tal situación conlleva a establecer que el

CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

etanol es un buen sustituto del MTBE como compuesto oxigenado para el incremento de número de octanos MON y que por lo tanto, el sinergismo que él presenta con el resto de los componentes de la mezcla al retirarse el MTBE es positivo, pues su presencia proporciona a dicha mezcla las condiciones óptimas para el desempeño del motor en condiciones más severas, con respecto a los componentes de forma individual, sin necesidad de añadir ninguno de los éteres.

Por otra parte en los casos I b y III a, no se cuenta con la presencia de LKN y butano para el primero y para el segundo etanol y butano. En ambos casos se presenta la mayor diferencia entre lo estimado y lo observado, lo cual indica que al retirar butano junto a otro componente, el sinergismo de la mezcla es negativo, pues el número de octano motor se ve disminuido con respecto al de los componentes. Asimismo, se recalca la importancia del etanol en la mezcla, pues su interacción con los demás componentes favorece el aumento del octanaje MON.

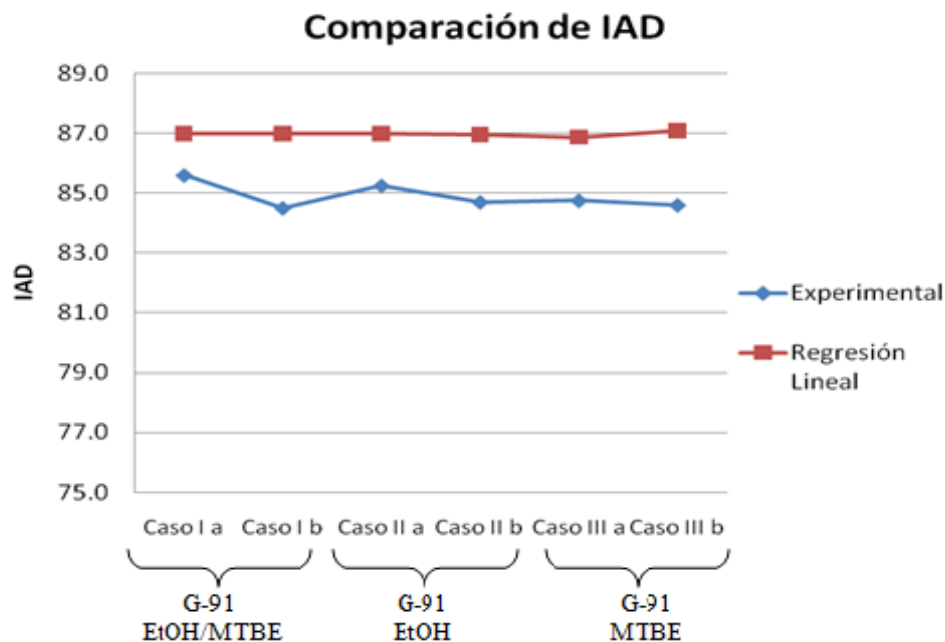


Figura N°5. IAD experimental y por regresión lineal

- **Índice antidetonante (IAD)**

De acuerdo a lo presentado en la figura N°5 se tiene una similitud marcada entre lo predicho por el modelo de regresión lineal para el IAD y lo obtenido experimentalmente. Destaca el caso I a, en el cual no había presencia de butano, pues el residuo obtenido fue menor con respecto a los demás al igual que el caso II a (G-91 con etanol).

A pesar de la presencia del Ter-amil metil éter (TAME) en la mezcla, el cual es un oxigenado de buen octanaje para la formulación de gasolinas, debe tomarse en cuenta las propiedades antidetonantes del etanol, puesto que los valores obtenidos para la caracterización del mismo, lo colocaron como el segundo mayor octanaje de todos los componentes; esto se debe principalmente a la cantidad de oxígeno presente en su molécula. Es por tal razón que para el caso II a, a pesar de no contarse con el oxigenado MTBE, se obtuvo un valor de índice antidetonante muy aproximado al estimado por el modelo, debido a la presencia de etanol en la mezcla, el cual toma el rol de oxigenado principal con respecto al TAME, y permite el incremento tanto de octanaje de investigación (RON) como octanaje motor (MON).

Por otra parte, se tiene que en el caso I b (G-91 con etanol y MTBE), se presenta el residuo de mayor magnitud. En dicho caso no se contó con LKN y butano al momento de la formulación, lo cual repite la situación presentada en la comparación del octanaje MON, donde se presenta que al retirar butano (nC4) en conjunto con otro componente, se ve afectada de forma negativa la mezcla con los componentes restante, debido al alto octanaje que el nC4 presenta.

- **Sensibilidad**

Luego de observar la figura N° 6 referida a la comparación de sensibilidad, es posible decir que tanto la curva experimental como la estimada por regresión lineal presentan tendencia similares en la mayoría de los casos. Se presentan las mejores aproximaciones en los casos I a, I b (gasolina con etanol y MTBE) y el caso III a, sin

embargo destacan el II a y II b (gasolina con etanol), por presentar residuos con magnitudes mucho mayores que los demás casos.

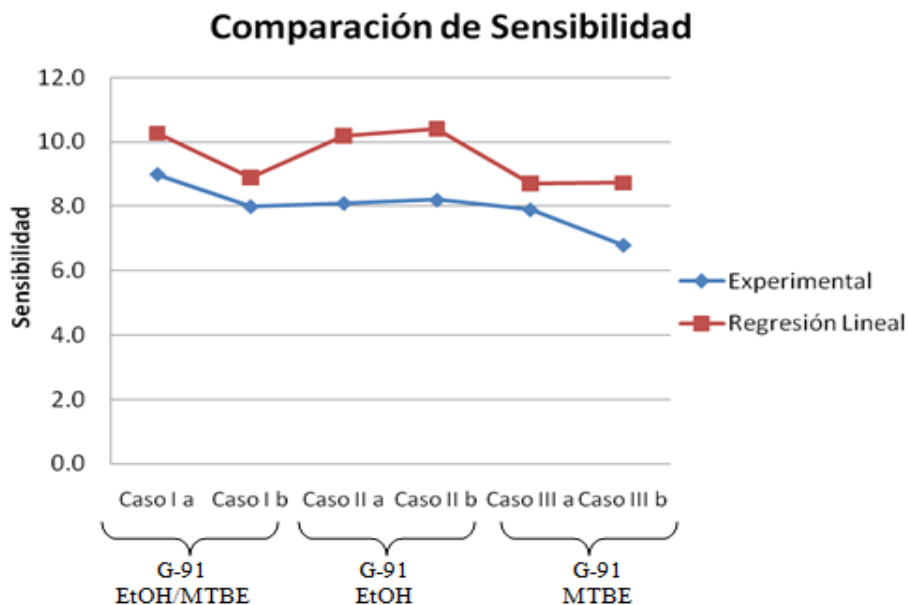


Figura N° 6. Sensibilidad experimental y por regresión lineal

Con respecto a las recetas formuladas que presentaron una mejor aproximación a lo estimado por el modelo de regresión lineal, se debe destacar que fueron las mismas están correlacionadas fuertemente con lo obtenido de octanaje RON y MON. Tomando en cuenta que la sensibilidad es la diferencia entre ambos octanajes, es lógico que la ecuación de predicción proporcione datos similares a dicha diferencia. Al observar el gráfico N° 3, de comparación para octanaje de investigación (RON), se denota la similitud de las curvas obtenidas con las presentadas en el gráfico de sensibilidad, y los menores residuos de éste último se presentan en aquellos casos que además de tener la mejor aproximación de octanaje RON, la estimación por regresión lineal del octanaje MON tuvo mayores porcentajes de desviación por encima de lo obtenido. Dichos casos presentaron por tanto, mayor cercanía de octanajes RON y MON, por lo que sus residuos fueron pequeños para la curva de regresión lineal; por su parte, para la curva experimental se tuvo que los resultados obtenidos en

laboratorio presentaron una mayor cercanía a lo esperado, por lo que las sensibilidades se hicieron menores, acercándose así a lo predicho por el modelo.

Sin embargo, a pesar de los comportamientos análogos que ambas curvas presentaron en el gráfico, debe destacarse que los porcentajes de desviación mostrados en la tabla N°111 del apéndice G, señalan valores superiores a 10%, por lo que se puede decir que, a pesar de la similitud que dichas curvas presentaron, el modelo de regresión lineal no fue del todo eficiente para la determinación de sensibilidad. Tal situación puede ser consecuencia de la dependencia que ésta variable posee con respecto a los octanajes tanto de investigación como motor, pues su valor no es determinado de forma experimental sino algebraicamente; aunque se modeló como una variable autónoma a fin de modelarlo independientemente y minimizar los errores de predicción globales del modelo.

IV.4 COMPARACIÓN DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS

Posterior a la formulación de las recetas de gasolina de 91 octanos que cumplieren con las restricciones de la norma NVF-764 “Gasolinas para motores de combustión interna”, se procedió a la medición de las propiedades evaporativas: presión de vapor y destilación

En el apéndice H se muestran los valores predichos por regresión lineal, por propiedades aditivas y los porcentajes de desviación de cada una con respecto a lo obtenido experimentalmente.

- **Presión de vapor**

De acuerdo a lo observado en la figura N° 7 en relación a la presión de vapor, se puede decir que la mejor predicción con respecto a los resultados experimentales se obtuvo mediante propiedades aditivas lineales; Dicha afirmación se basa en que la magnitud de residuos entre lo obtenido en laboratorio y lo calculado a partir de la caracterización de los componentes es mucho menor en comparación a los de regresión lineal.

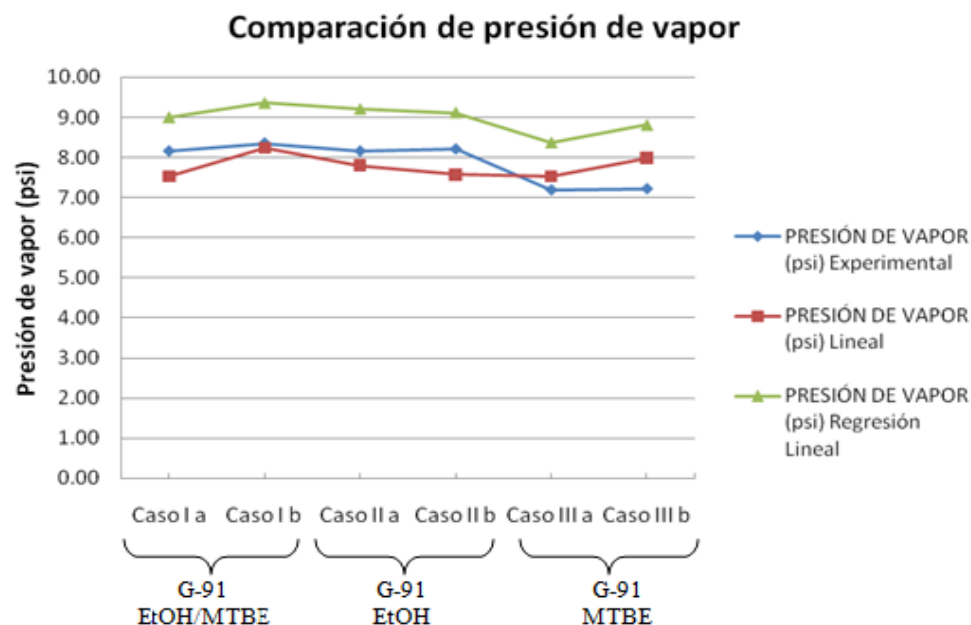


Figura N° 7. Comparación de presión de vapor

Cabe destacar que el caso más favorable de la predicción lineal es el I b, en donde se retiró LKN y butano de la formulación, pues el residuo presentó la menor magnitud con respecto a los demás casos. Tomando en cuenta que el butano es altamente volátil y que, al igual que el LKN también posee un RVP elevado, es posible decir que la determinación por propiedades aditivas de la presión de vapor es más precisa al prescindir de dichos componentes, e indica numéricamente que la mezcla en éste caso posee un sinergismo positivo con respecto a los integrantes de la misma.

Con respecto a la predicción de la ecuación de regresión, debe tomarse en cuenta la integridad de los componentes empleados, la cual se vio afectada durante el proceso de almacenamiento y también por el uso de los mismos en investigaciones previas, lo cual contribuyó a desequilibrar la relación líquido-vapor presente en los bidones contenedores. Sin embargo, cabe hacer énfasis en que el comportamiento de la curva de regresión lineal presentó una tendencia análoga a la curva experimental en cada uno de los casos planteados, presentando residuos de magnitudes similares en cada punto. Tal situación es indicativo de que el modelo de regresión lineal obtenido, es

eficiente para determinar los resultados para la variable presión de vapor, a pesar de no proporcionar estimaciones tan precisas como la lineal.

- Punto inicial de ebullición (PIE)

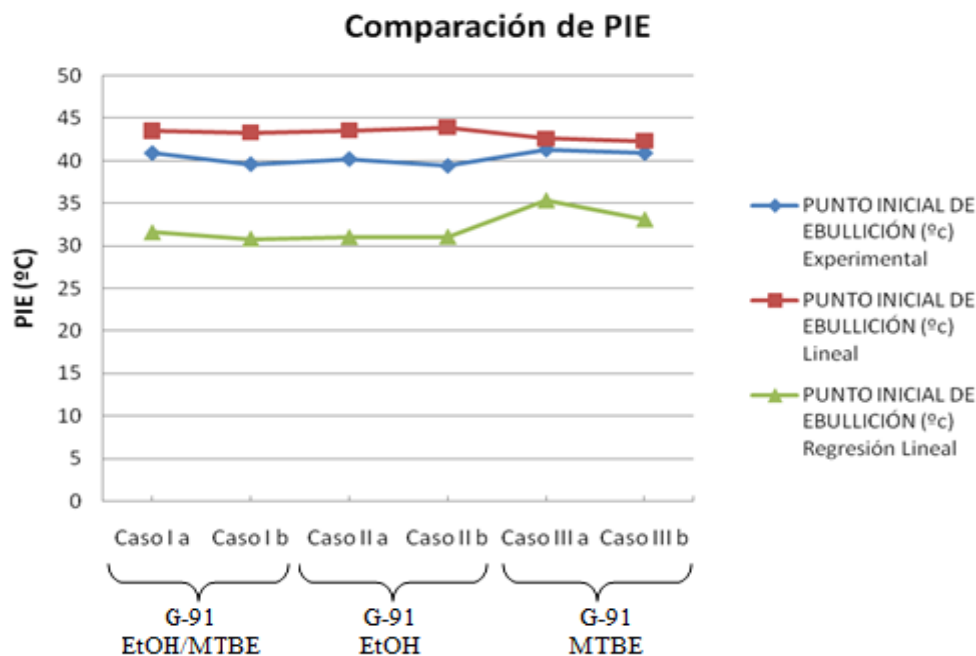


Figura N° 8. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE)

Con respecto a lo observado en la figura N°8 referente al punto inicial de ebullición, se denota que la predicción mediante propiedades aditivas lineales es mucho más precisa que la de regresión lineal, pues los residuos del primero presentan magnitudes más pequeñas respecto al segundo.

De los puntos representados en el gráfico, los casos III a y III b (G-91 con MTBE) presentaron las mejores aproximaciones de la estimación lineal con respecto a lo obtenido. En el primero no se contó con la presencia de etanol y butano en la formulación de la receta y en el segundo se prescindió de los mismos componentes además de LKN. Tomando en cuenta que, de acuerdo a la tabla de caracterización el etanol posee un punto inicial de ebullición notablemente superior en relación a los demás componentes del “pool”, es lógico que su ausencia en la mezcla contribuya a

una mejor estabilidad al momento de evaporarse la primera gota, es decir a un sinergismo positivo. Tal afirmación se ve corroborada por el modelo de regresión lineal, pues para éste último, los casos en cuestión presentaron los porcentajes de desviación más bajos en general.

- **Temperatura a 10% de evaporado (T10)**

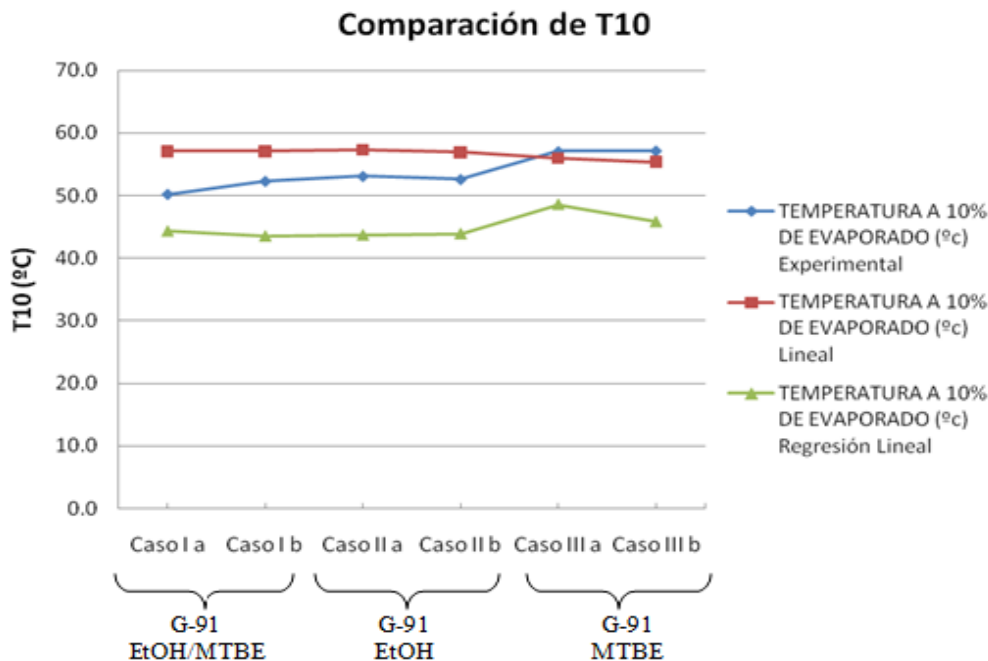


Figura N° 9. Comparación de temperatura a un 10% de evaporado (T10)

En relación a lo presentado en la figura N° 9, se tiene que al igual que las variables anteriormente discutidas, la predicción lineal es más precisa que la predicción del modelo de regresión lineal, debido a la proximidad que la primera presentó con los resultados obtenidos en el laboratorio. Asimismo, los casos III a y III b (gasolina de 91 octanos con MTBE) que no contaron con la presencia de etanol, presentaron los residuos más bajos tanto por el modelo lineal como por el de regresión lineal. Tal situación, es consecuencia del alto valor de T10 presentado por el etanol con respecto a los demás integrantes del “pool” en el proceso de caracterización, haciendo así que su ausencia de la mezcla formulada permita una estabilidad mayor en relación a los casos en los que él está presente. Lo afirmado anteriormente se recalca en la curva del

modelo de regresión lineal, en donde los casos ausentes de etanol presentaron igualmente los menores residuos con respecto a los demás.

Sin embargo, debe destacarse que para el caso I a, en cuya formulación no se ingresó el butano, la ecuación de regresión lineal presentó un porcentaje de desviación menor al estimación lineal, lo cual puede evidenciarse en la tabla N°114, del apéndice H; dichas circunstancias, pueden ser consecuencia de la inestabilidad del butano, pues su alta volatilidad afecta el proceso de destilación, y por lo tanto su ausencia de la mezcla conlleva a un sinergismo positivo de acuerdo a lo mostrado por la ecuación de regresión lineal.

- **Temperatura a 50% de evaporado**

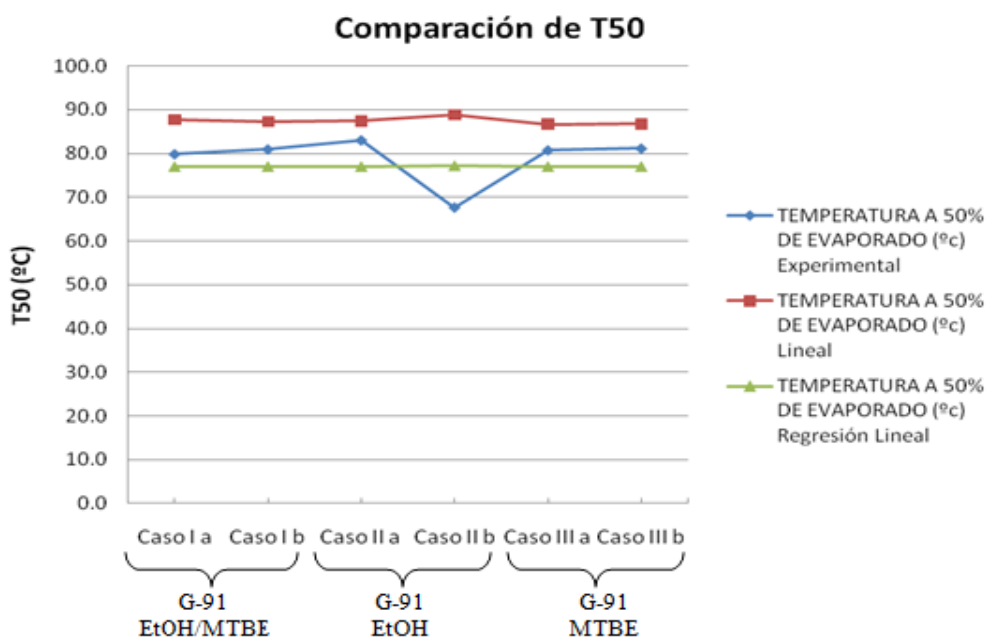


Figura N°10. Comparación de temperatura a un 50% de evaporado (T50)

Con respecto a lo mostrado en la figura N°10 referente a la temperatura de 50% de evaporado (T50) se tiene que, a diferencia de las variables anteriores en esta ocasión el modelo de regresión lineal presentó una mejor aproximación que la estimación lineal. Tal situación, puede verificarse en la tabla N°115 del apéndice H donde los porcentajes de desviación del modelo de regresión presentan valores inferiores al

10% a excepción del caso II b (D-91 con etanol). Debido a que el etanol es un componente que forma un azeotropo y destila de forma constante a aproximadamente a 78,3°C, es lógico que su presencia como único oxigenado para el caso en cuestión permita que la mezcla presente un comportamiento igualmente azeotrópico.

