

**MODELAMIENTO TEÓRICO DE UN REACTOR DE LECHO FIJO EN ESTADO
NO ESTACIONARIO PARA LA RUPTURA CATALÍTICA Y LA
DESACTIVACIÓN DE CARGAS**

**EDWIN MAURICIO REINA URÓN
JORGE ANTONIO VEGA OSORIO**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2005

**MODELAMIENTO TEÓRICO DE UN REACTOR DE LECHO FIJO EN ESTADO
NO ESTACIONARIO PARA LA RUPTURA CATALÍTICA Y LA
DESACTIVACIÓN DE CARGAS**

**EDWIN MAURICIO REINA URÓN
JORGE ANTONIO VEGA OSORIO**

**Trabajo de grado para optar al título
de Ingeniero Químico**

Director

Ramiro Martínez Rey Ph.D

Co-director

Luis Javier Hoyos Marin Ph.D

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2005

AGRADECIMIENTOS

Al personal de laboratorio de informática Luis Eduardo Arias Castellanos, sin cuya desinteresada colaboración este trabajo no habría podido culminarse.

A nuestro director el doctor Ramiro Martínez Rey y co-director el doctor Luís Javier Hoyos, a quienes agradecemos todo aquello que nos enseñaron y el apoyo brindado.

DEDICATORIA

**A mi papá, a mi mamá, a mi hermana, a Jazmín
y a todo el resto de mi familia que son la fuerza
para seguir siempre adelante.**

E. Reina

DEDICATORIA

**A Dios y a mis padres,
sin cuyo apoyo incondicional
no podría haber llegado a este punto en mi vida.**

J. Vega

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	13
OBJETIVOS	14
2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	15
2.1 CINÉTICA DE RUPTURA DEL GASÓLEO.....	15
2.2 FORMACIÓN DE COQUE Y PROCESO DE DESACTIVACIÓN DEL CATALIZADOR.....	16
2.2.1 Desactivación del catalizador.....	17
2.3 AGRUPAMIENTO EN PSEUDOCOMPONENTES (“LUMPING”).....	18
2.4 ESQUEMAS CINÉTICOS.....	18
2.4. Modelo escogido (5 pseudocomponentes).....	19
2.5 MODELAMIENTO MATEMÁTICO DEL REACTOR.....	21
2.5.1 Consideraciones iniciales.....	21
2.5.2 Balance general de masa fase gaseosa.....	22
2.5.3 Balance general de masa fase sólida.....	23
2.5.4 Balances para cada pseudocomponente.....	24
2.5.5 Solución general del modelo.....	25
2.5.6 Método para la estimación de los parámetros.....	27
2.6 CÁLCULO DE LA REGIÓN DE CONFIANZA Y DISEÑO SECUENCIAL DE EXPERIMENTOS.....	27
2.6.1 Cálculo de la región de confianza.....	27
2.6.2 .Solución de la ecuación para cálculo de incertidumbre.....	30
2.6.3 Diseño Secuencial de Experimentos.....	31
3. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL	34
3.1.1 Simulación de un MAT experimental.....	34
3.1.2 Cálculo de parámetros.....	36

3.1.3 Visualización.....	38
3.1.4 Diseño secuencial.....	39
3.1.5 Análisis estadístico.....	40
3.1.6 Esquema general del procedimiento.....	41
4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	43
4.1 PRESENTACIÓN DE DATOS.....	43
4.2 RESULTADOS OBTENIDOS PARA UN CONJUNTO DE CONSTANTES CINÉTICAS.....	44
4.3 EXTENSIÓN DE LOS RESULTADOS A LOS DEMÁS CASOS.....	49
4.4 ANÁLISIS ESTADÍSTICO.....	49
5. CONCLUSIONES.....	53
6. RECOMENDACIONES.....	54
7. BIBLIOGRAFÍA.....	56
ANEXOS.....	58