En los puntos azeotrópicos la temperatura de destilación se ve disminuida pues la composición de la fase vapor es igual a la fase líquido, por lo que la mezcla se comporta de forma similar a un componente puro, y en consecuencia el requerimiento calórico es menor. Es por tal razón que para el caso II b, la temperatura a un 50% de evaporado mostró una disminución considerable en relación a los demás casos planteados, difiriendo así de las predicciones por regresión lineal y aditiva.

Con respecto a las curvas de estimación, se puede observar que ambas presentaron tendencias análogas entre sí y residuos pequeños respecto a lo obtenido en el laboratorio. Lo pronosticado por dichas curvas es debido al comportamiento estable que las mezclas presentan en esta etapa del proceso de destilación, puesto que en dicho punto los componentes más volátiles se han evaporado en gran parte y los más menos volátiles se encuentran aún en el balón, llegando a un momento de estabilización de la temperatura por parte del equipo para lograr la separación deseada.

- **Temperatura a 90% de evaporado (T90)**

De acuerdo a lo mostrado en la figura N°11 en relación a la temperatura a un 90% de evaporado (T90), se puede afirmar que la predicción del modelo de regresión lineal es mucho más efectiva que la estimación mediante propiedades lineales, pues es evidente que los residuos presentados por la primera son notablemente menores a lo mostrado por la segunda. Tal afirmación, es consecuencia de la estabilidad que las mezclas formuladas presentaron en las últimas etapas del proceso de destilación, dada la presencia de compuestos con características similares en el balón y de la ausencia de todos los volátiles evaporados al inicio de la separación.

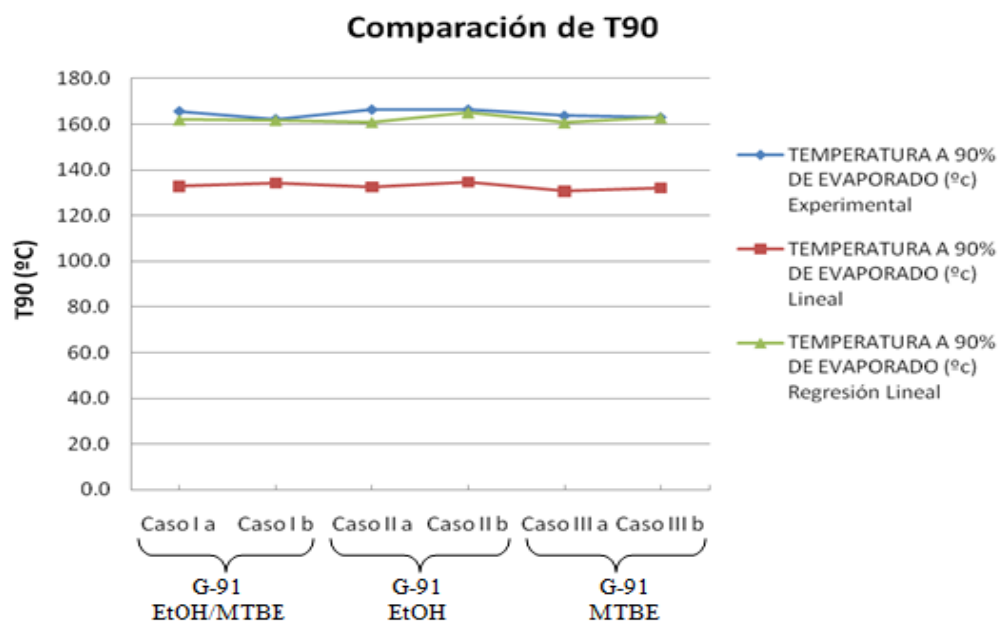


Figura N°11. Comparación de temperatura a un 90% de evaporado (T90)

Con respecto a la estimación lineal, se presentaron valores superiores al 15 % de desviación respecto a lo obtenido experimentalmente. Tal situación es consecuencia de los sinergismos presentados en las mezclas, los cuales no pueden ser establecidos mediante propiedades lineales, ya que estas últimas toman en consideración solamente lo determinado en la caracterización de los componentes y predicen su desempeño en la mezcla de acuerdo a la fracción en volumen de cada uno de ellos.

- **Punto final de ebullición (PFE)**

De acuerdo a lo observado en la figura N°12, se tiene que, al igual que lo ocurrido con la T90, para el punto final de ebullición (PFE) la estimación más precisa fue la del modelo de regresión lineal, al comparar los residuos de éste último con los de la estimación mediante propiedades aditivas. La regresión lineal, toma en consideración las interacciones de los componentes integrantes del “pool” de gasolinas de la refinería, y por lo mismo estableció para las mezclas planteadas la mejor predicción del PFE, a diferencia del modelo lineal en donde únicamente se tomó en cuenta la caracterización de dichos componentes y la proporción de los mismos en la mezcla.

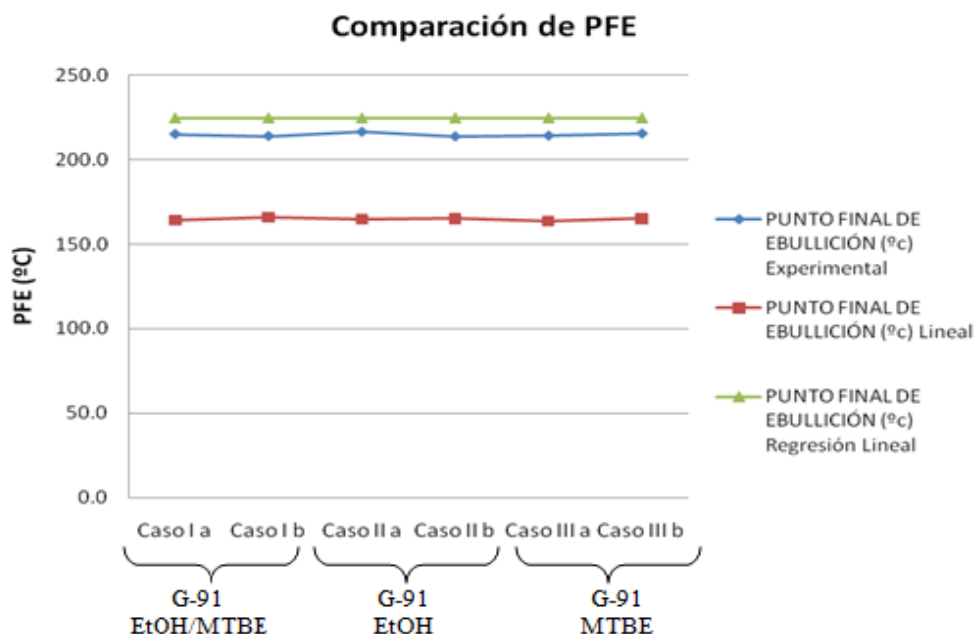


Figura N°12. Comparación de punto final de ebullición (PFE)

Asimismo, debe hacerse énfasis en los porcentajes de desviación mostrados en la tabla N° 117 en el apéndice H para la predicción lineal, pues los mismos señalan valores superiores a un 20% en cada caso, lo cual recalca lo afirmado previamente acerca de la ineficiencia del modelo lineal para estimar los sinergismos de mezcla.

- **Evaporado a 70°C (E70)**

Luego de observar lo mostrado en la figura N°13 en relación al volumen evaporado a 70°C (E70), se evidencia que lo obtenido experimentalmente no presenta un comportamiento análogo a ninguna de las predicciones en cuestión, lo cual señala la dificultad de estimar dicha variable. Tal situación es lógica si se toma en cuenta lo obtenido en la caracterización de componentes y en la matriz experimental, pues en ambos casos se observaron valores de E70 muy diversos, los cuales se relacionaban con la volatilidad de los integrantes. Para la matriz, las mezclas que incluyeron componentes de alta volatilidad presentaron valores de muchos mayores a aquellos que contenían a los de menor volatilidad, lo cual fue correspondiente a los valores que cada uno de dichos componentes presentó en la fase de caracterización.

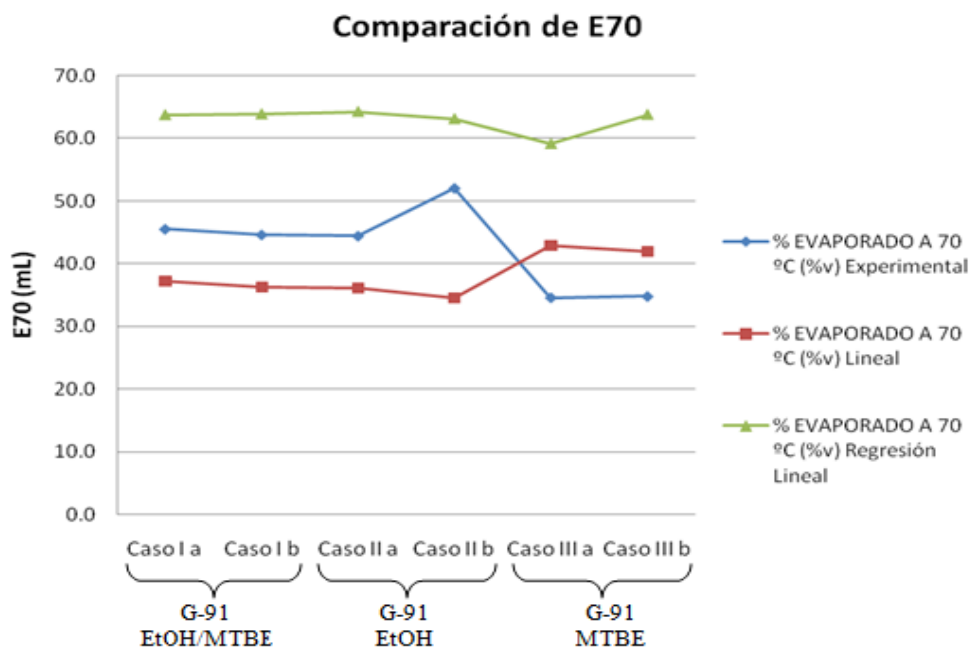


Figura N°13. Comparación de evaporado a 70°C (E70)

Con respecto a la mejor predicción, se tiene que, a pesar de que los residuos de ambas curvas de regresión lineal y por propiedades aditivas presentaron valores superiores al 15%, es notable en la tabla N°118 del apéndice H, que los de menor magnitud se presentaron en el modelo lineal, lo cual indica que la mejor aproximación la presentó este último .

Cabe destacar que de lo observado en la figura N°16, destaca lo obtenido para el caso II b (G-91 con etanol), puesto que su comportamiento no tuvo similitud con ninguna de las curvas de predicción. La presencia de etanol en dicha mezcla otorgó a la misma un comportamiento azeotrópico como fue señalado en discusiones previas, lo cual conllevó a una disminución notable de temperatura a 50°C y un posterior incremento en la etapa de 60 a 70% de evaporado. Tal situación, ocurrió debido al cambio en la igualdad que presentan las composiciones de líquido y vapor de la mezcla una vez pasado el punto azeotrópico, lo cual conlleva a un requerimiento mayor de calor para continuar con la separación y permitir la evaporación de los componentes de menos volatilidad presentes en el balón para esa etapa del proceso.

- Índice de bloqueo por vapor

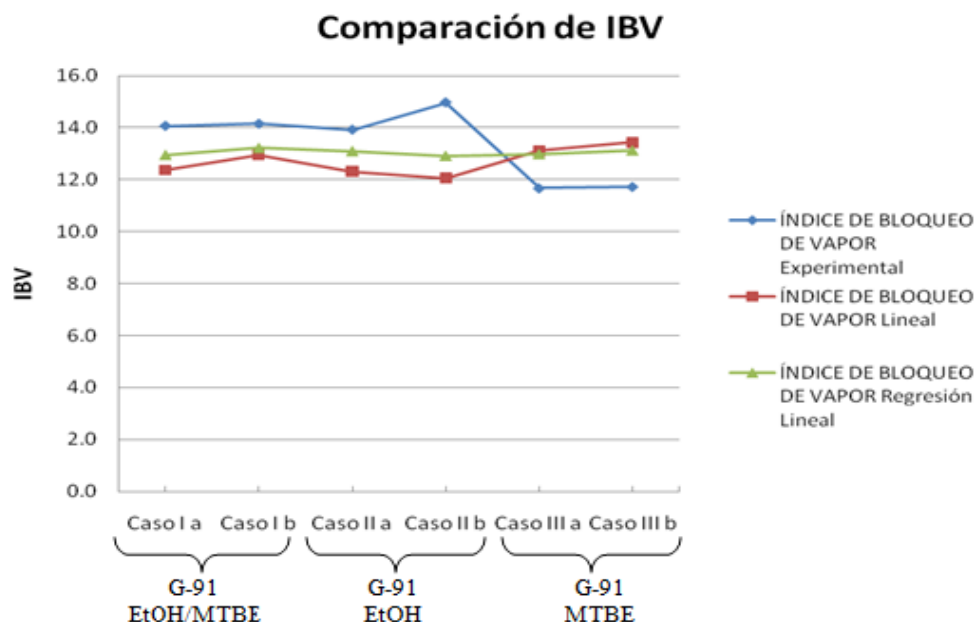


Figura N°14. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV)

Luego de observar la figura N°14 referida al comportamiento del índice de bloqueo de vapor (IBV), se tiene que la predicción más aproximada a lo obtenido experimentalmente en el laboratorio es la del modelo de regresión lineal. Ambas predicciones sin embargo, presentaron tendencias similares entre sí, lo cual indica que las dos permiten realizar una estimación cercana al comportamiento real de las mezclas.

Cabe destacar que en la curva experimental el caso II b destaca por poseer un valor de IBV mucho mayor que los demás casos, superar lo establecido por la norma FONDONORMA NVF-764 y no presentar ninguna semejanza con los modelos de predicción. Esta situación ocurre debido a la dependencia directa de dicha variable con la presión de vapor y el evaporado a 70°C. Tomando en cuenta lo explicado previamente para el E70 cuando para la mezcla en cuestión al contener etanol, es lógico lo obtenido para el IBV, pues la primera afecta directamente lo que se obtiene de ésta última.

IV.5 DESARROLLO DE HERRAMIENTA COMPUTACIONAL

Inicialmente se ingresó en una tabla el sistema de ecuaciones en Excel®, que incluyó cada uno de los componentes del “pool” de gasolinas de la refinería así como cada una de las variables dependientes establecidas. Luego se activó el complemento de Excel® denominado Solver, el cual permite resolver sistemas de ecuaciones una vez que se hayan ingresado las restricciones de dicho sistema y se establezca el valor requerido de la función objetivo fijada. Tales restricciones se mostraron en el sistema a fin de guiar al usuario a conocer los límites impuestos por la norma NVF-764 de gasolinas para motores de ignición por chispa.

Posteriormente se colocó un esquema básico de la etapa de producción de gasolinas en la refinería, mostrándose los tanques de almacenamiento de insumos provenientes de las etapas previas de refinación y los de almacenamiento del producto final, los cuales se especificaron para tres casos diferentes: G-91 con Etanol y MTBE, G-91 con etanol y G-91 con MTBE. En dicho esquema se insertaron diversos macros que permitieron evaluar la capacidad de cada tanque de insumo: volumen máximo disponible, talón de bombeo y capacidad operacional de acuerdo a los datos que proporcione la refinería. Dichos macros se activan al hacer click en cada uno de dichos tanques de insumo. Asimismo, debe destacarse que las celdas inferiores de cada tanque de insumo ubicado en el esquema de la figura N°15, están directamente relacionadas con los porcentajes en volumen de cada componente proporcionados por *solver*, y de igual forma se relacionan con las celdas de los tanques de producto terminado, en los cuales se indica la cantidad requerida por la refinería para despachar en un momento dado, todo esto con el fin de establecer la cantidad necesaria en barriles de cada uno de los componentes.

A continuación se procedió a la programación mediante Visual Basics® de un macro denominado “chequear requerimientos”, en donde se dispuso que para cada tanque de insumo se comparara lo mostrado en las celdas del esquema, con la diferencia del volumen máximo disponible y el talón de bombeo tal como aparecen en la figura N°16; dicha diferencia indica el volumen operacional de cada tanque para un tiempo

determinado y permite evaluar si lo requerido de cada componente en función a los resultados del solver está contenido en los recipientes de la refinería, para así dar inicio a la producción de la gasolina de 91 octanos especificada.

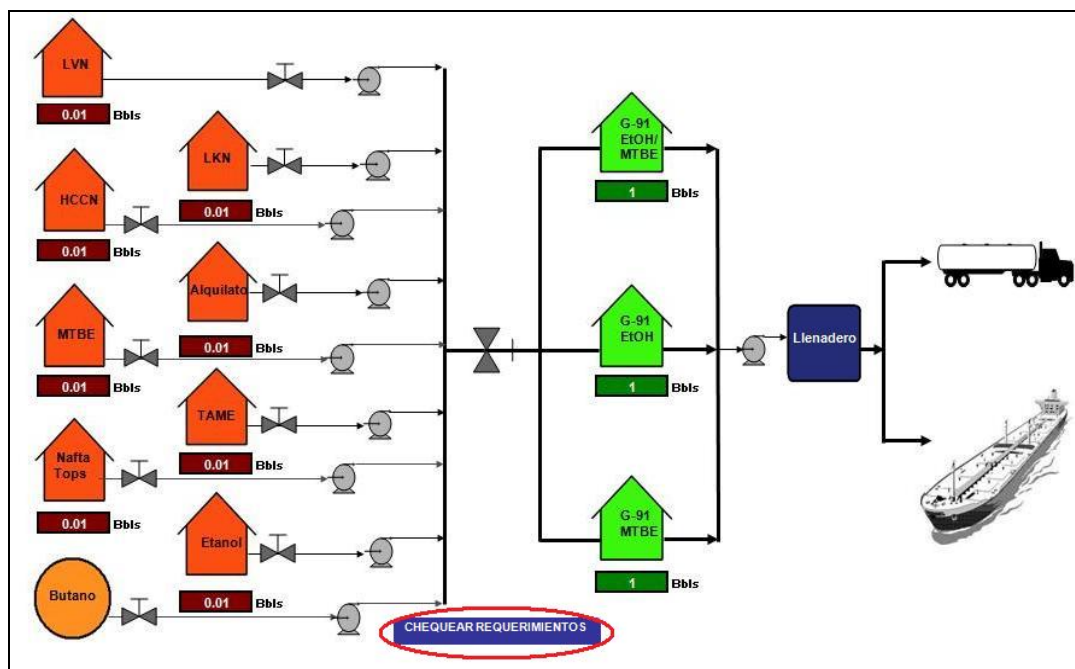


Figura N°15. Esquema de la refinería mostrado en la herramienta computacional

Es por tal razón que en los casos en que lo requerido en algún tanque no se encuentre disponible, aparece un cuadro de diálogo que señala la no correspondencia entre ambos datos y por lo tanto se hace necesario ingresar nuevamente al solver a fin de plantear una nueva receta que sea factible en términos de producción.

A fin de corroborar la efectividad de la herramienta, se planteó como casos críticos uno con un valor de volumen máximo disponible 100.000 Bbls y otro con 1000 Bbls. En todas las corridas realizadas se supuso una demanda de 20000 Bbls de gasolina y un talón de bombeo de 500 Bbls. Luego de simularse en la herramienta los casos supuestos se obtuvieron los resultados indicados en las tabla N°16 y N°17, donde se observa lo establecido por dicha herramienta computacional para los valores máximo y mínimo de los tanques de insumo en cada caso de gasolina de 91 octanos.

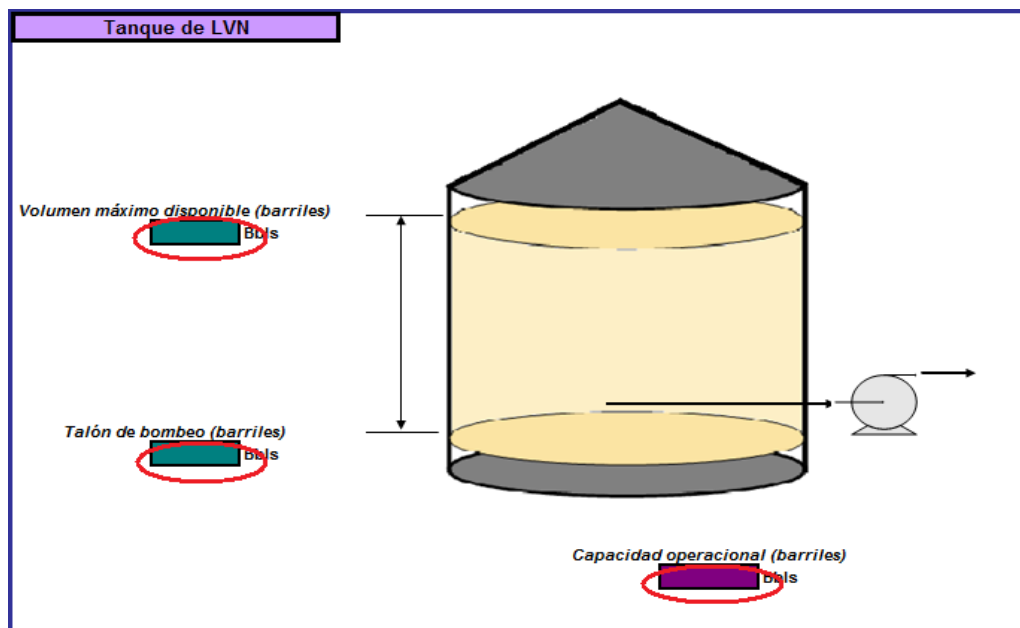


Figura N°16. Tanque de insumo de herramienta computacional

En las mencionadas tablas se concluye para cada componente si la receta obtenida fue satisfactoria o no para ser llevada a producción. Se considera afirmativo (Si) cuando lo requerido de un componente se encuentra dentro de lo disponible, así como negativo (No) cuando tal requerimiento no puede ser satisfecho.

De lo observado se tiene que para la suposición de un valor máximo disponible de 100.000 Bbls en cada uno de los tanques de insumo, los requerimientos de acuerdo al sistema de ecuaciones fueron satisfechos para cada caso. Tal situación es lógica si se toma en cuenta que sólo se requiere una producción de 20.000 Bbls de gasolina, por lo que 100.000 Bbls tope de cada componente almacenado es suficiente para satisfacer la demanda. Sin embargo, en la tabla N°16, donde se planteó un volumen máximo disponible de 1.000 Bbls, se pudo denotar que para ninguno de los casos planteados se pudo compensar lo exigido en la producción. Tal situación, al igual que el caso anterior es lógica, pues 1.000 Bbls en cada tanque de insumo como tope con 500 Bbls de talón de bombeo, conllevan a volúmenes disponibles insuficientes para satisfacer la demanda presentada de 20.000 Bbls de gasolina.

CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Tabla N°15. Requerimiento de componente verificados por la herramienta para un volumen máximo disponible de 100.000Bbls

Volúmen máximo disponible = 100.000 Bbls									
Casos	LVN	LKN	HCCN	Alquilato	MTBE	TAME	NAFTA TOPS	Etanol	Butano
I (G-91/EtOH+MTBE)	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si
II (G-91/EtOH)	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si
III (G-91/MTBE)	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si	Si

Tabla N°16 Requerimiento de componente verificados por la herramienta para un volumen máximo disponible de 1000Bbls

Volúmen máximo disponible = 1.000 Bbls									
Casos	LVN	LKN	HCCN	Alquilato	MTBE	TAME	NAFTA TOPS	Etanol	Butano
I (G-91/EtOH+MTBE)	No	No	No	No	No	No	No	No	No
II (G-91/EtOH)	No	No	No	No	Si	No	No	No	No
III (G-91/MTBE)	No	No	No	No	No	No	No	Si	No

Lo anterior corrobora la efectividad de la herramienta computacional para determinar si lo requerido por un componente en función al modelo de regresión lineal, puede o no ser satisfecho por el volumen disponible en cada tanque de insumo de la refinería para una demanda.

En las figuras N°40 y N°41 del apéndice J, se muestra lo indicado por la herramienta computacional para un volumen máximo disponible de 100.000 Bbls y 1.000 Bbls en cada uno de los tanques de insumo respectivamente.

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En este capítulo se presentan las conclusiones y recomendaciones establecidas por los resultados obtenidos.

V.1 CONCLUSIONES

- El diseño de experimento “especial cúbico” es adecuado para la formulación con nueve (9) componentes de gasolina de 91 octanos.
- La presencia de un 34,8% de oxígeno en la molécula de etanol le otorga a este, propiedades antidetonantes favorables con respecto a los también oxigenados TAME y MTBE.
- La presencia de etanol en una mezcla binaria o ternaria conlleva a un incremento del octanaje RON por encima de los 100 octanos.
- Los componentes LKN y LVN al ser añadidos en proporciones superiores a un 30% en volumen en las mezclas de componentes de gasolina conllevan a sinergismos negativos en términos de octanaje RON.
- La presencia de más de un 10% en volumen de butano en las mezclas de componentes de gasolina conlleva a valores de presión de vapor superiores a 10 psi.
- Los coeficientes de determinación R^2 de cada ecuación del modelo de regresión lineal, indican una correlación entre variables dependientes e independientes en un rango de 85 a 97%.
- Existe una relación estadísticamente significativa para un nivel de confianza de 95% entre las variables independientes y cada una de las variables dependientes consideradas en el estudio.
- El octanaje RON y la sensibilidad obtenidas a través del modelo de regresión lineal, presentaron una mejor aproximación a lo obtenido experimentalmente para el caso que incluye etanol y MTBE en la formulación de la mezcla.

- El octanaje MON e IAD obtenidos a través del modelo de regresión lineal, presentaron una mejor aproximación a lo obtenido experimentalmente en el caso donde únicamente se incluyó etanol como oxigenado en la formulación de la mezcla.
- El etanol como único oxigenado en una mezcla de gasolina conlleva a la presencia de un rango azeotrópico cercano al 50% de evaporado afectando así al parámetro T50 y E70.
- Los parámetros evaporativos de presión de vapor (RVP), punto inicial de ebullición (PIE), temperatura a 10% de evaporado (T10) y el evaporado a 70°C (E70) determinados experimentalmente, presentaron un mejor ajuste con respecto a los predichos mediante propiedades aditivas.
- Los parámetros evaporativos de temperatura a 50% evaporado (T50), temperatura a 90% de evaporado (T90), punto final de ebullición (PFE) e índice de bloqueo por vapor (IBV) determinados experimentalmente, se ajustaron mejor al modelo de regresión lineal.
- La herramienta computacional desarrollada es efectiva para determinar si los requerimientos de los tanques de insumo en la refinería pueden ser satisfechos, de acuerdo a la formulación proporcionada por el modelo de regresión lineal.

V.2 RECOMENDACIONES

- Aplicar el estadístico de Durbin-Watson a fin de detectar la presencia de autocorrelación serial en el modelo de regresión, y posteriormente aleatorizar los experimentos a fin de corroborar o diferir en lo determinado mediante el estadístico.
- Utilizar componentes de gasolinas preservados de manera adecuada a fin de mantener su composición.
- Establecer un modelo de regresión lineal para gasolinas de 95 octanos, a partir de los datos proporcionados por la matriz experimental.
- Considerar la caracterización del talón de bombeo en los tanques de insumo y de producto terminado, a fin establecer si existe la necesidad de variar las propiedades físico-químicas de la sustancia a ingresar de manera tal que se alcancen las restricciones establecidas.
- Emplear en la herramienta computacional para cada una de las variables dependientes, la ecuación que mejor prediga la variable en cuestión.
- Mejorar la herramienta computacional, tomando en cuenta para ello las variables de producción de componentes de gasolinas y flujo en el cabezal de mezcla, con el propósito de contar con una herramienta más funcional desde el punto de vista operativo.

BIBLIOGRAFÍA

American Society for Testing and Materials, (2007). Standard practice for preparation of Liquid Blends for Use as Analytical Standards. Annual Book of ASTM Standards, D-4307

American Society for Testing and Materials, (2007). Standard Test Method for Research Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel. Annual Book of ASTM Standards, D 2699-07.

American Society for Testing and Materials, (2007). Standard Test Method for Motor Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel. Annual Book of ASTM Standards, D 2700-07a.

American Society for Testing and Materials, (2007). Standard Test Method for Vapor Pressure of Petroleum Products (Mini Method). Annual Book of ASTM Standards, D 5191-06.

American Society for Testing and Materials, (2007). Standard Test Method for Distillation of Petroleum Products at Atmospheric Pressure. Annual Book of ASTM Standards, D 86-07a.

Álvarez, L. (2007). Formulación de gasolinas modelos de predicción de octanajes y propiedades aditivas.

Carrasco, M. y Guevara E. (2001). Efectos ambientales del metil terc butil éter (MTBE) como oxigenante en la formulación de gasolinas. Universidad de Carabobo. Valencia, Venezuela.

Casadesús, M. y otros. (2008). Sistemas de gestión estandarizados: ¿existen sinergias?. Universidad de Girona. España.

Celta, D., Llatas I. y Saab, L. (1995) Modelaje de propiedades de mezcla de gasolinas con comportamiento no lineal. Visión Tecnológica.

Cornell, J. (1981). Experiments with mixtures. Designs, models, and the analysis o mixture data. United States.

- De Abreu D., Yusmary. (2007). Desarrollo de un modelo de simulación de refinerías, utilizando técnicas de programación lineal. Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Fondonorma. (2007). Productos derivados del petróleo. Gasolina para motores de combustión interna. NVF 764.
- Glismann, K. y Gruhn, G. (2001). Short-term scheduling and recipe optimization of blending processes. *Computers and Chemical Engineering*.
- Guerra, F. y otros. (2008). Producción de bioetanol. Universidad Iberoamericana. Ciudad de México, México.
- Gujarati, Damodar N. (2003). *Econometría*. Estados Unidos.
- Lundgren, M.; Lundgren, T. y Persson J. (2002). An optimization model for refinery production scheduling. *Int. J. Production Economics*.
- Mayz, M. y Salas, L. (2009). Estado del Arte: Gasolinas. PDVSA Intevep.
- Motor Gasolines Technical Review (1996). Chevron Products Company Technical Review.
- NORMA VENEZOLANA. (1994). Gasolinas. Determinación de la estabilidad a la oxidación. Método del período de inducción. CONVENIN 873:1994.
- PDVSA-Intevep. (2009). Método de ensayo normalizado para densidad y densidad relativa de líquidos por densimetría digital.
- Scenna, Nicolás José. (1999). Modelado, simulación y optimización de procesos químicos. Universidad Tecnológica Nacional. Argentina.
- Vera Candiotti, Luciana. (2009). Desarrollo de nuevas estrategias analíticas basadas en técnicas separativas acopladas a metodologías de preconcentración y modelado quimiométrico para el análisis de fármacos y sus metabolitos en muestras complejas. Universidad Nacional del Litoral. Santa Fe, Argentina.

APÉNDICES

APÉNDICE A. MATRIZ DE EXPERIMENTOS

A continuación se muestra la matriz de experimentos establecida para la realización de los ensayos requeridos por este Trabajo Especial de Grado. Para cada nivel se muestra la proporción en volumen de todos los componentes que conformaron las muestras del plan experimental. En la parte superior de cada tabla se indica el número de mezcla, asimismo se destacan en rojo aquellas que se consideraron no factibles.

Tabla No 17. Matriz experimental para dos (2) componentes

Componente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
LVN	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2									
LKN	1/2						1/2	1/2		1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2		
HCCN		1/2							1/2							1/2	1/2
ALQUILATO			1/2							1/2						1/2	
MTBE				1/2							1/2						1/2
TAME					1/2							1/2					
NAFTA TOPS						1/2							1/2				
BUTANO							1/2							1/2			
ETANOL								1/2							1/2		

Tabla No 18. Matriz experimental para dos (2) componentes. (Continuación)

Componente	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
LVN																				
LKN																				
HCCN	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2															
ALQUILATO						1/2	1/2	1/2	1/2	1/2										
MTBE	1/2					1/2					1/2	1/2	1/2	1/2						
TAME		1/2					1/2				1/2				1/2	1/2	1/2			
NAFTA TOPS			1/2					1/2				1/2			1/2			1/2	1/2	
BUTANO				1/2					1/2				1/2			1/2		1/2	1/2	1/2
ETANOL					1/2					1/2				1/2			1/2		1/2	1/2

Tabla No 19. Matriz experimental para tres (3) componentes

Componente	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53
LVN	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
LKN	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3										
HCCN	1/3							1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3				
ALQUILATO		1/3						1/3						1/3	1/3	1/3	1/3
MTBE			1/3						1/3					1/3			
TAME				1/3						1/3					1/3		
NAFTA TOPS					1/3						1/3					1/3	
BUTANO						1/3						1/3					1/3
ETANOL							1/3						1/3				

Tabla No 20. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación)

Componente	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68
LVN	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3				
LKN												1/3	1/3	1/3	1/3
HCCN												1/3	1/3	1/3	1/3
ALQUILATO	1/3											1/3			
MTBE		1/3	1/3	1/3	1/3								1/3		
TAME		1/3				1/3	1/3	1/3						1/3	
NAFTA TOPS			1/3			1/3			1/3	1/3					1/3
BUTANO				1/3			1/3		1/3	1/3	1/3				
ETANOL	1/3				1/3			1/3		1/3	1/3				

Tabla No 21. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación)

Componente	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
LVN																		
LKN	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	
HCCN	1/3	1/3																1/3
ALQUILATO			1/3	1/3	1/3	1/3	1/3											1/3
MTBE			1/3					1/3	1/3	1/3	1/3							1/3
TAME				1/3				1/3				1/3	1/3	1/3				
NAFTA TOPS					1/3				1/3			1/3			1/3	1/3		
BUTANO	1/3					1/3				1/3			1/3		1/3		1/3	
ETANOL		1/3					1/3				1/3			1/3		1/3	1/3	

Tabla No 22. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación)

Componente	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104
LVN																		
LKN																		
HCCN	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3				
ALQUILATO	1/3	1/3	1/3	1/3											1/3	1/3	1/3	1/3
MTBE					1/3	1/3	1/3	1/3							1/3	1/3	1/3	1/3
TAME	1/3				1/3				1/3	1/3	1/3				1/3			
NAFTA TOPS		1/3				1/3			1/3			1/3	1/3			1/3		
BUTANO			1/3				1/3			1/3		1/3	1/3	1/3			1/3	
ETANOL				1/3				1/3			1/3		1/3	1/3				1/3

Tabla No 23. Matriz experimental para tres (3) componentes. (Continuación)

Componente	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120
LVN																
LKN																
HCCN																
ALQUILATO	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3										
MTBE							1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3				
TAME	1/3	1/3	1/3				1/3	1/3	1/3				1/3	1/3	1/3	
NAFTA TOPS	1/3			1/3	1/3		1/3			1/3	1/3		1/3	1/3		1/3
BUTANO		1/3		1/3		1/3		1/3		1/3		1/3	1/3		1/3	1/3
ETANOL			1/3		1/3	1/3			1/3		1/3	1/3		1/3	1/3	1/3

Tabla No 24. Matriz experimental para ocho (8) componentes

Componente	121	122	123	124	125	126	127	128	129
LVN	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	
LKN	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8		1/8
HCCN	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8		1/8	1/8
ALQUILATO	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8		1/8	1/8	1/8
MTBE	1/8	1/8	1/8	1/8		1/8	1/8	1/8	1/8
TAME	1/8	1/8	1/8		1/8	1/8	1/8	1/8	1/8
NAFTA TOPS	1/8	1/8		1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8
BUTANO	1/8		1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8
ETANOL		1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8	1/8

Tabla No 25. Matriz experimental para nueve (9) componentes

Componente	130
LVN	1/9
LKN	1/9
HCCN	1/9
ALQUILATO	1/9
MTBE	1/9
TAME	1/9
NAFTA TOPS	1/9
BUTANO	1/9
ETANOL	1/9

APÉNDICE B

MASAS CALCULADAS PARA LAS MEZCLAS DE LA MATRIZ EXPERIMENTAL

A continuación se muestran las masas calculadas de cada componente que conforma cada una de las mezclas de la matriz experimental. En dichas tablas se señala en rojo las mezclas consideradas como no factibles, por contener una proporción alta de butano, específicamente en los niveles $m = 2$ y $m = 3$ (50% y 33,3% respectivamente).

Tabla No 26. Masas calculadas para mezclas de dos (2) componentes

Mezcla	Componente 1	Masa 1 (g)	Componente 2	Masa 2 (g)
1	LVN	499.3	LKN	496.7
2	LVN	499.3	HCCN	565.4
3	LVN	499.3	Alquilato	525.7
4	LVN	499.3	MTBE	554.8
5	LVN	499.3	TAME	547.9
6	LVN	499.3	Nafta Tops	509.4
7	LVN	499.3	Butano	465.8
8	LVN	499.3	Etanol	592.8
9	LKN	496.7	HCCN	565.4
10	LKN	496.7	Alquilato	525.7
11	LKN	496.7	MTBE	554.8
12	LKN	496.7	TAME	547.9
13	LKN	496.7	Nafta Tops	509.4
14	LKN	496.7	Butano	465.8
15	LKN	496.7	Etanol	592.8
16	HCCN	565.4	Alquilato	525.7
17	HCCN	565.4	MTBE	554.8
18	HCCN	565.4	TAME	547.9
19	HCCN	565.4	Nafta Tops	509.4
20	HCCN	565.4	Butano	465.8
21	HCCN	565.4	Etanol	592.8
22	Alquilato	525.7	MTBE	554.8
23	Alquilato	525.7	TAME	547.9
24	Alquilato	525.7	Nafta Tops	509.4
25	Alquilato	525.7	Butano	465.8
26	Alquilato	525.7	Etanol	592.8
27	MTBE	554.8	TAME	547.9
28	MTBE	554.8	Nafta Tops	509.4
29	MTBE	554.8	Butano	465.8
30	MTBE	554.8	Etanol	592.8
31	TAME	547.9	Nafta Tops	509.4
32	TAME	547.9	Butano	465.8
33	TAME	547.9	Etanol	592.8
34	Nafta Tops	509.4	Butano	465.8
35	Nafta Tops	509.4	Etanol	592.8
36	Butano	465.8	Etanol	592.8

Tabla No 27. Masas calculadas para mezclas de tres (3) componentes

Mezcla	Componente 1	Masa (g)	Componente 2	Masa (g)	Componente 3	Masa (g)
37	LVN	332.9	LKN	331.2	HCCN	377.0
38	LVN	332.9	LKN	331.2	Alquilato	350.5
39	LVN	332.9	LKN	331.2	MTBE	369.9
40	LVN	332.9	LKN	331.2	TAME	365.3
41	LVN	332.9	LKN	331.2	Nafta Tops	339.6
42	LVN	332.9	LKN	331.2	Butano	310.5
43	LVN	332.9	LKN	331.2	Etanol	395.2
44	LVN	332.9	HCCN	377.0	Alquilato	350.5
45	LVN	332.9	HCCN	377.0	MTBE	369.9
46	LVN	332.9	HCCN	377.0	TAME	365.3
47	LVN	332.9	HCCN	377.0	Nafta Tops	339.6
48	LVN	332.9	HCCN	377.0	Butano	310.5
49	LVN	332.9	HCCN	377.0	Etanol	395.2
50	LVN	332.9	Alquilato	350.5	MTBE	369.9
51	LVN	332.9	Alquilato	350.5	TAME	365.3
52	LVN	332.9	Alquilato	350.5	Nafta Tops	339.6
53	LVN	332.9	Alquilato	350.5	Butano	310.5
54	LVN	332.9	Alquilato	350.5	Etanol	395.2
55	LVN	332.9	MTBE	369.9	TAME	365.3
56	LVN	332.9	MTBE	369.9	Nafta Tops	339.6
57	LVN	332.9	MTBE	369.9	Butano	310.5
58	LVN	332.9	MTBE	369.9	Etanol	395.2
59	LVN	332.9	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6
60	LVN	332.9	TAME	365.3	Butano	310.5
61	LVN	332.9	TAME	365.3	Etanol	395.2
62	LVN	332.9	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5
63	LVN	332.9	Nafta Tops	339.6	Etanol	395.2
64	LVN	332.9	Butano	310.5	Etanol	395.2
65	LKN	331.2	HCCN	377.0	Alquilato	350.5
66	LKN	331.2	HCCN	377.0	MTBE	369.9
67	LKN	331.2	HCCN	377.0	TAME	365.3
68	LKN	331.2	HCCN	377.0	Nafta Tops	339.6
69	LKN	331.2	HCCN	377.0	Butano	310.5
70	LKN	331.2	HCCN	377.0	Etanol	395.2
71	LKN	331.2	Alquilato	350.5	MTBE	369.9
72	LKN	331.2	Alquilato	350.5	TAME	365.3
73	LKN	331.2	Alquilato	350.5	Nafta Tops	339.6
74	LKN	331.2	Alquilato	350.5	Butano	310.5
75	LKN	331.2	Alquilato	350.5	Etanol	395.2
76	LKN	331.2	MTBE	369.9	TAME	365.3
77	LKN	331.2	MTBE	369.9	Nafta Tops	339.6
78	LKN	331.2	MTBE	369.9	Butano	310.5
79	LKN	331.2	MTBE	369.9	Etanol	395.2

Tabla No 28. Masas calculadas para mezclas de tres (3) componentes. (Continuación)

Mezcla	Componente 1	Masa [g]	Componente 2	Masa [g]	Componente 3	Masa [g]
79	LKN	331.2	MTBE	369.9	Etanol	395.2
80	LKN	331.2	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6
81	LKN	331.2	TAME	365.3	Butano	310.5
82	LKN	331.2	TAME	365.3	Etanol	395.2
83	LKN	331.2	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5
84	LKN	331.2	Nafta Tops	339.6	Etanol	395.2
85	LKN	331.2	Butano	310.5	Etanol	395.2
86	HCCN	377.0	Alquilato	350.5	MTBE	369.9
87	HCCN	377.0	Alquilato	350.5	TAME	365.3
88	HCCN	377.0	Alquilato	350.5	Nafta Tops	339.6
89	HCCN	377.0	Alquilato	350.5	Butano	310.5
90	HCCN	377.0	Alquilato	350.5	Etanol	395.2
91	HCCN	377.0	MTBE	369.9	TAME	365.3
92	HCCN	377.0	MTBE	369.9	Nafta Tops	339.6
93	HCCN	377.0	MTBE	369.9	Butano	310.5
94	HCCN	377.0	MTBE	369.9	Etanol	395.2
95	HCCN	377.0	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6
96	HCCN	377.0	TAME	365.3	Butano	310.5
97	HCCN	377.0	TAME	365.3	Etanol	395.2
98	HCCN	377.0	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5
99	HCCN	377.0	Nafta Tops	339.6	Etanol	395.2
100	HCCN	377.0	Butano	310.5	Etanol	395.2
101	Alquilato	350.5	MTBE	369.9	TAME	365.3
102	Alquilato	350.5	MTBE	369.9	Nafta Tops	339.6
103	Alquilato	350.5	MTBE	369.9	Butano	310.5
104	Alquilato	350.5	MTBE	369.9	Etanol	395.2
105	Alquilato	350.5	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6
106	Alquilato	350.5	TAME	365.3	Butano	310.5
107	Alquilato	350.5	TAME	365.3	Etanol	395.2
108	Alquilato	350.5	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5
109	Alquilato	350.5	Nafta Tops	339.6	Etanol	395.2
110	Alquilato	350.5	Butano	310.5	Etanol	395.2
111	MTBE	369.9	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6
112	MTBE	369.9	TAME	365.3	Butano	310.5
113	MTBE	369.9	TAME	365.3	Etanol	395.2
114	MTBE	369.9	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5
115	MTBE	369.9	Nafta Tops	339.6	Etanol	395.2
116	MTBE	369.9	Butano	310.5	Etanol	395.2
117	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5
118	TAME	365.3	Nafta Tops	339.6	Etanol	395.2
119	TAME	365.3	Butano	310.5	Etanol	395.2
120	Nafta Tops	339.6	Butano	310.5	Etanol	395.2

Tabla No 29. Masas calculadas para mezclas de ocho (8) componentes

Mezcla	Componente 1	Masa [g]	Componente 2	Masa [g]	Componente 3	Masa [g]	Componente 4	Masa [g]	Componente 5
121	LVN	124.8	LKN	124.2	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	MTBE
122	LVN	124.8	LKN	124.2	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	MTBE
123	LVN	124.8	LKN	124.2	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	MTBE
124	LVN	124.8	LKN	124.2	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	MTBE
125	LVN	124.8	LKN	124.2	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	TAME
126	LVN	124.8	LKN	124.2	HCCN	141.4	MTBE	138.7	TAME
127	LVN	124.8	LKN	124.2	Alquilato	131.4	MTBE	138.7	TAME
128	LVN	124.8	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	MTBE	138.7	TAME
129	LKN	124.2	HCCN	141.4	Alquilato	131.4	MTBE	138.7	TAME

Tabla No 30. Masas calculadas para mezclas de ocho (8) componentes.