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Esquema cinético propuesto de 5 pseudocomponentes.....	20
Figura 2. Esquema del balance diferencial en el reactor.	22
Figura 3. Diagrama de flujo correspondiente a la solución del modelo matemático.....	26
Figura 4. Visualización matriz X_k	28
Figura 5. Visualización matriz G	29
Figura 6. Diagrama de flujo correspondiente al calculo de la matriz G	30
Figura 7. Diagrama de flujo correspondiente al diseño secuencial.	32
Figura 8. Hoja de cálculo “Generación Datos”	35
Figura 9. Hoja de cálculo “Generación Datos”.....	36
Figura 10. Ventana principal del Solver, en ella se define el procedimiento a realizar y las celdas que se van a modificar.....	37
Figura 11. Ventana secundaria del Solver donde el usuario configura las características de forma del programa.	37
Figura 12. Distribución de coque a lo largo del lecho de catalizador.	38
Figura 13. Comportamiento de los rendimientos a través del tiempo.....	39
Figura 14. Hoja de cálculo “Diseño Secuencial”	40
Figura 15. Hoja de cálculo “Análisis Estad.”.	41
Figura 16. Diagrama total del proceso de estimación y diseño secuencial.....	42
Figura 17. Visualización evolución del valor de k_{12}	46
Figura 18. Visualización evolución del valor de la incertidumbre asociada a k_{12}	47
Figura 19. Visualización del determinante de la matriz G en escala logarítmica.....	48
Figura 20. Perfil de coque a lo largo del lecho dado por ctes reales y estimadas por nueva met.....	53
Figura 21. Perfil de coque a lo largo del lecho dado por ctes estimadas por met. Tradicional.....	53

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Juegos de Constantes Cinéticas y de Desactivación.....	42
Tabla 2. Condiciones experimentales iniciales a partir de las cuales se simuló diseño de experimentos.....	42
Tabla 3. Parámetros obtenidos para primera estimación, constantes tres, punto de partida ocho.....	43
Tabla 4. Condiciones de operación seleccionadas por diseño secuencial.....	44
Tabla 5. Puntos experimentales y parámetros estimados para el conjunto de constantes 3.....	44
Tabla 6. Puntos experimentales e incertidumbres asociadas a parámetros estimados.....	45
Tabla 7. Valor de los parámetros en la estimación inicial y final para las constantes tres.....	47
Tabla 8. Porcentaje representado por las 5 condiciones de operación principales en cada caso.....	48
Tabla 9. Grupo de condiciones experimentales óptimas.....	49
Tabla 10. Parámetros estimados para condiciones de operación óptimas.....	49
Tabla 11. Incertidumbres asociadas para condiciones de operación óptimas.....	50
Tabla 12. Grupo de condiciones experimentales según metodología tradicional.....	50
Tabla 13. Parámetros estimados para condiciones de operación según metodología tradicional.....	51
Tabla 14. Incertidumbres asociadas para condiciones de operación según metodología tradicional.....	51
Tabla 15. Diferencia entre constantes teóricas y estimadas por metodología propuesta y tradicional.....	52

RESUMEN

TITULO: MODELAMIENTO TEÓRICO DE UN REACTOR DE LECHO FIJO EN ESTADO NO ESTACIONARIO PARA LA RUPTURA CATALÍTICA Y LA DESACTIVACIÓN DE CARGAS. *

**AUTORES: EDWIN MAURICIO REINA URÓN
JORGE ANTONIO VEGA OSORIO ****

PALABRAS CLAVES: Diseño secuencial, ruptura catalítica, modelo cinético, simulación.

Las pruebas de microactividad, MAT o Micro Activity Test, son ampliamente utilizadas en la industria de la refinación para el seguimiento, evaluación y selección de los catalizadores empleados en el proceso de ruptura catalítica. Cada vez es más frecuente el uso de simuladores, basados en principios básicos, durante el proceso de selección de catalizadores. Esto significa que es necesario derivar parámetros cinéticos a partir de las pruebas de laboratorio y planta piloto que posteriormente deben ser extrapolados a nivel industrial. Sin embargo, varios trabajos de la literatura han mostrado el riesgo que se corre cuando se utilizan programas experimentales pobremente diseñados. En este trabajo se realizaron simulaciones de la metodología del diseño secuencial de experimentos con el fin de determinar si existe un diseño óptimo de experimentos para las pruebas de MAT cuando se van a utilizar los datos de MAT para alimentar modelos cinéticos.