(Continuación)

Mezcla	Componente 5	Masa [g]	Componente 6	Masa [g]	Componente 7	Masa [g]	Componente 8	Masa [g]
121	MTBE	138.7	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4
122	MTBE	138.7	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Etanol	148.2
123	MTBE	138.7	TAME	137.0	Butano	116.4	Etanol	148.2
124	MTBE	138.7	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4	Etanol	148.2
125	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4	Etanol	148.2
126	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4	Etanol	148.2
127	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4	Etanol	148.2
128	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4	Etanol	148.2
129	TAME	137.0	Nafta Tops	127.4	Butano	116.4	Etanol	148.2

Tabla No 31. Masas calculadas para mezclas de nueve (9) componentes

Mezcla	Componente 1	Masa [g]	Componente 2	Masa [g]	Componente 3	Masa [g]	Componente 4	Masa [g]	Componente 5	Masa [g]
130	LVN	111.0	LKN	110.4	HCCN	125.7	Alquilato	116.8	MTBE	123.3

Tabla No 32. Masas calculadas para mezclas de nueve (9) componentes.

(Continuación)

Mezcla	Componente 6	Masa [g]	Componente 7	Masa [g]	Componente 8	Masa [g]	Componente 9	Masa [g]
130	TAME	121.8	Nafta Tops	113.2	Butano	103.5	Etanol	131.8

APÉNDICE C

RESULTADOS OBTENIDOS PARA CADA MEZCLA DE LA MATRIZ DE EXPERIMENTOS

A continuación se muestran los resultados obtenidos en cada uno de los respectivos ensayos que comprendían la determinación de las propiedades evaporativas y antidetonantes.

Tabla No 33. Resultados de los ensayos de determinación de octanajes RON, MON, IAD y sensibilidad

MEZCLA	RON (Adm)	MON (Adm)	IAD	Sensibilidad
1	78.5	73.3	75.9	5.2
2	80.0	78.0	79.0	2.0
3	78.0	80.0	79.0	-2.0
4	97.0	90.5	93.8	6.5
5	84.4	82.0	83.2	2.4
6	67.0	67.0	67.0	0.0
8	101.3	90.2	95.8	11.1
9	86.2	77.6	81.9	8.6
10	89.3	82.7	86.0	6.6
11	98.4	87.5	93.0	10.9
12	90.3	82.0	86.2	8.3
13	75.9	72.9	74.4	3.0
15	100.2	85.9	93.1	14.3
16	91.3	85.0	88.2	6.3
17	100.6	90.1	95.4	10.5
18	92.0	84.9	88.5	7.1
19	80.0	74.5	77.3	5.5
21	100.6	87.7	94.2	12.9
22	88.1	80.3	84.2	7.8
23	96.3	89.5	92.9	6.8
24	78.0	78.0	78.0	0.0
26	104.5	93.7	99.1	10.8
27	103.6	93.3	98.5	10.3
28	95.4	88.9	92.2	6.5
30	104.7	94.8	99.8	9.9
31	82.5	78.5	80.5	4.0
33	102.6	90.2	96.4	12.4

Tabla No 34. Resultados de los ensayos de determinación de octanajes RON, MON, IAD y Sensibilidad (Continuación)

MEZCLA	RON (Adm)	MON (Adm)	IAD	Sensibilidad
35	99.5	68.5	84.0	31.0
37	83.3	76.5	79.9	6.8
38	79.4	79.3	79.4	0.1
39	92.3	84.9	88.6	7.4
40	85.0	79.6	82.3	5.4
41	76.0	72.0	74.0	4.0
43	95.3	85.1	90.2	10.2
44	84.7	81.2	83.0	3.5
45	93.0	83.5	88.3	9.5
46	86.0	80.5	83.3	5.5
47	78.8	74.2	76.5	4.6
49	95.7	85.7	90.7	10.0
50	95.1	90.6	92.9	4.5
51	87.2	85.2	86.2	2.0
52	78.9	75.1	77.0	3.8
54	101.0	89.9	95.5	11.1
55	96.1	89.4	92.8	6.7
56	87.5	83.6	85.6	3.9
58	103.0	90.5	96.8	12.5
59	79.1	76.8	78.0	2.3
61	100.2	88.5	94.4	11.7
63	95.2	86.4	90.8	8.8
65	88.9	82.0	85.5	6.9
66	95.8	84.9	90.4	10.9
67	90.3	81.2	85.8	9.1
68	81.4	77.0	79.2	4.4
70	98.3	84.4	91.4	13.9
71	98.3	89.6	94.0	8.7
72	92.0	85.0	88.5	7.0
73	81.5	78.0	79.8	3.5
75	100.4	88.8	94.6	11.6
76	98.6	87.7	93.2	10.9
77	91.5	84.0	87.8	7.5
79	102.0	89.4	95.7	12.6
80	78.5	73.3	75.9	5.2
82	99.5	85.8	92.7	13.7
84	96.0	84.0	90.0	12.0
86	99.1	89.2	94.2	9.9

Tabla No 35. Resultados de los ensayos de determinación de octanajes RON, MON, IAD y Sensibilidad (Continuación)

MEZCLA	RON (Adm)	MON (Adm)	IAD	Sensibilidad
87	94.0	86.5	90.3	7.5
88	81.2	80.8	81.0	0.4
90	100.5	88.5	94.5	12.0
91	99.8	88.1	94.0	11.7
92	93.5	84.8	89.2	8.7
94	102.3	89.5	95.9	12.8
95	83.7	80.6	82.2	3.1
97	100.1	87.6	93.9	12.5
99	96.8	85.5	91.2	11.3
101	101.5	92.0	96.8	9.5
102	94.0	89.2	91.6	4.8
104	103.8	92.8	98.3	11.0
105	86.4	83.4	84.9	3.0
107	102.8	90.7	96.8	12.1
109	100.2	89.0	94.6	11.2
111	96.8	88.1	92.5	8.7
113	104.0	91.3	97.7	12.7
115	102.6	90.2	96.4	12.4
118	96.0	84.0	90.0	12.0
121	91.9	84.2	88.1	7.7
122	95.4	86.0	90.7	9.4
123	-	86.7	43.4	-86.7
124	96.5	86.1	91.3	10.4
125	94.6	84.4	89.5	10.2
126	96.6	85.6	91.1	11.0
127	97.6	87.2	92.4	10.4
128	98.2	87.1	92.7	11.1
129	98.0	86.9	92.5	11.1
130	95.6	86.5	91.1	9.1

Tabla No 36. Resultados del ensayo de perfil de destilación

MEZCLAS	Destilación						
	P.I.E	T10 (°C)	T50 (°C)	T90 (°C)	P.F.E	RES (%V)	E70 (%V)
1	36.7	44.3	53.1	78.2	109.4	0.7	81.9
2	36.5	50.7	77.8	167.3	210.9	0.7	42.0
3	39.0	56.1	82.7	124.3	209.9	0.7	33.7
4	41.0	47.9	54.5	70.3	109.9	0.8	89.8
5	41.8	55.6	69.0	91.5	129.8	1.0	52.5
6	37.6	48.5	62.3	92.4	125.6	0.8	64.4
8	37.1	46.2	70.1	78.2	82.6	0.7	49.8
9	36.4	48.4	68.6	166.4	211.1	0.8	52.0
10	40.4	52.7	75.3	122.0	207.9	0.8	43.3
11	41.3	47.0	51.9	59.9	83.0	0.7	97.0
12	41.5	53.5	64.7	85.9	125.1	1.0	63.8
13	38.0	46.8	57.4	83.2	117.8	0.9	74.8
15	37.0	44.1	66.3	78.4	80.0	0.2	53.8
16	44.1	73.0	108.8	178.8	222.1	0.8	7.8
17	45.3	54.6	67.0	168.1	212.4	1.0	54.7
18	48.8	67.9	88.1	169.5	211.9	0.8	13.8
19	38.5	55.8	84.0	167.0	211.6	1.0	32.6
21	48.7	64.7	77.4	167.0	222.7	0.8	18.8
22	51.6	60.0	72.2	125.1	202.5	0.7	45.2
23	55.1	74.1	88.1	127.3	209.2	0.8	4.4
24	42.7	61.3	86.6	125.9	201.0	1.2	23.5
26	59.2	68.4	74.2	78.4	203.1	0.9	15.0
27	54.3	59.4	64.2	85.7	130.9	0.9	72.6
28	43.8	50.9	58.3	79.3	122.9	0.6	84.0
30	55.7	61.0	68.0	78.3	82.9	0.1	56.5
31	44.7	60.0	72.9	94.6	135.5	1.0	40.5
33	57.7	64.5	73.5	77.8	118.5	0.7	33.7
35	39.9	51.4	70.1	78.3	81.4	0.1	49.8
37	36.6	47.7	64.9	146.1	208.2	0.9	56.6
38	38.2	50.3	68.6	112.2	189.8	1.2	52.0
39	38.9	46.1	52.9	69.4	109.1	0.5	90.4
40	39.7	50.8	62.4	86.6	122.8	1.1	66.7
41	37.2	46.6	57.7	85.1	116.5	0.8	73.6
43	37.2	41.6	55.2	78.1	83.0	0.1	73.0
44	39.1	57.3	90.9	164.8	217.1	0.9	27.7
45	39.6	50.0	63.0	148.4	208.1	0.9	62.3
46	43.3	56.8	77.6	150.5	220.8	0.7	37.3
47	38.4	50.9	72.6	146.5	216.1	0.8	46.7

Tabla No 37. Resultados del ensayo de perfil de destilación (Continuación)

MEZCLAS	Destilación						
	P.I.E	T10 (°C)	T50 (°C)	T90 (°C)	P.F.E	RES (%V)	E70 (%V)
49	39.2	50.7	69.8	147.4	207.0	0.9	50.2
50	41.9	52.8	64.8	111.8	191.7	1.2	57.3
51	45.1	60.2	79.8	115.5	211.0	0.7	30.5
52	39.8	54.5	76.4	115.2	203.8	1.0	40.4
54	32.4	53.3	69.4	76.7	188.3	1.1	52.5
55	44.0	54.4	62.2	85.6	124.4	1.0	73.2
56	39.3	48.7	57.5	82.5	117.0	0.7	80.6
58	41.3	50.2	61.4	77.8	82.2	0.1	73.7
59	40.8	54.0	68.3	92.8	130.8	0.9	54.0
61	42.5	52.4	66.4	76.8	112.7	0.6	60.7
63	39.1	47.3	61.2	77.3	81.5	0.2	71.8
65	39.1	55.0	85.8	163.8	214.3	0.8	33.4
66	39.9	49.1	60.2	149.2	207.1	1.0	67.5
67	39.9	55.0	73.8	150.7	208.6	1.0	44.1
68	37.1	49.4	68.3	145.4	208.0	0.8	52.2
70	39.1	48.6	69.3	148.8	206.4	0.8	51.2
71	41.6	51.7	62.9	113.0	189.9	1.3	63.0
72	43.6	58.5	76.3	113.9	192.7	1.1	37.6
73	40.1	52.8	72.6	113.9	206.0	0.9	46.0
75	40.6	51.9	68.2	77.3	193.0	1.0	56.0
76	44.4	52.6	60.1	80.0	124.6	0.9	79.8
77	40.6	48.1	55.7	74.7	125.3	0.6	87.4
79	42.2	49.3	59.7	78.2	79.4	0.1	73.5
80	41.1	52.7	65.3	88.5	136.0	0.7	61.8
82	42.8	51.3	64.6	77.1	90.5	0.5	63.0
84	37.2	45.5	58.6	77.9	81.9	0.1	72.0
86	44.7	59.6	80.9	161.7	218.4	0.1	33.6
87	49.6	70.7	93.8	166.1	216.6	0.8	9.0
88	41.2	61.3	93.1	163.5	217.9	0.8	21.3
90	50.2	64.2	74.3	164.7	217.9	0.9	25.0
91	48.6	59.0	71.2	151.3	207.7	0.9	47.0
92	41.5	54.0	65.9	145.9	206.6	0.9	58.0
94	48.7	59.1	69.2	148.8	206.0	0.7	53.7
95	42.5	59.9	79.8	146.7	205.5	0.7	30.8
97	50.3	61.6	73.0	148.2	208.5	0.8	37.0
99	39.7	53.4	71.0	147.0	206.3	0.8	47.0
101	52.0	62.3	73.4	113.4	194.8	1.1	40.0
102	44.2	55.5	69.3	113.4	197.2	0.9	51.6
104	54.6	61.6	67.9	77.0	196.1	0.6	62.7

Tabla No 38. Resultados del ensayo de perfil de destilación (Continuación)

MEZCLAS	Destilación						
	P.I.E	T10 (°C)	T50 (°C)	T90 (°C)	P.F.E	RES (%V)	E70 (%V)
105	45.3	64.3	82.0	116.2	195.5	1.0	21.8
107	56.2	64.8	71.6	88.3	200.2	1.0	37.5
109	44.3	57.3	69.7	76.5	200.0	1.1	51.5
111	46.0	56.1	64.6	88.2	130.9	0.9	68.0
113	55.1	59.9	65.6	76.8	87.5	0.7	68.0
115	44.9	53.1	62.4	77.5	81.4	0.1	75.0
118	46.1	56.2	67.6	76.6	79.4	0.9	59.0
121	34.4	49.9	69.4	122.9	201.4	0.8	51.2
122	42.0	52.2	62.8	115.3	200.3	0.8	72.4
123	35.1	50.0	63.9	118.6	202.4	0.5	73.4
124	28.0	38.6	59.7	116.5	200.9	0.7	78.4
125	25.7	38.5	61.8	116.2	198.9	0.7	71.7
126	27.4	37.0	57.9	98.4	189.9	0.8	82.3
127	28.2	39.3	59.1	94.5	161.1	1.2	83.1
128	28.8	42.1	63.3	117.9	200.1	1.1	71.6
129	29.2	41.6	62.4	117.2	198.0	1.0	74.2
130	28.0	38.0	60.0	113.2	195.5	1.0	74.9

Tabla No 39. Resultados del ensayo de presión de vapor e IBV

MEZCLA	Presión de vapor (psi)	I.B.V
1	11.23	21.9
2	8.81	14.3
3	8.09	12.5
4	10.04	21.7
5	8.11	14.9
6	10.46	18.8
8	10.85	17.3
9	9.15	15.9
10	8.34	14.0
11	10.34	23.0
12	8.58	16.9
13	10.69	20.4
15	11.13	18.1
16	4.81	5.8
17	7.25	14.4
18	5.28	7.1
19	8.12	12.4
21	6.29	8.7
22	6.32	12.2
23	4.63	5.2
24	6.90	10.0
26	4.52	6.5
27	6.47	15.9
28	9.16	20.1
30	5.75	13.1
31	7.40	12.7
33	4.96	9.3
35	9.33	15.8
37	9.88	17.2
38	9.43	16.2
39	10.75	22.5
40	9.51	18.2
41	10.89	20.5
43	11.61	21.1
44	7.42	11.0
45	9.10	17.2

Tabla No 40. Resultados del ensayo de presión de vapor. (Continuación)

MEZCLA	Presión de vapor (psi)	I.B.V
46	7.49	12.3
47	9.12	15.2
49	9.24	15.8
50	8.34	15.8
51	6.90	10.9
52	8.46	13.7
54	8.27	15.1
55	8.43	17.9
56	10.10	20.6
58	9.39	19.0
59	9.17	16.2
61	8.53	16.4
63	10.38	19.7
65	7.58	11.9
66	9.05	17.8
67	7.83	13.6
68	9.02	15.8
70	9.34	16.0
71	8.64	16.8
72	7.22	12.1
73	8.62	14.6
75	8.62	15.9
76	8.51	18.9
77	10.27	21.6
79	9.40	19.0
80	8.87	16.9
82	8.72	16.9
84	10.84	20.2
86	6.67	11.0
87	4.98	6.2
88	6.57	9.3
90	5.97	9.2
91	6.57	12.7
92	8.39	15.9
94	6.57	13.6
95	7.07	11.1
97	6.02	10.8
99	8.45	14.6
101	6.03	11.2
102	7.87	14.6

Tabla No 41. Resultados del ensayo de presión de vapor. (Continuación)

MEZCLA	Presión de vapor (psi)	I.B.V
104	5.73	13.9
105	6.36	9.2
107	5.14	10.0
109	7.72	14.4
111	7.86	16.7
113	6.09	14.9
115	8.46	18.2
118	7.64	15.3
121	10.08	16.7
122	8.41	17.8
123	10.01	19.6
124	15.08	25.3
125	15.39	24.7
126	15.71	26.4
127	14.87	25.7
128	14.32	23.6
129	14.12	23.8
130	10.46	20.2

Tabla No 42. Valores determinados de IBV, Sensibilidad e IAD

MEZCLA	I.B.V	Sensibilidad	IAD
1	21.9	5.2	75.9
2	14.3	2.0	79.0
3	12.5	-2.0	79.0
4	21.7	6.5	93.8
5	14.9	2.4	83.2
6	18.8	0.0	67.0
8	17.3	11.1	95.8
9	15.9	8.6	81.9
10	14.0	6.6	86.0
11	23.0	10.9	93.0
12	16.9	8.3	86.2
13	20.4	3.0	74.4
15	18.1	14.3	93.1
16	5.8	6.3	88.2
17	14.4	10.5	95.4
18	7.1	7.1	88.5
19	12.4	5.5	77.3
21	8.7	12.9	94.2
22	12.2	7.8	84.2
23	5.2	6.8	92.9
24	10.0	0.0	78.0
26	6.5	10.8	99.1
27	15.9	10.3	98.5
28	20.1	6.5	92.2
30	13.1	9.9	99.8
31	12.7	4.0	80.5
33	9.3	12.4	96.4
35	15.8	31.0	84.0
37	17.2	6.8	79.9
38	16.2	0.1	79.4
39	22.5	7.4	88.6
40	18.2	5.4	82.3
41	20.5	4.0	74.0
43	21.1	10.2	90.2
44	11.0	3.5	83.0
45	17.2	9.5	88.3
46	12.3	5.5	83.3
47	15.2	4.6	76.5
49	15.8	10.0	90.7
50	15.8	4.5	92.9
51	10.9	2.0	86.2

Tabla No 43. Valores determinados de IBV, Sensibilidad e IAD (Continuación)

MEZCLA	I.B.V	Sensibilidad	IAD
51	10.9	2.0	86.2
52	13.7	3.8	77.0
54	15.1	11.1	95.5
55	17.9	6.7	92.8
56	20.6	3.9	85.6
58	19.0	12.5	96.8
59	16.2	2.3	78.0
61	16.4	11.7	94.4
63	19.7	8.8	90.8
65	11.9	6.9	85.5
66	17.8	10.9	90.4
67	13.6	9.1	85.8
68	15.8	4.4	79.2
70	16.0	13.9	91.4
71	16.8	8.7	94.0
72	12.1	7.0	88.5
73	14.6	3.5	79.8
75	15.9	11.6	94.6
76	18.9	10.9	93.2
77	21.6	7.5	87.8
79	19.0	12.6	95.7
80	16.9	5.2	75.9
82	16.9	13.7	92.7
84	20.2	12.0	90.0
86	11.0	9.9	94.2
87	6.2	7.5	90.3
88	9.3	0.4	81.0
90	9.2	12.0	94.5
91	12.7	11.7	94.0
92	15.9	8.7	89.2
94	13.6	12.8	95.9
95	11.1	3.1	82.2
97	10.8	12.5	93.9
99	14.6	11.3	91.2
101	11.2	9.5	96.8
102	14.6	4.8	91.6
104	13.9	11.0	98.3
105	9.2	3.0	84.9
107	10.0	12.1	96.8

Tabla No 44. Valores determinados de IBV, Sensibilidad e IAD (Continuación)

MEZCLA	I.B.V	Sensibilidad	IAD
109	14.4	11.2	94.6
111	16.7	8.7	92.5
113	14.9	12.7	97.7
115	18.2	12.4	96.4
118	15.3	12.0	90.0
121	16.7	7.7	88.1
122	17.8	9.4	90.7
123	19.6	-86.7	43.4
124	25.3	10.4	91.3
125	24.7	10.2	89.5
126	26.4	11.0	91.1
127	25.7	10.4	92.4
128	23.6	11.1	92.7
129	23.8	11.1	92.5
130	20.2	9.1	91.1

APÉNDICE D

LISTA DE MEZCLAS ELIMINADAS DEL MODELO DE REGRESIÓN

A continuación se muestran en las Tablas N° 45, 46 y 47, mezclas que fueron eliminadas del modelo de regresión por considerar que afectaban de forma negativa la precisión del modelo al momento de realizar estimaciones.