Para realizar este trabajo, se elaboraron un modelo matemático para un reactor MAT, utilizando Visual Basic Excel Applications, se utilizó el Solver de Excel para calcular las constantes de velocidad de reacción por minimización utilizando mínimos cuadrados, se programó el procedimiento para el cálculo de la incertidumbre de las constantes de velocidad de reacción calculadas por optimización y se programó en Visual Basic Excel Applications la optimización de la matriz G con base en los fundamentos de diseño secuencial de experimentos. El modelo cinético de reacción inmerso en el modelo del MAT utiliza una red de reacciones de cinco lumps: Gasóleo, Gasolina, GLP, Gas Seco y Coque. Las velocidades de reacción se consideran de segundo orden para la conversión del gasóleo y de primer orden para la gasolina. La deposición de coque se describe a través de una ecuación adaptada de la ecuación original de Voorhies.

Se simularon diseños de experimentos para cuatro grupos de constantes cinéticas representativas de catalizadores REY, USY y REUSY y ocho diferentes conjuntos de experimentos iniciales, que fueron escogidos aleatoriamente.

Se encontró que, para todos los grupos de constantes, independientemente del grupo de experimentos iniciales, el diseño secuencial de experimentos selecciona aproximadamente el mismo conjunto de experimentos. Esto sugiere que existe un diseño óptimo de experimentos que contiene diez experimentos ubicados en los extremos de la ventana operativa del MAT. Se propone que cuando se desee realizar cálculo de constantes de velocidad de reacción a partir de pruebas en el MAT se debe utilizar el conjunto de condiciones operativas encontrado a través del diseño secuencial de experimentos.

* Trabajo de Grado

** Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química. Director: Ramiro Martínez Rey.

ABSTRACT

TITLE: THEORETICAL MODELAMIENTO OF A REACTOR OF FIXED BED IN NON-STATIONARY STATE FOR THE CATALYTIC RUPTURE AND THE DECONTAMINATION OF LOADS*

**AUTHORS: EDWIN MAURICIO REINA URÓN
JORGE ANTONIO VEGA OSORIO ****

KEY WORDS: Sequential design, catalytic rupture, kinetic model, simulation.

The (MAT) micro-activity Prof. or micro-activity Test, are widely used in the industry of the refinement for the pursuit, evaluation and selection of the catalysts used in the process of catalytic rupture. Every time, the use of simulators are more frequently; they are based on basic principles, during the process of selection of catalysts. This means that it is necessary to derive kinetic parameters from the laboratory tests and pilot plants, where later must be extrapolated at industrial level. Nevertheless, several Literature jobs have shown the risk taken when use experimental programs designed poorly. In this Job we have made from experiments, simulations of the methodology of sequential design. with the purpose of determining if there is an optimal design of experiments for the MAT tests when is going to use the MAT data to feed kinetic models.

In order to make this job, there was elaborated a mathematical model for a reactor MAT, using Visual BASIC Excel Applications. Was used Excel's Solver to calculate the speed constants of reactions by minimizing method, using minimum squares. Was programmed the procedure for the uncertainly calculation of the reaction's speed-constants calculated by optimization and, also Was programmed in Visual Basic Excel Applicattions the optimization of the G matriz based in the bases of sequential design of experiments. The kinetic model of immersed reaction in the model of the MAT, uses net-reactions of five lumps: Gasoleo, Gas, GLP, Dry Gas and Coque. The reaction's speeds are considered in second order for the conversion of the gasoleo (gasohol) and in first order for gas. The coque deposition is described through an adapted equation from the original equation of Voorhies.

Designs of experiments for four groups of representative kinetic constants of catalysts REY, USY and REUSY and eight different sets from initial experiments, that were chosen randomly, were simulated.

Finally, Was found that, for all the groups of constants, independently of the initial experiments group, the sequential design of experiments approximately selects the same set of experiments. This suggests, exists an optimal design of experiments that contains ten experiments located in the ends of the MAT operative window. One sets out that when is desired to make calculation of speed constants of reaction from tests in the MAT, it must use the set of operative conditions found through the sequential design of experiments.

* Work of degree

** Faculty of physicochemical engineerings. School of chemical engineering. Director: Ramiro Martínez Rey.

INTRODUCCIÓN

La creciente demanda de combustibles ha generado la necesidad de tratar fracciones cada vez más pesadas de crudo; esto obliga a la industria del petróleo a generar nuevas metodologías que permitan hallar condiciones operativas adecuadas para desarrollar con eficiencia los distintos procesos de refinación.

Las pruebas de microactividad, MAT o Micro Activity Test, son ampliamente utilizadas en la industria de la refinación para el seguimiento, evaluación y selección de los catalizadores empleados en el proceso de ruptura catalítica. Cada vez es más frecuente el uso de simuladores, basados en principios básicos, durante el proceso de selección de catalizadores. Esto significa que es necesario derivar parámetros cinéticos a partir de las pruebas de laboratorio y planta piloto que posteriormente deben ser extrapolados a nivel industrial. Sin embargo, varios trabajos de la literatura han mostrado el riesgo que se corre cuando se utilizan programas experimentales pobremente diseñados.

En este trabajo se plantea un modelo matemático del reactor MAT y se obtiene su correspondiente simulación, se realizaron simulaciones de la metodología del diseño secuencial de experimentos con el fin de determinar si existe un diseño óptimo de experimentos para las pruebas de MAT cuando se van a utilizar estos datos para alimentar modelos cinéticos.

Se consideran varios aspectos para obtener un modelo capaz de generar resultados que estén en concordancia con la realidad; tales como, el número de pseudocomponentes (“lumps”) del modelo, la función de desactivación del catalizador por deposición de coque, las leyes cinéticas de las reacciones y el modo de operación (isotérmico, adiabático, transitorio), etc.

OBJETIVOS

Objetivo General

- Apoyados en un modelo matemático de un reactor tipo MAT simular diseños de experimentos secuenciales a fin de determinar el conjunto de condiciones operativas óptimas donde se deban realizar experimentos para calcular los parámetros cinéticos del proceso de ruptura catalítica.

Objetivos Específicos

- Seleccionar un esquema cinético de los propuestos en la literatura abierta.
- Escoger la función que describirá la desactivación del catalizador por deposición de coque y el orden de las reacciones envueltas en el proceso.
- Desarrollar el modelo matemático para representar el comportamiento de un reactor de ruptura catalítica tipo MAT, de acuerdo con el tipo de contacto catalizador carga.
- Estimar los parámetros que requiera dicho modelo a través del desarrollo de un software.
- Implementar un módulo de diseño secuencial de experimentos, de forma virtual, que permita mejorar los resultados de la estimación.

2. REVISION BIBLIOGRAFICA

Actualmente el proceso de ruptura catalítica fluidizada (FCC) ocupa un lugar preponderante en las operaciones de refinación del petróleo; esto se debe fundamentalmente, a su alta rentabilidad y flexibilidad de operación. La complejidad de dicho proceso y su creciente incorporación en la producción petroquímica ha hecho necesaria una comprensión mucho más profunda de los diferentes fenómenos que en él se presentan. Impulsando el desarrollo de nuevas herramientas, entre ellas los modelos matemáticos, se espera entender mejor el funcionamiento del FCC.

A continuación se presentan los conceptos teóricos asociados al desarrollo de un modelo para el proceso de ruptura catalítica. Inicialmente se explican las características fisicoquímicas de la ruptura del gasóleo tales como la cinética que sigue y la desactivación del catalizador por la formación de coque; posteriormente se explica el proceso de agrupamiento de las especies reaccionantes, el esquema cinético seleccionado y el correspondiente sistema de ecuaciones que modelan el fenómeno. Al final se expone la teoría del cálculo de incertidumbre y la metodología del diseño secuencial de experimentos.

2.1 CINÉTICA DE RUPTURA DEL GASÓLEO

El orden global de la cinética de reacción de ruptura del gasóleo, puede ser variable, dependiendo de las características del catalizador y del gasóleo; esto se debe a que cada uno de los diversos hidrocarburos presentes en la carga, sigue una ruptura de un modo lineal, pero con velocidades intrínsecas muy distintas¹. Nace y coautores², trabajando con

¹ WEEKMAN Jr., Vern W. and NACE, Donald M. Kinetics of catalytic cracking selectivity in fixed, moving and fluid bed reactors. En: AICHE J. Vol. 16, N°3. 1970. pp 393-404

catalizadores a base de zeolita, demostraron que la cinética de ruptura del gasóleo se puede representar como una reacción de segunda orden, acoplada con el decaimiento de la actividad del catalizador.³ La gasolina, que representa una fracción de ebullición menos amplia, exhibe un intervalo más pequeño de velocidades de fraccionamiento, asumiéndose para ella una cinética de primer orden^{4 5 6 7}. Estos resultados son confirmados por Yen y coautores, quienes utilizaron una cinética de segundo orden para la ruptura del gasóleo y de primer orden para las reacciones de la gasolina y considerando que el pseudocomponente más liviano se convierte en coque mediante una reacción de primer orden.