Tabla N°45. Valores atípicos retirados del modelo de regresión lineal para las propiedades antidetonantes

RON		MON		IAD		Sensibilidad	
Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado
67.0	-2.26	67.0	-3.78	67	-2.36	9.9	-3.37
88.1	-4.34	80.3	-5.40	84.2	-5.55	31	12.3
104.7	-3.45	68.5	-6.30	99.8	-2.26	0.1	-3.27
96.8	-2.17	86.4	2.67	84	-2.45	11.1	2.09
104.0	-2.17	-	-	90.8	2.01	0.4	-3.01
-	-	-	-	97.7	-2.01	-	-
-	-	-	-	98.3	2.29	-	-

Tabla N°46. Valores atípicos retirados del modelo de regresión lineal para las propiedades evaporativas

RVP		PIE		T10		T50	
Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado
71.9	7.25	76.8	8.31	78	7.00	116.1	4.89
2.23	-4.18	32.4	-3.59	83.4	2.86	78.4	3.06
10.08	-5.44	46	3.16	56.1	3.41	108.8	2.32
10.01	-4.97	-	-	49.9	2.71	68	2.42
10.46	-3.81	-	-	50	2.28	74.3	-3.04
7.86	-2.43	-	-	-	-	-	-

Tabla N°47. Valores atípicos retirados del modelo de regresión lineal para las propiedades evaporativas (continuación)

T90		PFE		E70		IBV	
Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado	Valor Atípico	Residuo Estudentizado
189.0	-7.21	220.3	-4.08	0.0	-6.61	2.2	-7.52
78.4	-2.74	216.9	-3.07	68.0	-3.44	16.7	-4.69
76.7	-2.23	222.1	-3.11	11.3	-2.3	13.1	-2.03
76.5	-2.38	130.9	-3.27	51.5	2.16	19.6	-2.15
-	-	-	-	51.2	-3.1	26.8	2.39
-	-	-	-	72.4	2.54	16.7	-3.44

APÉNDICE E

COMPARACIÓN DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS PARA LAS MEZCLAS DE LA MATRIZ EXPERIMENTAL

En esta sección se muestran los resultados de la comparación de los modelos de regresión lineal y lineal, con respecto a lo obtenido en las propiedades evaporativas de cada una de las mezclas de la matriz experimental. Se muestran la gráficas comparativas obtenidas para todas las mezclas en cada uno de los niveles, y con respecto a los valores de desviación, se especifica mediante tres (3) mezclas escogidas de forma aleatoria el efecto de los modelos de predicción.

Asimismo, se indica para cada parámetro el porcentaje de errores de desviación superiores a 15% para el modelo de regresión lineal y el modelo lineal.

- **Resultados en mezclas de dos (2) componentes:**

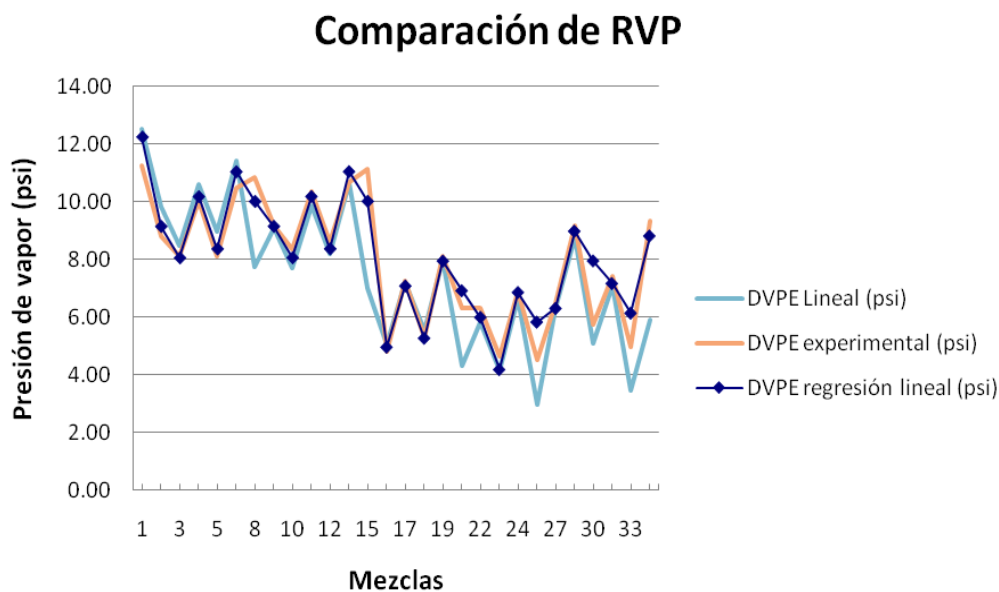


Figura N°17. Comparación de presión de vapor (RVP) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°48. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

PRESIÓN DE VAPOR					
Mezcla	DVPE Lineal (psi)	DVPE experimental (psi)	DVPE regresión lineal (psi)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	12.50	11.23	12.2	11.31	9.04
18	5.52	5.28	5.3	4.55	0.38
31	7.10	7.40	7.2	4.12	3.24

Tabla N°49. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en presión de vapor (RVP) para mezclas de dos (2) componentes

Presión de vapor (RVP)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
21.43	10.71

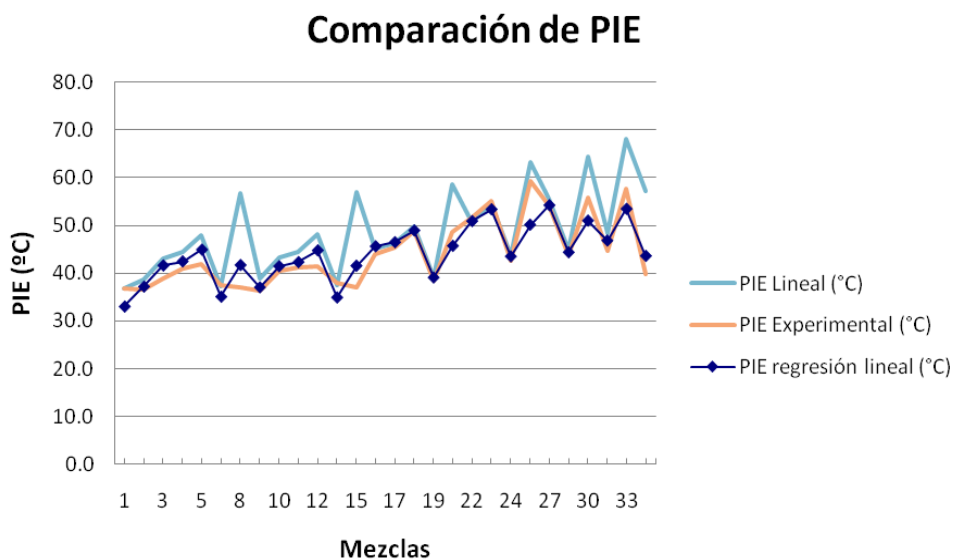


Figura N°18. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°50. Valores de punto inicial de ebullición (PIE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

PUNTO INICIAL DE EBULLICIÓN (PIE)					
Mezcla	PIE Lineal (°C)	PIE Experimental (°C)	PIE regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	36.9	36.7	33.1	0.54	9.95
18	49.9	48.8	48.9	2.15	0.20
31	48.5	44.7	46.8	8.39	4.70

Tabla N°51. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de dos (2) componentes

Punto inicial de ebullición (PIE)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
25.0	3.6

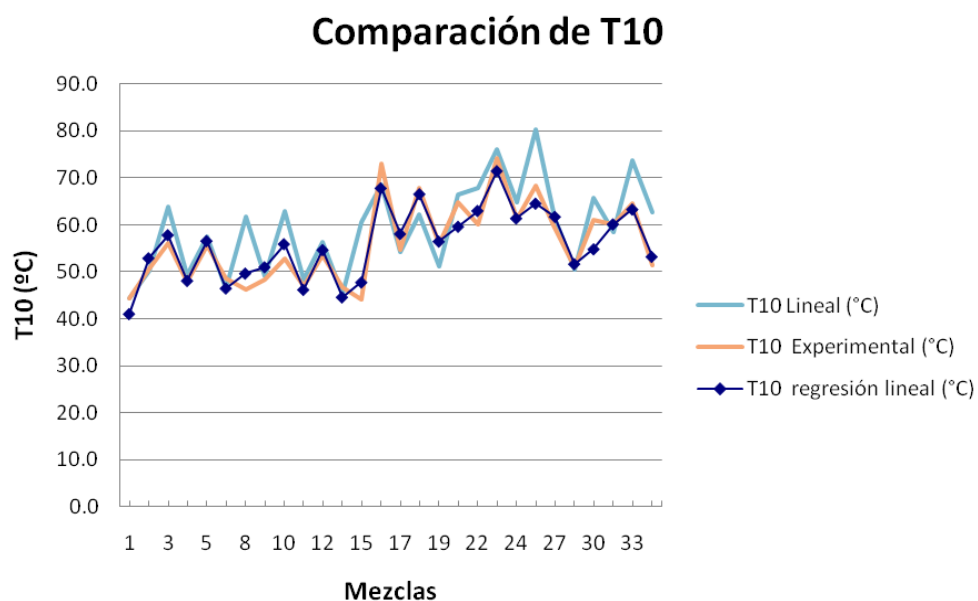


Figura N°19. Comparación de temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°52. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

TEMPERATURA A 10% DE DESTILADO (T10)					
Mezcla	T10 Lineal (°C)	T10 Experimental (°C)	T10 regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	44.3	44.3	41.1	0.00	7.22
18	62.3	67.9	66.6	8.32	1.99
31	58.5	60.0	60.1	2.50	0.25

Tabla N°53. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de dos (2) componentes

Temperatura a 10% de evaporado (T10)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
17.9	0.0

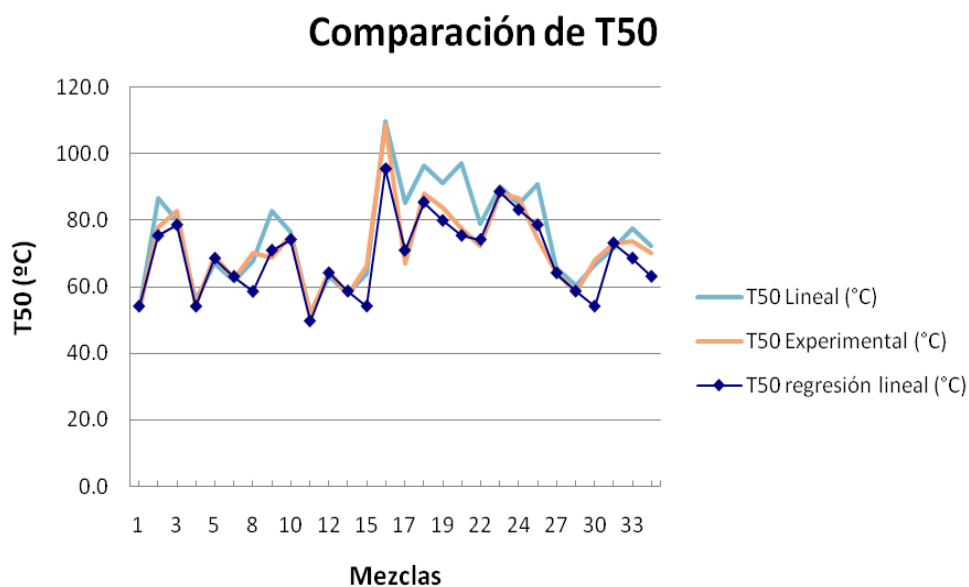


Figura N°20. Comparación de temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°54. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

TEMPERATURA A 50% DE DESTILADO (T50)					
Mezcla	T50 Lineal (°C)	T50 Experimental (°C)	T50 regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	53.3	53.1	54.0	0.28	1.73
18	96.5	88.1	85.3	9.48	3.18
31	71.6	72.9	73.0	1.78	0.16

Tabla N°55. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de dos (2) componentes

Temperatura a 50% de evaporado (T50)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
14.3	10.7

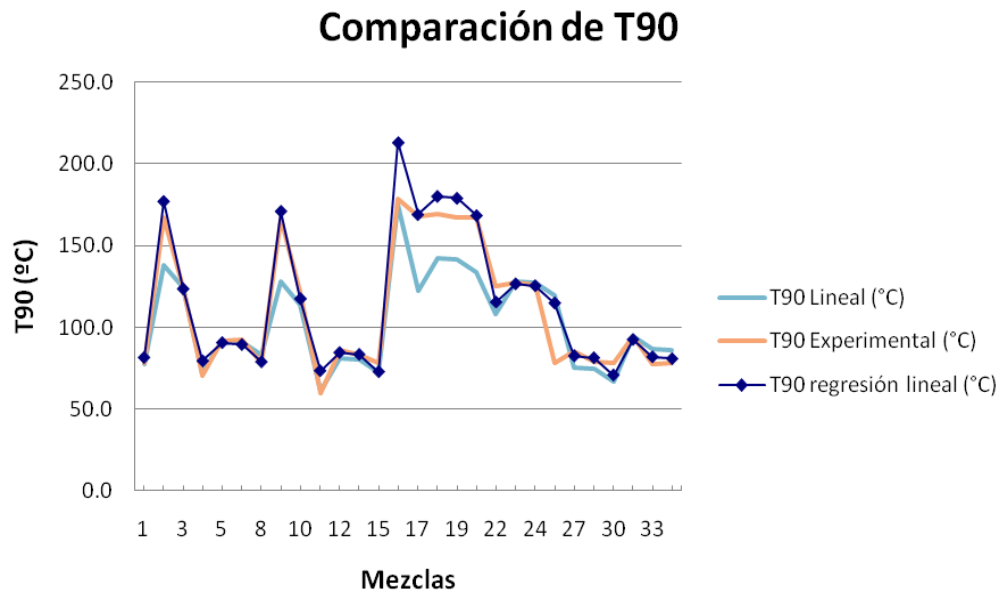


Figura N°21. Comparación de temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°56. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

TEMPERATURA A 90% DE DESTILADO (T90)					
Mezcla	T90 Lineal (°C)	T90 Experimental (°C)	T90 regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	77.4	78.2	81.5	1.02	4.21
18	142.2	169.5	180.2	16.11	6.33
31	94.7	94.6	92.5	0.05	2.17

Tabla N°57. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de dos (2) componentes

Temperatura a 90% de evaporado (T90)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
25.0	10.7

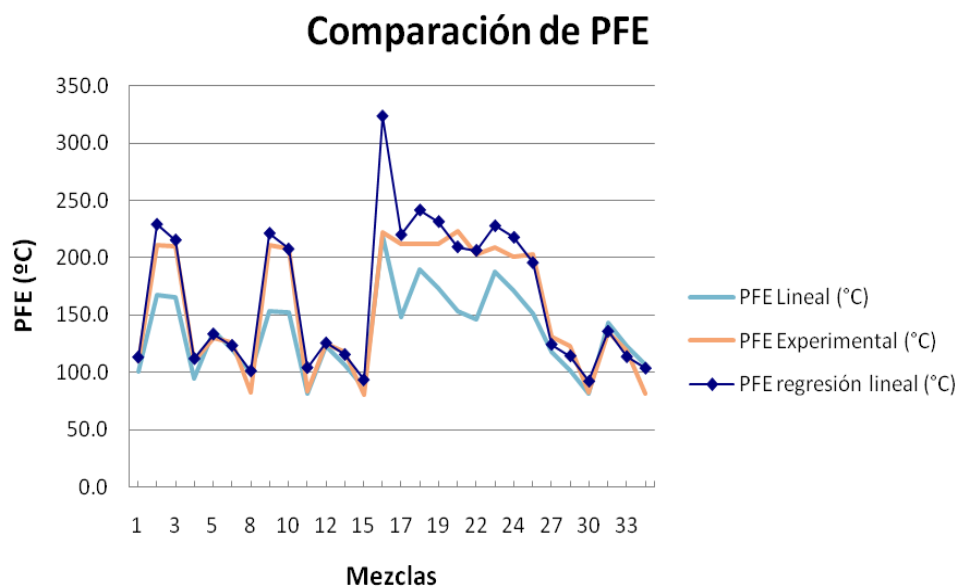


Figura N°22. Comparación de punto final de ebullición (PFE) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°58. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

PUNTO FINAL DE EBULLICIÓN (PFE)					
Mezcla	PFE Lineal (°C)	PFE Experimental (°C)	PFE regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	100.3	109.4	113.1	8.36	3.36
18	189.7	211.9	241.4	10.48	13.94
31	143.0	135.5	135.7	5.54	0.13

Tabla N°59. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto final de ebullición (PFE) para mezclas de dos (2) componentes

Punto final de ebullición (PFE)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
42.9	17.9

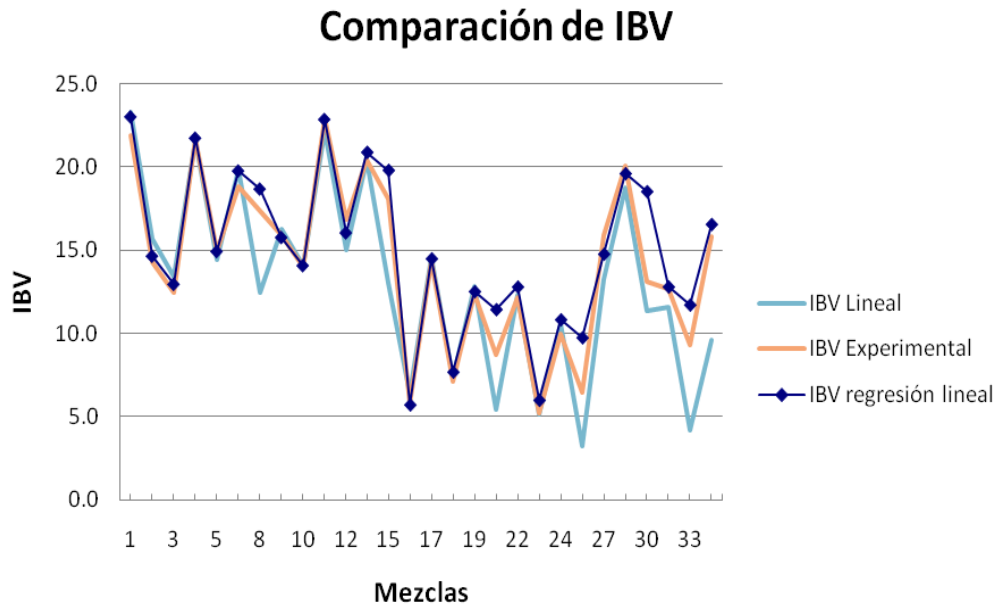


Figura N°23. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°60. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

ÍNDICE DE BLOQUEO POR VAPOR (IBV)					
Mezcla	IBV Lineal	IBV Experimental	IBV regresión lineal	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	23.3	21.9	23.0	6.52	5.14
18	7.4	7.1	7.7	4.04	8.76
31	11.5	12.7	12.8	8.82	1.08

Tabla N°61. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de dos (2) componentes

Índice de bloqueo por vapor	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
25.0	17.9

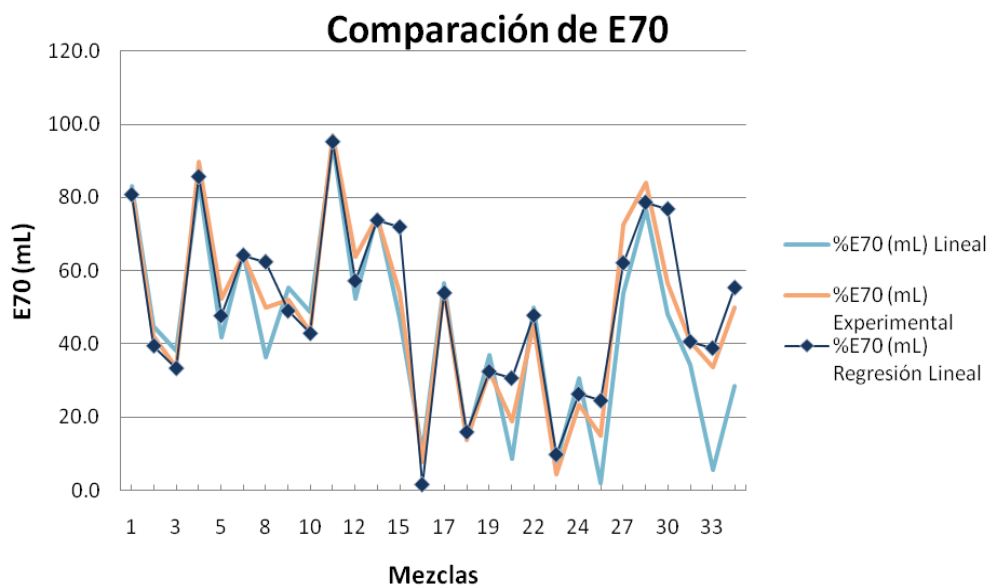


Figura N°24. Comparación de evaporado a 70°C (E70) para mezclas de dos (2) componentes

Tabla N°62. Valores de evaporado a 70°C (E70) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 1, 18 y 31

% EVAPORADO A 70 °C (E70)					
Mezcla	%E70 (mL) Lineal	%E70 (mL) Experimental	%E70 (mL) Regresión Lineal	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
1	83.1	81.9	80.8	1.47	1.28
18	14.2	13.8	15.9	2.54	15.22
31	34.3	40.5	40.6	15.43	0.37

Tabla N°63. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en evaporado a 70°C (E70) para mezclas de dos (2) componentes

Evaporado a 70°C (E70)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
39.3	32.1

- Resultados en mezclas de tres (3) componentes:

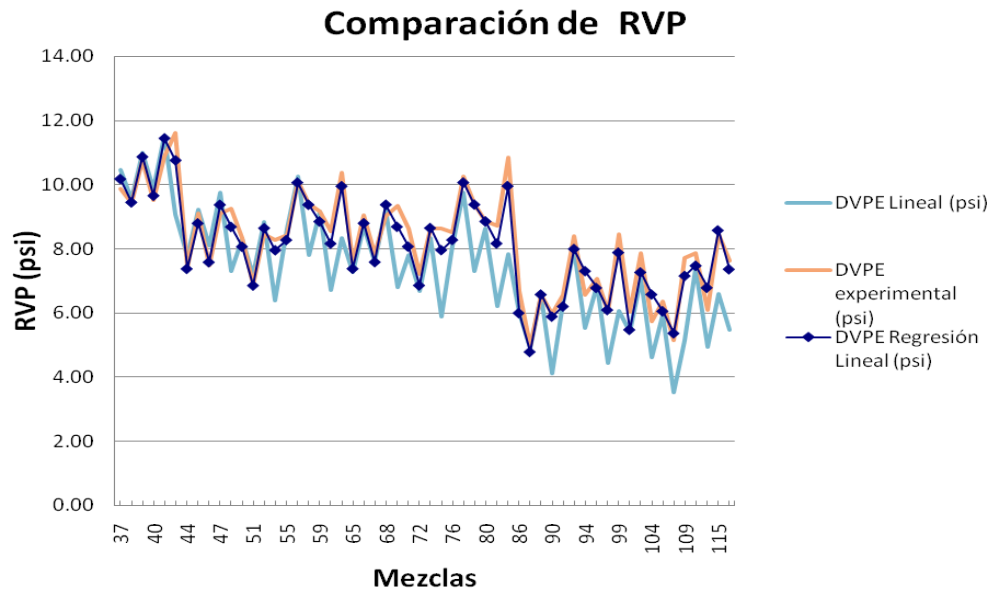


Figura N°25. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°64. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

PRESIÓN DE VAPOR					
Mezcla	DVPE Lineal (psi)	DVPE experimental (psi)	DVPE regresión lineal (psi)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	10.47	9.88	10.2	6.0	3.0
73	8.32	8.62	8.7	3.4	0.3
118	5.47	7.64	7.4	28.4	3.6

Tabla N°65. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en presión de vapor (RVP) para mezclas de tres (3) componentes

Presión de vapor (RVP)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
37.5	0.0

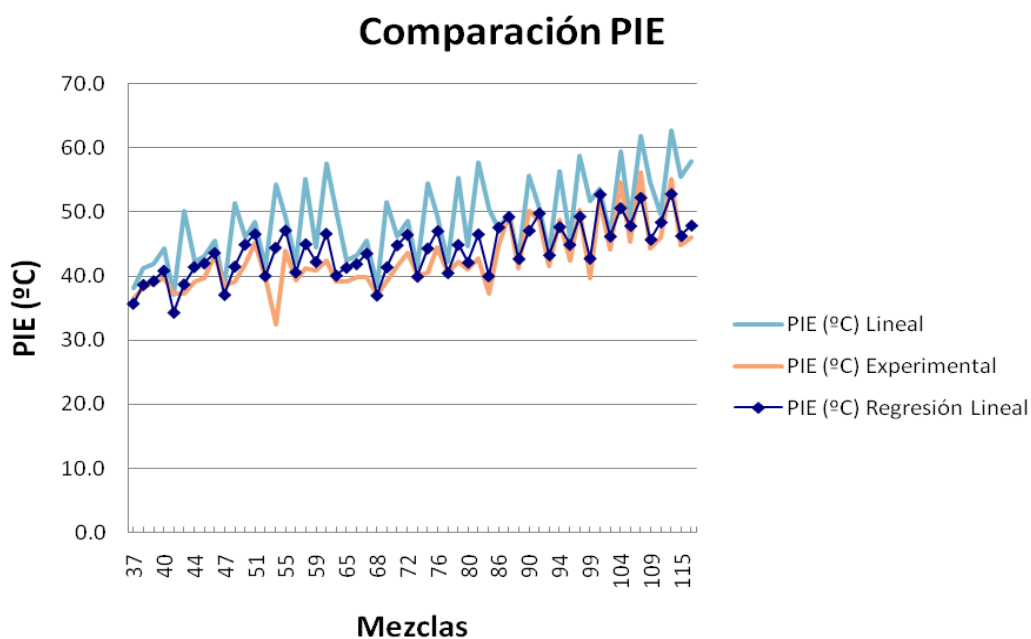


Figura N°26. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°66. Valores de punto inicial de ebullición (PIE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

PUNTO INICIAL DE EBULLICIÓN (PIE)					
Mezcla	PIE Lineal (°C)	PIE Experimental (°C)	PIE regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	38.1	36.6	35.8	4.1	2.3
73	41.5	40.1	40.0	3.4	0.3
118	57.9	46.1	47.9	25.6	4.0

Tabla N°67. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de tres (3) componentes

Punto inicial de ebullición (PIE)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
30.4	1.8

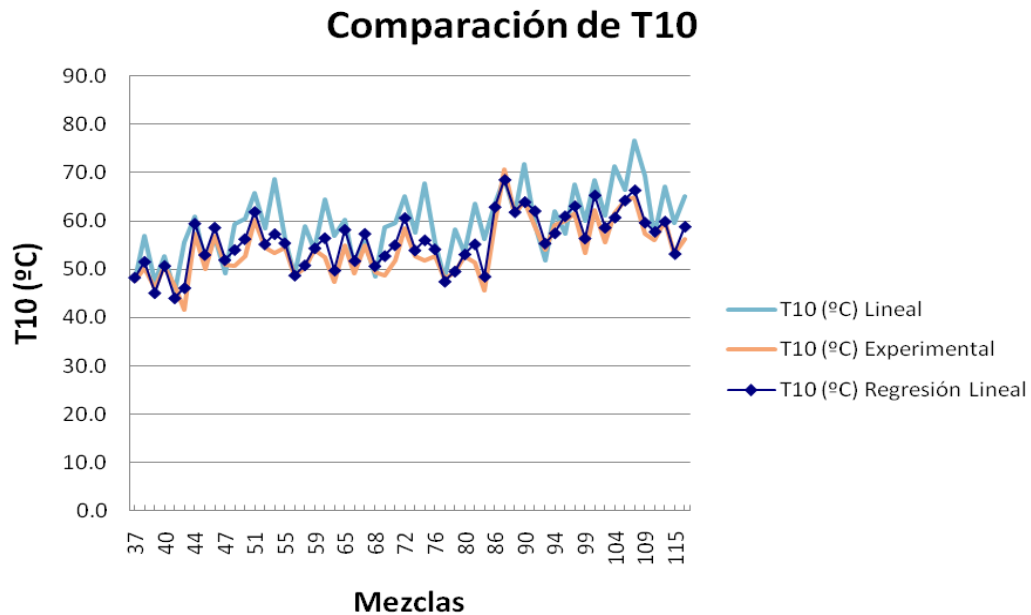


Figura N°27. Comparación de temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°68. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

TEMPERATURA A 10% DE DESTILADO (T10)					
Mezcla	T10 Lineal (°C)	T10 Experimental (°C)	T10 regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	47.8	47.7	48.4	0.3	1.4
73	57.7	52.8	54.0	9.2	2.3
118	65.0	56.2	58.9	15.7	4.8

Tabla N°69. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de tres (3) componentes

Temperatura a 10% de evaporado (T10)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
30.4	0.0

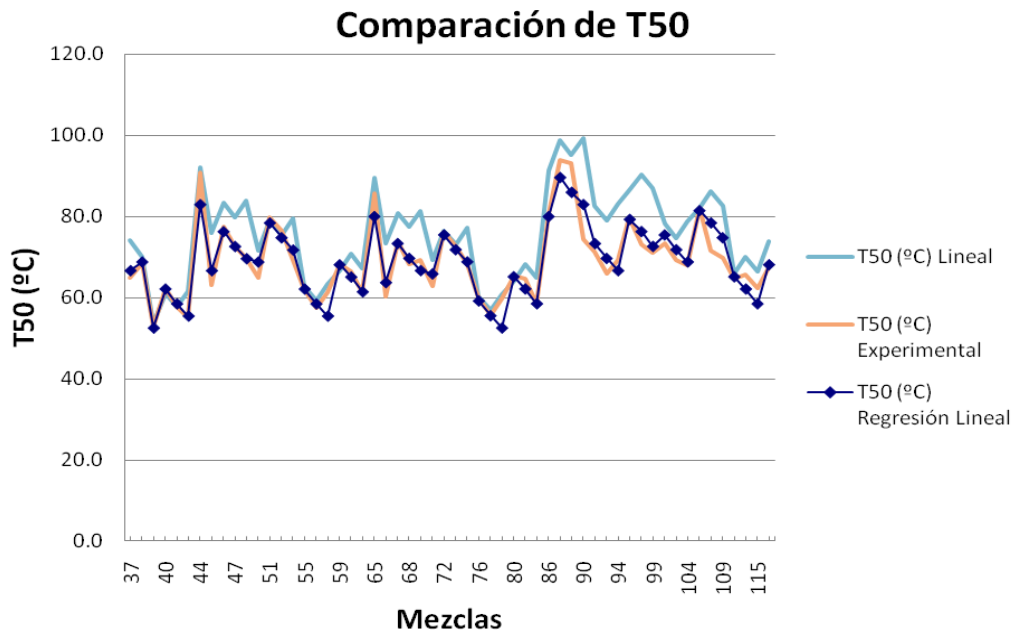


Figura N°28. Comparación de temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°70. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

TEMPERATURA A 50,% DE DESTILADO (T50)					
Mezcla	T50 Lineal (°C)	T50 Experimental (°C)	T50 regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	74.2	64.9	66.7	14.3	2.8
73	73.1	72.6	71.9	0.7	1.0
118	73.9	67.6	68.2	9.3	0.8

Tabla N°71. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de tres (3) componentes

Temperatura a 50% de evaporado (T50)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
23.2	0.0

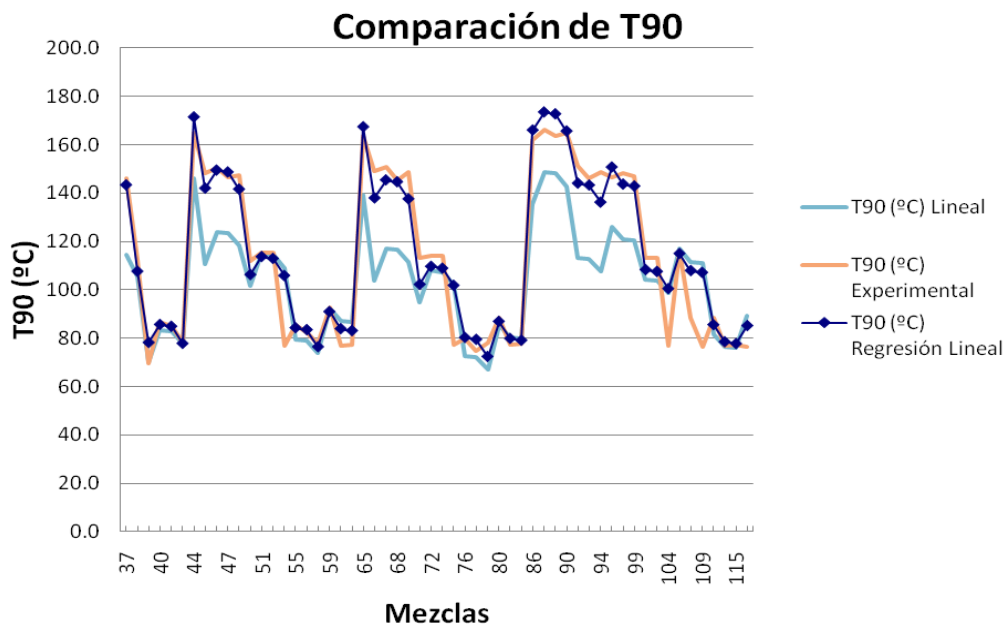


Figura N°29. Comparación de temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°72. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

TEMPERATURA A 90,% DE DESTILADO (T90)					
Mezcla	T90 Lineal (°C)	T90 Experimental (°C)	T90 regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	114.6	146.1	143.3	21.6	2.0
73	107.4	113.9	108.8	5.7	4.5
118	89.2	76.6	85.1	16.5	11.1

Tabla N°73. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de tres (3) componentes

Temperatura a 90% de evaporado (T90)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
41.1	8.9

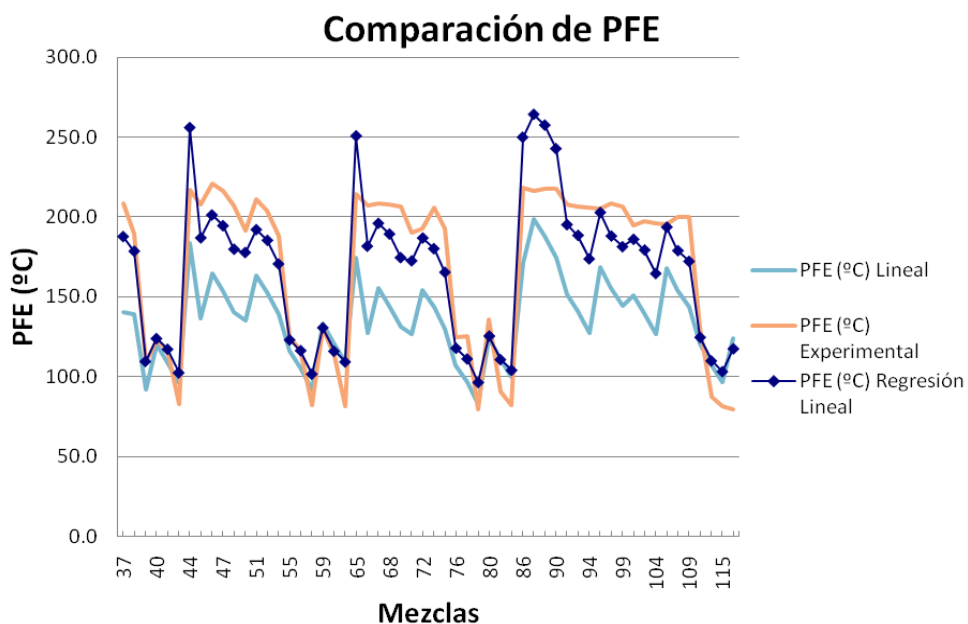


Figura N°30. Comparación de punto final de ebullición (PFE) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°74. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

PUNTO FINAL DE EBULLICIÓN (PFE)					
Mezcla	PFE Lineal (°C)	PFE Experimental (°C)	PFE regresión lineal (°C)	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	140.3	208.2	187.8	32.6	9.8
73	143.5	206.0	180.2	30.3	12.5
118	124.2	79.4	117.6	56.4	48.1

Tabla N°75. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto final de ebullición (PFE) para mezclas de tres (3) componentes

Punto final de ebullición (PFE)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
75.0	28.6

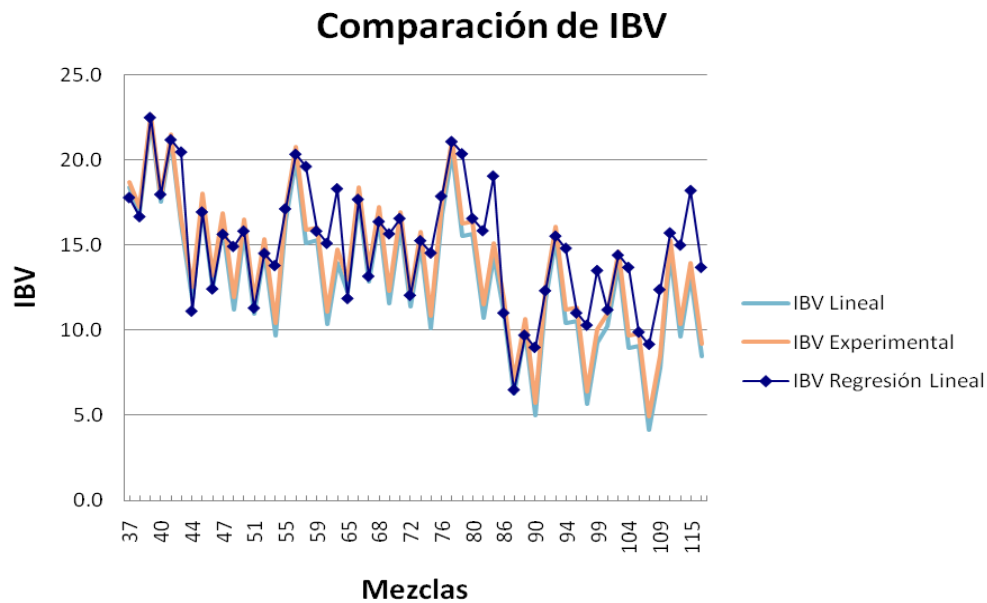


Figura N°31. Comparación de índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°76. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

ÍNDICE DE BLOQUEO POR VAPOR (IBV)					
Mezcla	IBV Lineal	IBV Experimental	IBV regresión lineal	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	18.4	18.7	17.8	1.6	4.8
73	15.0	15.0	15.3	0.0	1.6
118	8.4	8.4	13.7	0.0	62.2

Tabla N°77. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en índice de bloqueo por vapor (IBV) para mezclas de tres (3) componentes

Índice de bloqueo por vapor (IBV)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
1.8	39.3

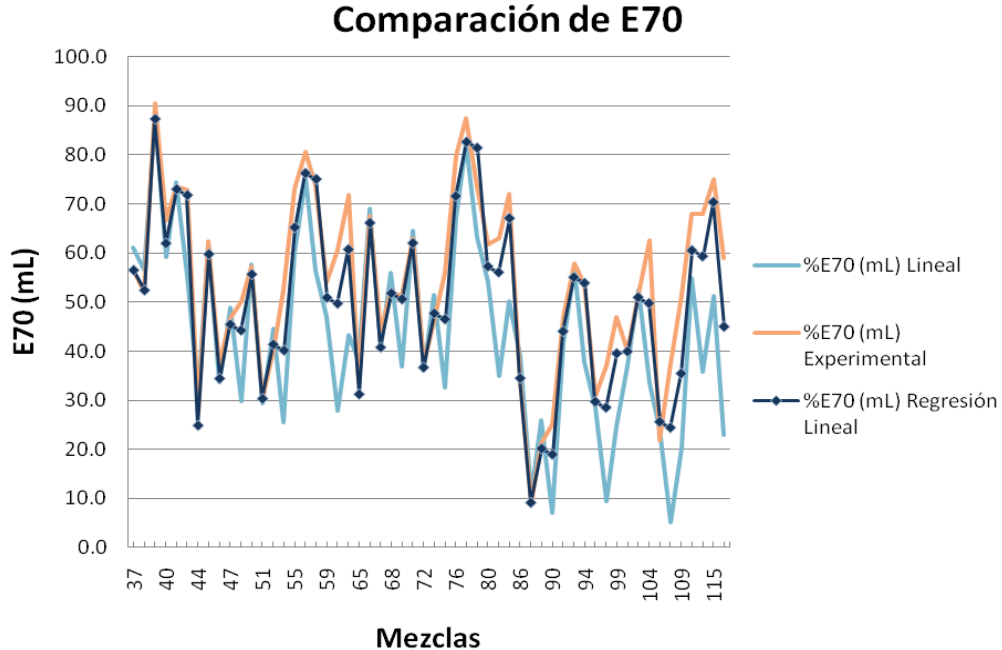


Figura N°32. Comparación de evaporado a 70°C (E70) para mezclas de tres (3) componentes

Tabla N°78. Valores de evaporado a 70°C (E70) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 37, 73 y 118

% EVAPORADO A 70 °C (E70)					
Mezcla	%E70 (mL) Lineal	%E70 (mL) Experimental	%E70 (mL) Regresión Lineal	% Error del modelo lineal	% Error de regresión lineal
37	61.1	56.6	56.5	7.9	0.2
73	51.6	46.0	47.7	12.1	3.6
118	22.8	59.0	45.0	61.3	23.8

Tabla N°79. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en evaporado a 70°C (E70) para mezclas de tres (3) componentes

Evaporado a 70°C (E70)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
46.4	21.4

- Resultados en mezclas de ocho (8) componentes:

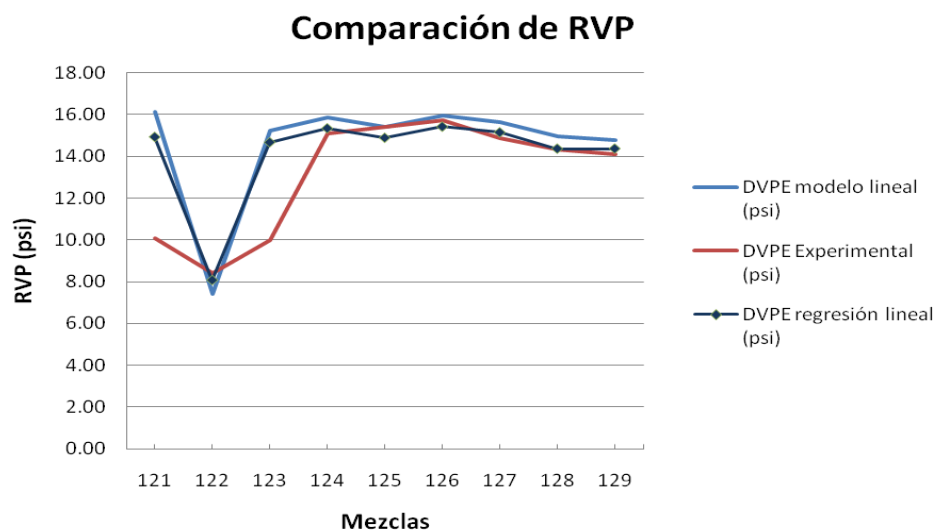


Figura N°33. Comparación de presión de vapor (RVP) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°80. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

PRESIÓN DE VAPOR					
Mezcla	DVPE modelo lineal (psi)	DVPE Experimental (psi)	DVPE regresión lineal (psi)	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	7.43	8.41	8.08	11.6	3.98
125	15.43	15.39	14.88	0.2	3.30
129	14.76	14.12	14.37	4.6	1.74

Tabla N°81. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en presión de vapor (RVP) para mezclas de ocho (8) componentes

Presión de vapor (RVP)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
22.2	22.2

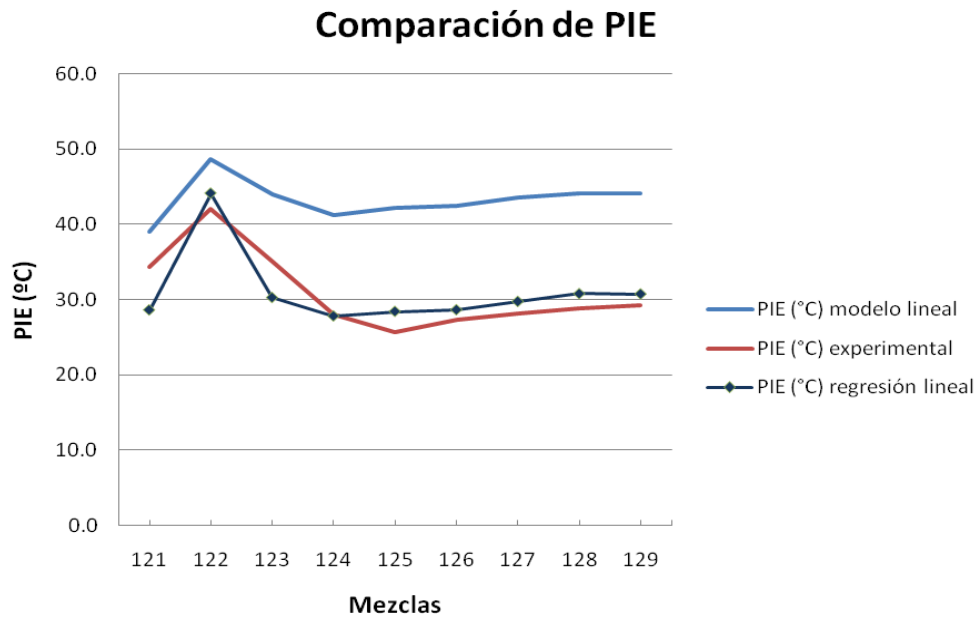


Figura N°34. Comparación de punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°82. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

PUNTO INICIAL DE EBULLICIÓN (PIE)					
Mezcla	PIE (°C) modelo lineal	PIE (°C) experimental	PIE (°C) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	48.7	42.0	44.1	16.0	5.00
125	42.2	25.7	28.4	64.2	10.60
129	44.1	29.2	30.7	51.1	5.27

Tabla N°83. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto inicial de ebullición (PIE) para mezclas de ocho (8) componentes

Punto inicial de ebullición (PIE)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
88.9	11.1

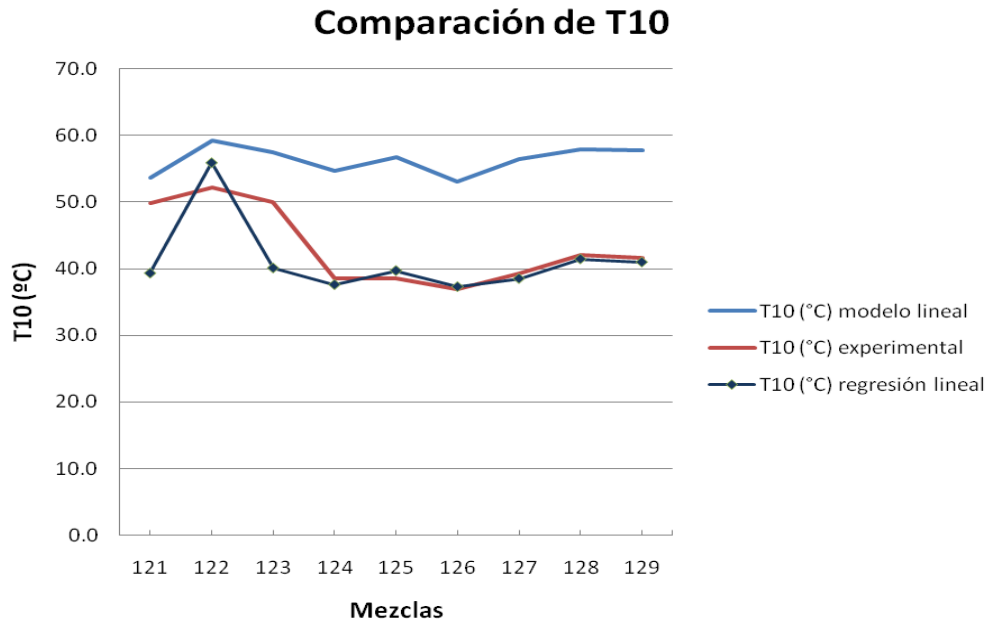


Figura N°35. Comparación de temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°84. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

TEMPERATURA A 10% DE DESTILADO (T10)					
Mezcla	T10 (°C) modelo lineal	T10 (°C) experimental	T10 (°C) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	59.3	52.2	56.0	13.6	7.23
125	56.7	38.5	39.7	47.3	3.12
129	57.7	41.6	41.0	38.7	1.47

Tabla N°85. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 10% de evaporado (T10) para mezclas de ocho (8) componentes

Temperatura a 10% de evaporado (T10)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
66.7	22.2

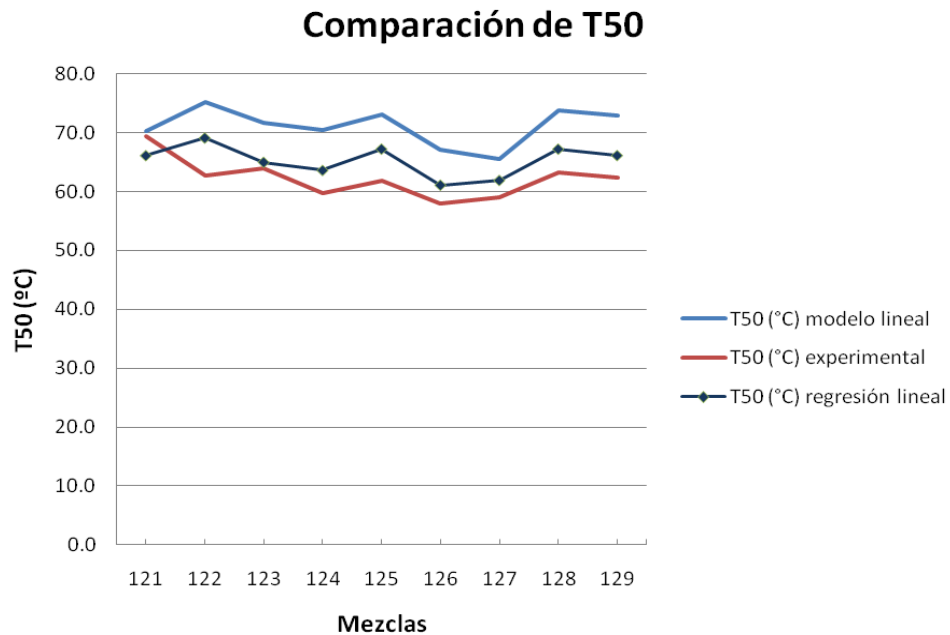


Figura N°36. Comparación de temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°86. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

TEMPERATURA A 50% DE DESTILADO (T50)					
Mezcla	T50 (°C) modelo lineal	T50 (°C) experimental	T50 (°C) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	75.3	62.8	69.1	19.8	10.02
125	73.2	61.8	67.2	18.4	8.77
129	72.9	62.4	66.1	16.8	5.96

Tabla N°87. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 50% de evaporado (T50) para mezclas de ocho (8) componentes

Temperatura a 50% de evaporado (T50)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
66.7	0.0

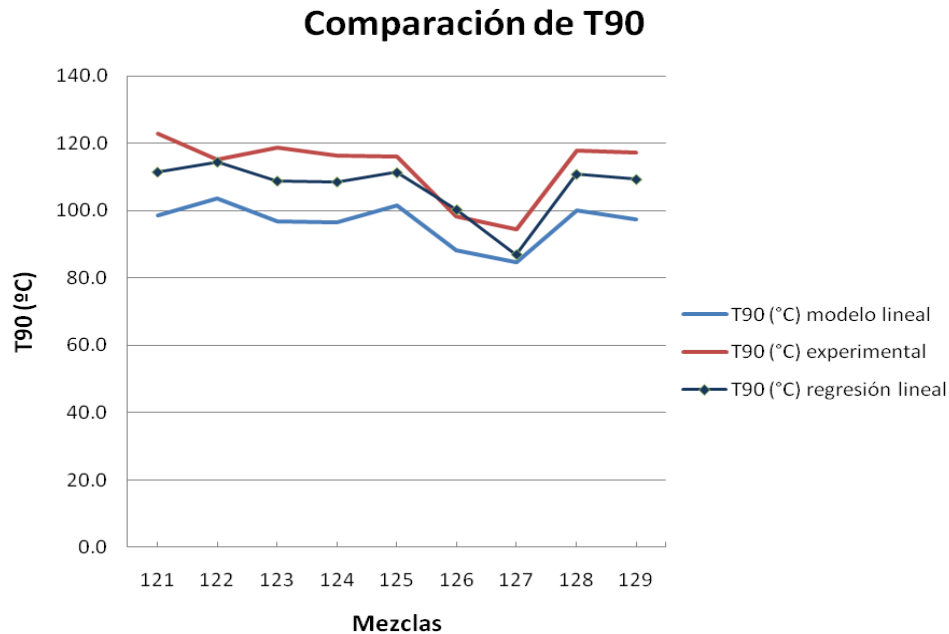


Figura N°37. Comparación de temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°88. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

TEMPERATURA A 90% DE DESTILADO (T90)					
Mezcla	T90 (°C) modelo lineal	T90 (°C) experimental	T90 (°C) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	103.6	115.3	114.5	10.2	0.69
125	101.5	116.2	111.4	12.7	4.14
129	97.5	117.2	109.4	16.8	6.69

Tabla N°89. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en temperatura a 90% de evaporado (T90) para mezclas de ocho (8) componentes

Temperatura a 90% de evaporado (T90)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
55.6	0.0

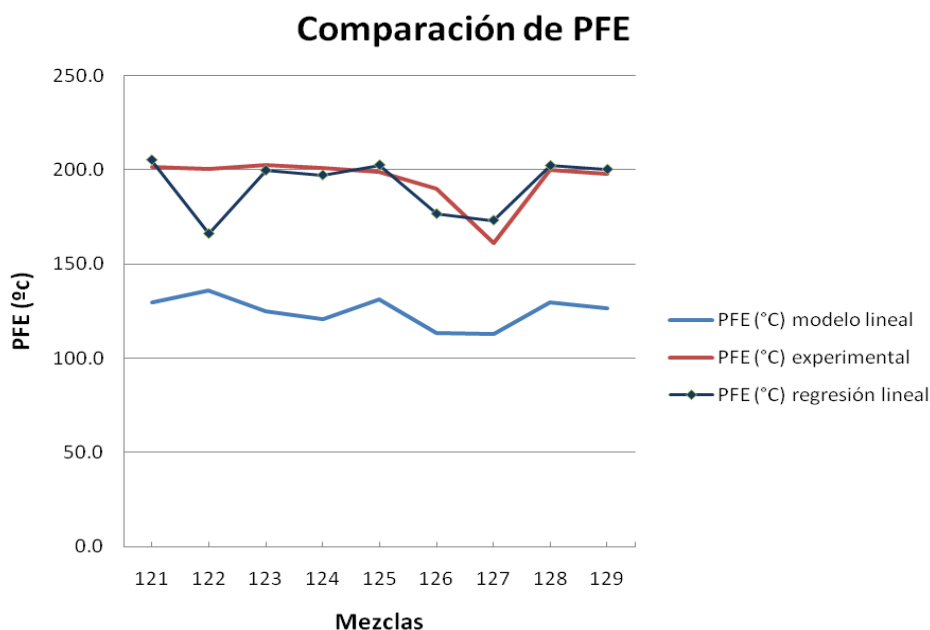


Figura N°38. Comparación de punto final de ebullición (PFE) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°90. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

PUNTO FINAL DE EBULLICIÓN (PFE)					
Mezcla	PFE (°C) modelo lineal	PFE (°C) experimental	PFE (°C) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	135.7	200.3	166.1	32.2	17.09
125	131.1	198.9	202.5	34.1	1.79
129	126.4	198.0	200.2	36.2	1.11

Tabla N°91. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en punto final de ebullición (PFE) para mezclas de ocho (8) componentes

Punto final de ebullición (PFE)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
100.0	11.1

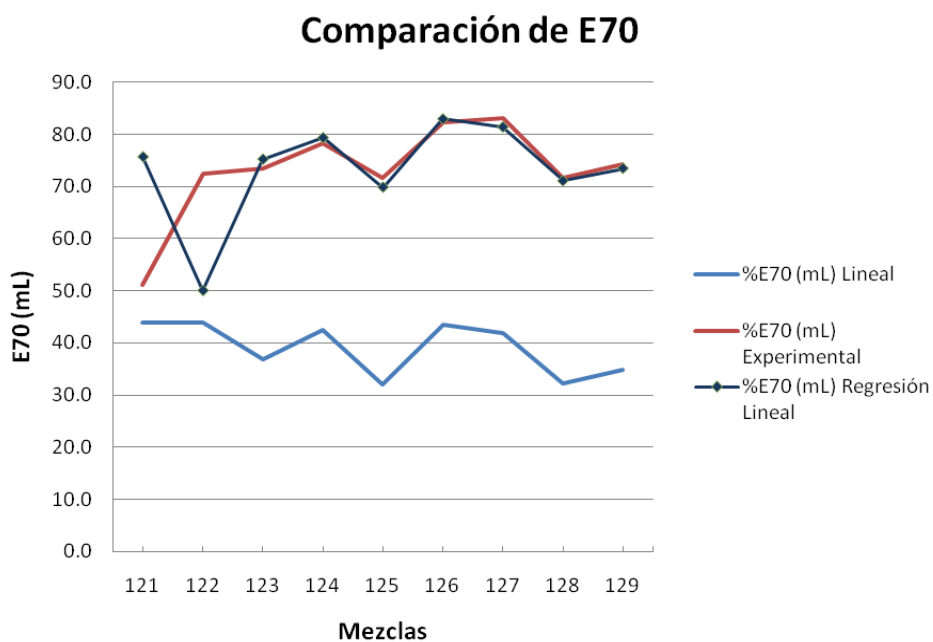


Figura N°39. Comparación de evaporado a 70°C (E70) para mezclas de ocho (8) componentes

Tabla N°92. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en las mezclas 122, 125 y 129

ÍNDICE DE BLOQUEO POR VAPOR (IBV)					
Mezcla	IBV modelo lineal	IBV experimental	IBV regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
122	13.2	17.8	15.0	26.2	15.77
125	10.6	24.7	24.0	57.1	2.74
129	10.3	23.8	24.0	56.6	0.96

Tabla N°93. Porcentaje de errores de desviación superiores a 15% en evaporado a 70°C (E70) para mezclas de ocho (8) componentes

Evaporado a 70°C (E70)	
Porcentaje de errores > a 15 % (%)	
Modelo lineal	Regresión Lineal
88.9	22.2

- **Resultados en mezclas de nueve (9) componentes:**

Tabla N°94. Valores de presión de vapor (RVP) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

PRESIÓN DE VAPOR					
Mezcla	DVPE modelo lineal	DVPE experimental	DVPE regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	14.6	10.46	14.1	39.5	35.1

Tabla N°95. Valores de punto inicial de ebullición (PIE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

PUNTO INICIAL DE EBULLICIÓN (PIE)					
Mezcla	PIE (°C) modelo lineal	PIE (°C) experimental	PIE (°C) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	43.3	28.0	31.0	54.6	10.8

Tabla N°96. Valores de temperatura a 10% de evaporado (T10) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

TEMPERATURA A 10% DE DESTILADO (T10)					
Mezcla	T10 (°c) modelo lineal	T10 (°c) experimental	T10 (°c) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	56.3	38.0	41.2	48.2	8.5

Tabla N°97. Valores de temperatura a 50% de evaporado (T50) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

TEMPERATURA A 50% DE DESTILADO (T50)					
Mezcla	T50 (°c) modelo lineal	T50 (°c) experimental	T50 (°c) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	71.1	60.0	65.3	18.5	8.8

Tabla N°98. Valores de temperatura a 90% de evaporado (T90) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

TEMPERATURA A 90% DE DESTILADO (T90)					
Mezcla	T90 (°c) modelo lineal	T90 (°c) experimental	T90 (°c) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	96.4	113.2	106.9	14.9	5.5

Tabla N°99. Valores de punto final de ebullición (PFE) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

PUNTO FINAL DE EBULLICIÓN (PFE)					
Mezcla	PFE (°c) modelo lineal	PFE (°c) experimental	PFE (°c) regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	125.0	195.5	191.4	36.1	2.1

Tabla N°100. Valores de índice de bloqueo por vapor (IBV) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

ÍNDICE DE BLOQUEO POR VAPOR (IBV)					
Mezcla	IBV modelo lineal	IBV experimental	IBV regresión lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	11.7	20.197	23.8	42.1	17.6

Tabla N°101. Valores de evaporado a 70°C (E70) obtenidos a través del modelo de regresión lineal y modelo lineal en la mezcla 130

% EVAPORADO A 70 °C (E70)					
Mezcla	%E70 (mL) Lineal	%E70 (mL) Experimental	%E70 (mL) Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
130	39.1	74.9	73.2	47.8	2.3

APÉNDICE F

RECETAS SELECCIONADAS MEDIANTE LA APLICACIÓN DE SOLVER

Tabla N° 102. Receta seleccionada para caso I a (G-91/ EtOH+MTBE)

	% en Volumen
LVN	7.883
LKN	15.000
HCCN	36.958
ALQUILATO	15.000
MTBE	1.800
TAME	1.000
NAFTA TOPS	15.286
BUTANO	0.000
ETANOL	7.000

RON (Nº octanos)	91.922
MON (Nº octanos)	81.652
IAD	86.995
SENS	10.269
RVP (psi)	8.995
PIE (°C)	31.572
T10 (°C)	44.319
T50 (°C)	77.001
T90 (°C)	161.926
PFE (°C)	224.700
E70 (%V)	63.707
IBV	12.951
% Parafinas	46.533
% Olefinas	11.308
% Naftenos	11.296
% Aromáticos	20.096
% Oxigenados	9.123
% Oxígeno	2.700
% Benceno	0.651
% Olefinas + Aromáticos	31.404
% Azufre	0.041

Tabla N° 103. Receta seleccionada para caso I b (G-91/ EtOH+MTBE)

	% en Volumen
LVN	35.163
LKN	0.000
HCCN	36.122
ALQUILATO	15.000
MTBE	1.784
TAME	1.000
NAFTA TOPS	3.857
BUTANO	0.000
ETANOL	7.000

RON (N° octanos)	91.262
MON (N° octanos)	82.362
IAD	87.000
SENS	8.900
RVP (psi)	9.356
PIE (°C)	30.821
T10 (°C)	43.524
T50 (°C)	77.000
T90 (°C)	161.806
PFE (°C)	224.700
E70 (%V)	63.842
IBV	13.222
% Parafinas	54.457
% Olefinas	7.735
% Naftenos	11.229
% Aromáticos	15.946
% Oxigenados	9.122
% Oxígeno	2.700
% Benceno	0.610
% Olefinas + Aromáticos	23.681
% Azufre	0.026

Tabla N° 104. Receta seleccionada para caso II a (G-91/ EtOH)

	% en Volumen
LVN	12.663
LKN	14.251
HCCN	36.257
ALQUILATO	15.000
MTBE	0.000
TAME	3.153
NAFTA TOPS	11.336
BUTANO	0.265
ETANOL	7.000

RON (N° octanos)	91.885
MON (N° octanos)	81.701
IAD	87.000
SENS	10.184
RVP (psi)	9.203
PIE (°C)	31.021
T10 (°C)	43.700
T50 (°C)	77.000
T90 (°C)	160.925
PFE (°C)	224.700
E70 (%V)	64.222
IBV	13.100
% Parafinas	47.324
% Olefinas	10.959
% Naftenos	11.054
% Aromáticos	19.547
% Oxigenados	9.457
% Oxígeno	2.700
% Benceno	0.630
% Olefinas + Aromáticos	30.506
% Azufre	0.040

Tabla N° 105. Receta seleccionada para caso II b (G-91/ EtOH)

	% en Volumen
LVN	13.627
LKN	9.184
HCCN	39.742
ALQUILATO	11.919
MTBE	0.000
TAME	0.000
NAFTA TOPS	15.454
BUTANO	0.000
ETANOL	10.000

RON (N° octanos)	91.908
MON (N° octanos)	81.506
IAD	86.870
SENS	10.401
RVP (psi)	9.116
PIE (°C)	31.068
T10 (°C)	43.903
T50 (°C)	77.190
T90 (°C)	165.114
PFE (°C)	224.715
E70 (%V)	63.082
IBV	12.913
% Parafinas	47.329
% Olefinas	10.451
% Naftenos	11.851
% Aromáticos	19.641
% Oxigenados	9.092
% Oxígeno	3.161
% Benceno	0.674
% Olefinas + Aromáticos	30.091
% Azufre	0.037

Tabla N° 106. Receta seleccionada para caso III a (G-91/ MTBE)

	% en Volumen
LVN	2.135
LKN	8.190
HCCN	36.006
ALQUILATO	15.000
MTBE	13.766
TAME	1.000
NAFTA TOPS	23.850
BUTANO	0.000
ETANOL	0.000

RON (Nº octanos)	91.114
MON (Nº octanos)	82.399
IAD	86.961
SENS	8.715
RVP (psi)	8.365
PIE (°C)	35.363
T10 (°C)	48.587
T50 (°C)	76.996
T90 (°C)	160.647
PFE (°C)	224.700
E70 (%V)	59.118
IBV	12.983
% Parafinas	45.072
% Olefinas	9.808
% Naftenos	11.062
% Aromáticos	18.178
% Oxigenados	14.589
% Oxígeno	2.700
% Benceno	0.721
% Olefinas + Aromáticos	27.986
% Azufre	0.034

Tabla N° 107. Receta seleccionada para caso III b (G-91/ MTBE)

	% en Volumen
LVN	17.674
LKN	0.000
HCCN	37.876
ALQUILATO	12.000
MTBE	12.423
TAME	2.599
NAFTA TOPS	17.361
BUTANO	0.000
ETANOL	0.000

RON (N° octanos)	91.228
MON (N° octanos)	82.505
IAD	87.085
SENS	8.723
RVP (psi)	8.804
PIE (°C)	33.107
T10 (°C)	45.833
T50 (°C)	76.993
T90 (°C)	162.898
PFE (°C)	224.700
E70 (%V)	63.749
IBV	13.122
% Parafinas	47.773
% Olefinas	8.194
% Naftenos	11.326
% Aromáticos	16.620
% Oxigenados	14.836
% Oxígeno	2.700
% Benceno	0.716
% Olefinas + Aromáticos	24.814
% Azufre	0.027

APÉNDICE G

**RESULTADOS DE PROPIEDADES ANTIDETONANTES PARA LAS
RECETAS SELECCIONADAS**

A continuación se muestran los resultados de las propiedades antidetonantes, obtenidos experimentalmente para las recetas seleccionadas y su porcentaje de desviación con respecto a lo estimado por el modelo de regresión lineal.

Tabla No 108. Resultados de octanaje RON experimental y de regresión lineal

Caso	Octanaje RON		% de desviación
	Experimental	Regresión Lineal	
Caso I a	90.1	91.9	2.02
Caso I b	88.5	91.3	3.12
Caso II a	89.3	91.9	2.89
Caso II b	88.8	91.9	3.50
Caso III a	88.7	91.1	2.72
Caso III b	88.0	91.2	3.67

Tabla No 109. Resultados de octanaje MON experimental y de regresión lineal

Caso	Octanaje MON		% de desviación
	Experimental	Regresión Lineal	
Caso I a	81.1	81.7	0.68
Caso I b	80.5	82.4	2.31
Caso II a	81.2	81.7	0.62
Caso II b	80.7	81.5	1.00
Caso III a	80.8	82.4	1.98
Caso III b	81.2	82.5	1.61

Tabla No 110. Resultados de IAD experimental y de regresión lineal

Caso	IAD		% de desviación
	Experimental	Regresión Lineal	
Caso I a	85.6	87.0	1.64
Caso I b	84.5	87.0	2.96
Caso II a	85.3	87.0	2.05
Caso II b	84.7	87.0	2.67
Caso III a	84.8	86.9	2.50
Caso III b	84.6	87.1	2.94

Tabla No 111. Resultados de octanaje IAD experimental y de regresión lineal

Caso	Sensibilidad		% de desviación
	Experimental	Regresión Lineal	
Caso I a	9.0	10.3	14.11
Caso I b	8.0	8.9	11.25
Caso II a	8.1	10.2	25.72
Caso II b	8.2	10.4	26.85
Caso III a	7.9	8.7	10.32
Caso III b	6.8	8.7	28.28

APÉNDICE H

RESULTADOS DE PROPIEDADES EVAPORATIVAS PARA LAS RECETAS SELECCIONADAS

A continuación se muestran los resultados de las propiedades evaporativas, obtenidos de forma experimental para las recetas seleccionadas y su porcentaje de desviación con respecto a lo predicho por el modelo de regresión lineal y a través de propiedades aditivas.

Tabla N° 112. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de presión de vapor (RVP)

PRESIÓN DE VAPOR (psi)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	8,15	7,53	9,00	7,57	10,37
Caso I b	8,35	8,24	9,36	1,30	12,05
Caso II a	8,15	7,80	9,20	4,25	12,92
Caso II b	8,20	7,57	9,12	7,68	11,17
Caso III a	7,18	7,53	8,37	4,83	16,50
Caso III b	7,21	7,98	8,80	10,71	22,11

Tabla N° 113. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de punto inicial de ebullición (PIE)

PUNTO INICIAL DE EBULLICIÓN (°c)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	40,9	43,5	31,6	6,44	22,81
Caso I b	39,6	43,3	30,8	9,40	22,17
Caso II a	40,2	43,6	31,0	8,40	22,83
Caso II b	39,4	43,9	31,1	11,48	21,15
Caso III a	41,3	42,6	35,4	3,11	14,37
Caso III b	40,9	42,3	33,1	3,48	19,05

Tabla N° 114. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de temperatura a un 10% de evaporado (T10)

TEMPERATURA A 10% DE EVAPORADO (°c)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	50,2	57,1	44,3	13,69	11,72
Caso I b	52,3	57,1	43,5	9,16	16,78
Caso II a	53,1	57,3	43,7	7,88	17,70
Caso II b	52,6	56,9	43,9	8,21	16,53
Caso III a	57,1	56,0	48,6	1,95	14,91
Caso III b	57,2	55,4	45,8	3,19	19,87

Tabla N° 115. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de temperatura a un 50% de evaporado (T50)

TEMPERATURA A 50% DE EVAPORADO (°c)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	79,9	87,7	77,0	9,78	3,63
Caso I b	81,0	87,2	77,0	7,69	4,94
Caso II a	83,1	87,4	77,0	5,18	7,34
Caso II b	67,6	88,9	77,2	31,45	14,19
Caso III a	80,8	86,7	77,0	7,30	4,71
Caso III b	81,2	86,7	77,0	6,81	5,18

Tabla N° 116. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de temperatura a un 90% de evaporado (T90)

TEMPERATURA A 90% DE EVAPORADO (°c)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	165,7	132,8	161,9	19,85	2,28
Caso I b	162,2	134,3	161,8	17,17	0,24
Caso II a	166,4	132,6	160,9	20,30	3,29
Caso II b	166,4	134,8	165,1	19,00	0,77
Caso III a	163,7	130,6	160,6	20,20	1,86
Caso III b	163,0	132,1	162,9	18,93	0,06

Tabla N° 117. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de punto final de ebullición (PFE)

PUNTO FINAL DE EBULLICIÓN (°C)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	215,1	164,3	224,7	23,60	4,46
Caso I b	213,9	166,0	224,7	22,39	5,05
Caso II a	216,4	164,7	224,7	23,87	3,84
Caso II b	213,6	165,1	224,7	22,69	5,20
Caso III a	214,1	163,7	224,7	23,56	4,95
Caso III b	215,4	165,2	224,7	23,33	4,32

Tabla N° 118. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de evaporado a 70°C (E70)

EVAPORADO A 70 °C (mL)					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	45,5	37,2	63,7	18,19	40,02
Caso I b	44,6	36,3	63,8	18,63	43,14
Caso II a	44,4	36,1	64,2	18,64	44,64
Caso II b	52,0	34,6	63,1	33,56	21,31
Caso III a	34,6	42,9	59,1	24,09	70,86
Caso III b	34,8	41,9	63,7	20,48	83,19

Tabla N° 119. Resultados experimental, lineal y de regresión lineal de índice de bloqueo por vapor (IBV)

ÍNDICE DE BLOQUEO DE VAPOR					
Mezclas	Experimental	Lineal	Regresión Lineal	% Error modelo lineal	% Error regresión lineal
Caso I a	14,1	12,4	13,0	12,04	7,92
Caso I b	14,1	13,0	13,2	8,40	6,54
Caso II a	13,9	12,3	13,1	11,59	5,90
Caso II b	15,0	12,1	12,9	19,37	13,68
Caso III a	11,7	13,1	13,0	12,25	11,18
Caso III b	11,7	13,4	13,1	14,47	11,83

APÉNDICE I

**DETERMINACIÓN DE CONTENIDO DE PONA_x, BENCENO, OXÍGENO
Y AZUFRE A TRAVÉS DE PROPIEDADES DE BALANCE DE MASA**

A continuación se muestran los valores de PONA_x (parafinas, naftenos, olefinas, aromáticos y oxigenados), benceno, oxígeno y azufre determinados mediante propiedades de balance de masa a partir de los datos proporcionados por la caracterización de los componentes.

Tabla N°120. Contenido de parafinas presente en los casos planteados (%v)

Caso	Parafinas (%v)
I a	49.6
I b	54.4
II a	47.9
II b	46.9
III a	45.4
III b	48.6

Tabla N°121. Contenido de olefinas presente en los casos planteados (%v)

Caso	Olefinas (%v)
I a	10.5
I b	7.9
II a	11.5
II b	10.5
III a	10.0
III b	8.6

Tabla N°122. Contenido de naftenos presente en los casos planteados (%v)

Caso	Naftenos (%v)
I a	11.54
I b	11.15
II a	11.04
II b	11.68
III a	11.10
III b	11.42

Tabla N°123. Contenido de aromáticos presente en los casos planteados (%v)

Caso	Aromáticos (%v)
I a	18.5
I b	15.9
II a	19.6
II b	19.5
III a	18.2
III b	16.7

Tabla N°124. Contenido de benceno presente en los casos planteados (%v)

Caso	Benceno (%v)
I a	0.68
I b	0.61
II a	0.63
II b	0.67
III a	0.72
III b	0.72

Tabla N°125. Contenido de olefinas + aromáticos presente en los casos planteados (%v)

Caso	Olefinas + Aromáticos(%v)
I a	29.0
I b	23.8
II a	31.0
II b	30.0
III a	28.2
III b	25.3

Tabla N°126. Contenido de oxigenados presente en los casos planteados (%v)

Caso	Oxigenados (%v)
I a	8.36
I b	9.17
II a	8.42
II b	9.90
III a	14.09
III b	13.52

Tabla N°127. Contenido de azufre presente en los casos planteados (%p)

Caso	Azufre (%p)
I a	0.04
I b	0.03
II a	0.04
II b	0.04
III a	0.03
III b	0.03

Tabla N°128. Contenido de oxígeno presente en los casos planteados (%p)

Caso	Oxígeno (%p)
I a	2.61
I b	2.85
II a	2.70
II b	3.48
III a	2.58
III b	2.46

APÉNDICE J

RESULTADOS MOSTRADOS POR LA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA CASOS CRÍTICOS DE VOLUMEN DISPONIBLE

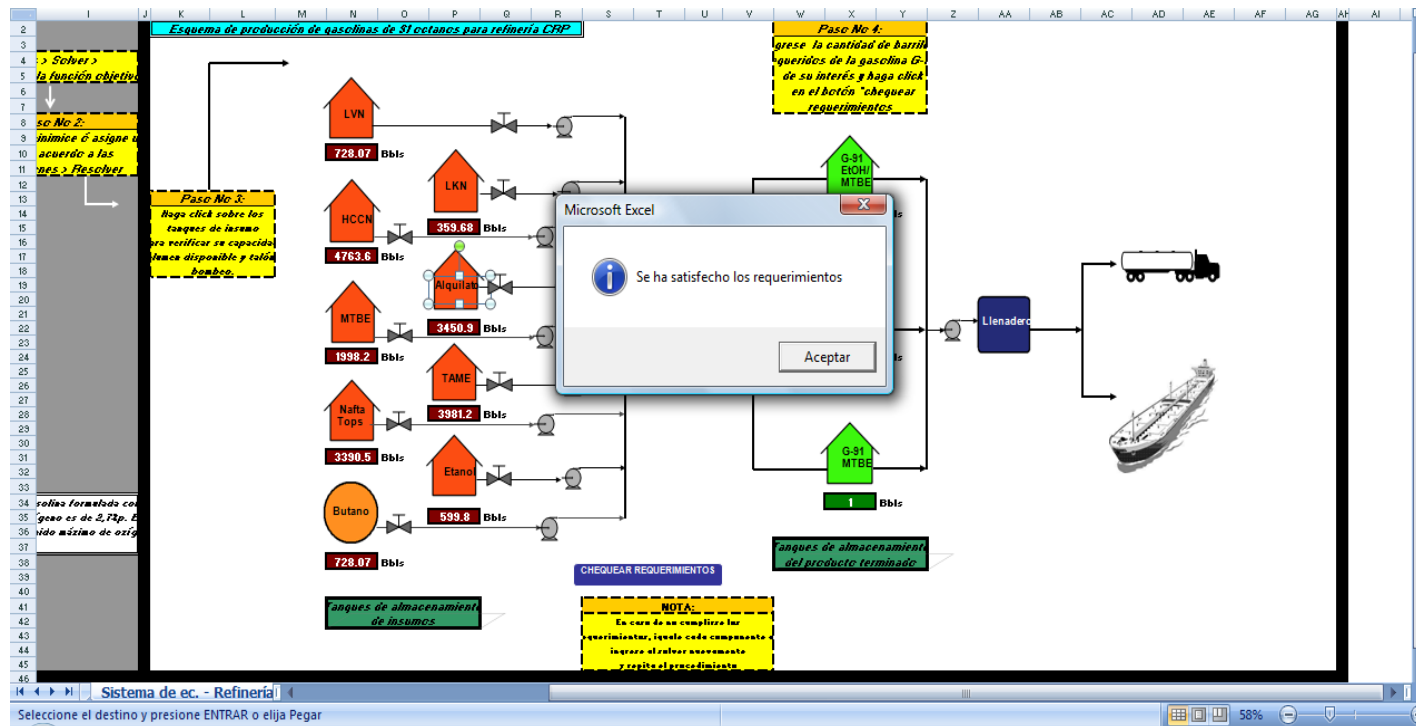


Figura N°40. Representación del cuadro de diálogo mostrado por la herramienta al requerirse un volumen dentro de lo disponible

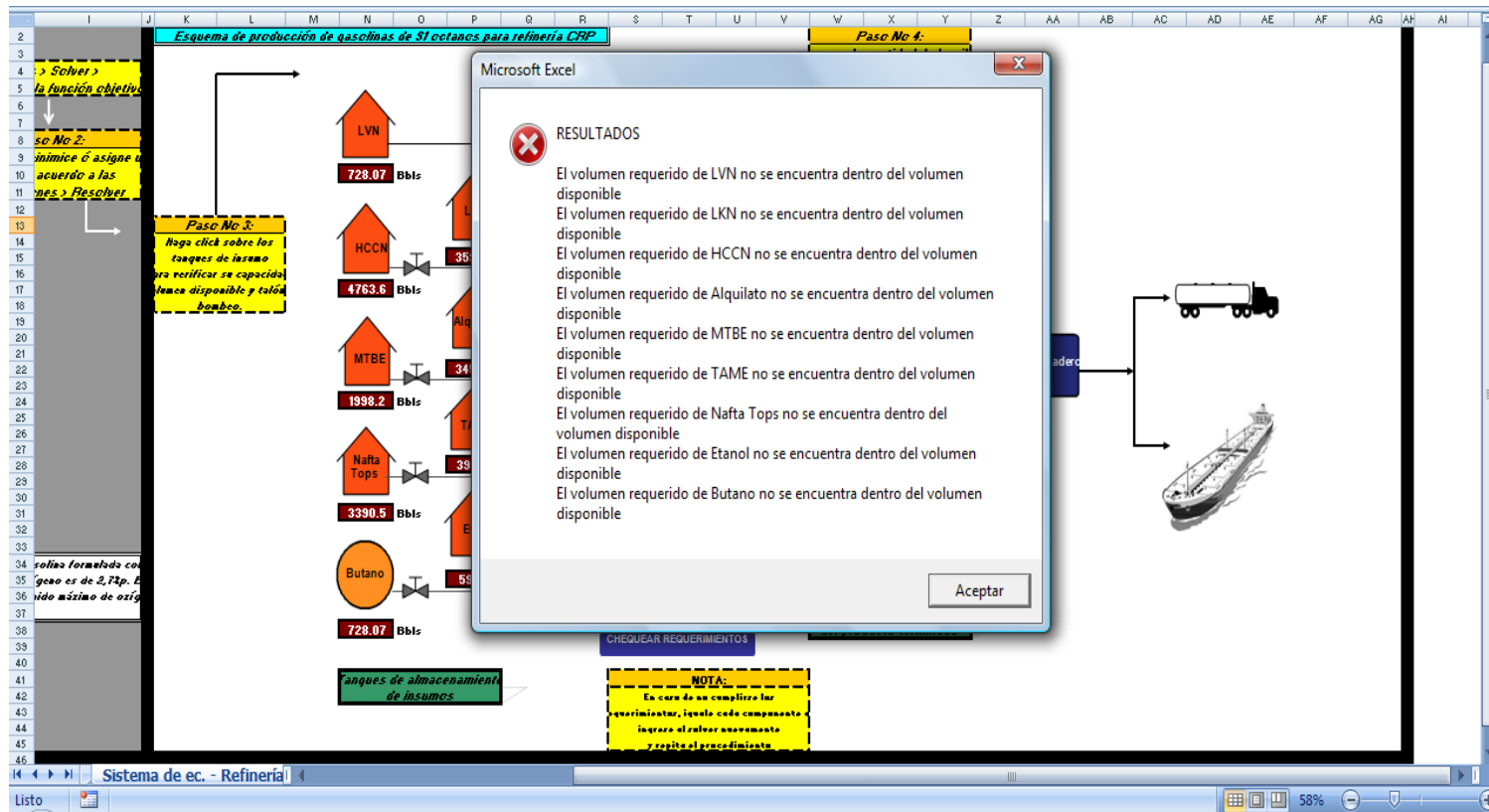


Figura N°41. Representación del cuadro de diálogo mostrado por la herramienta al requerirse un volumen fuera de lo disponible

APÉNDICE K

EQUIPOS EMPLEADOS

En esta sección se muestran cada uno de los equipos empleados en los ensayos señalados en la metodología de este Trabajo Especial de Grado.



Figura N° 42. Equipo de destilación Herzog, modelo HDA 628



Figura N° 43. Equipo de medición de presión de vapor Herzog, modelo HVP 976

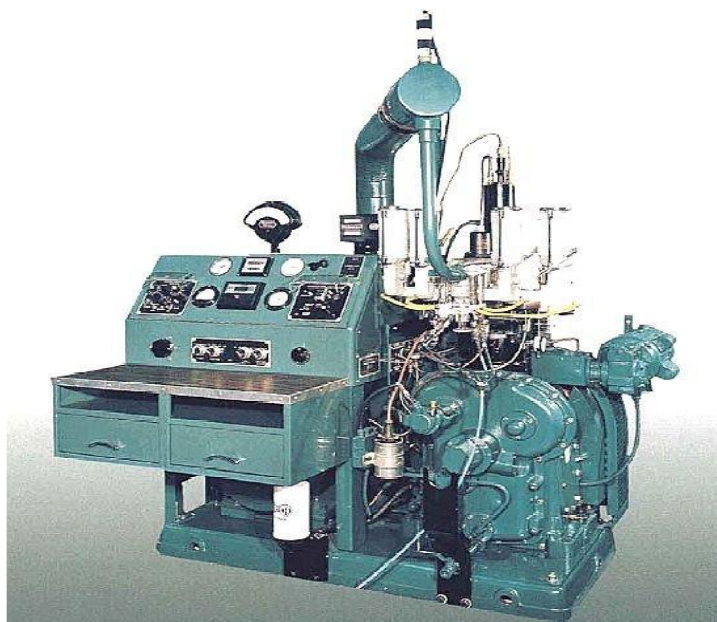


Figura N°44. Motor de combustión interna usado para la determinación de las propiedades de octanaje RON Y MON. Motor CFR, marca Waukesha.