2.2 FORMACIÓN DE COQUE Y PROCESO DE DESACTIVACIÓN DEL CATALIZADOR

La formación de coque causa rápida desactivación del catalizador al bloquear parte de los centros activos y poros del mismo; esto se traduce en una disminución de la conversión del gasóleo y del rendimiento a gasolinas, con el tiempo de contacto. Es necesario conocer dos aspectos dentro de este fenómeno⁸: (1) La cinética de la desactivación del catalizador, o de la disminución de su capacidad de ruptura en función del tiempo (que permite prever la conversión y selectividad a gasolinas a la salida del reactor) y (2) la cinética de la

² NACE, D. VOLTZ, S and WEEKMAN, V. Application of a kinetic model for catalytic cracking: effects of charge stock. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol. 10, N° 4. 1971. pp. 530-538

³ PACHOVSKY, R; BEST, D. and WOJCIECHOSKY, B. Application of the time – on – stream theory of catalytic decay. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.15, N°1. 1976. pp. 165-169

⁴ WEEKMAN, Jr. Vern. Op. Cit. Pág. 4

⁵ PARASKOS, R. y Otros. A kinematic model of catalytic cracking in transfer line reactor. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.15, N°1. 1971. pp. 165-169

⁶ SHAH, Y. y Otros. A kinematic model for an adiabatic transfer line catalytic cracking reactor. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.16, N°1. 1977. pp. 89-94

⁷ CORELA, J; BILBAO, R y ARTIGAS, A. Proceso FCC de craqueo catalítico de gasoil a gasolina. Parte 1, Modelos cinéticos de craqueo, métodos de cálculo de sus constantes en diversos tipos de reactores. En: Ingeniería Química. N° 152. Noviembre de 1981. pp 87-95

⁸ GATES, Bruce; KATZER, James R.; and SCHUIT, G. Chemistry of catalytic process. New York: Mc Graw Hill, 1979. pp. 1-100

formación de coque en función de las condiciones de ruptura catalítica (que determina la concentración del mismo). Muchos autores apoyan la unión de dichas cinéticas en una sola⁹.

2.2.1 Desactivación del catalizador.

La desactivación del catalizador en la ruptura catalítica de gasóleo, puede ser de tipo química (metales, bases, coquización), y en menor grado térmica y mecánica. Una de las causas principales, y por supuesto, la que origina la desactivación más rápida, es la deposición de coque sobre la superficie del catalizador. Las características propias del micro reactor de lecho fijo usado para pruebas de Microactividad (MAT), permiten limitar los agentes causantes de la desactivación del catalizador.

La variación de la actividad del catalizador con el tiempo, se ha estudiado hasta ahora por medio de diferentes ecuaciones empíricas. La más empleada y aceptada a pesar de las limitaciones que presenta, corresponde a la propuesta por Voorhies, quien relacionó logarítmicamente el porcentaje en peso de carbono depositado en el catalizador, con el tiempo de exposición al alimento. Esta correlación cuantitativa y clásica es llamada el “reloj del coque” (coque clock)¹⁰:

$$C_C = AT_C^\eta \quad (1)$$

Donde:

- A : es un coeficiente que varía con las propiedades del alimento, el catalizador y la temperatura; siendo una medida de la tendencia a la coquización, del alimento en particular.
- T_C : es el tiempo de residencia en el catalizador y η es otro parámetro correlativo.
- C_C : concentración de coque, mol catalizador/g catalizador.

⁹ CORELA, J; BILBAO, Op. Cit. Pág. 4

¹⁰ VOORHIES, Alexis. Carbon formation in catalytic cracking. En: Industrial and Engineering Chemistry. Vol. 37, Nº. 4. Abril de 1945. pp. 319-322

2.3 AGRUPAMIENTO EN PSEUDOCOMPONENTES (“LUMPING”)

Al hablar de FCC, uno de los problemas fundamentales radica en el gran número de especies reaccionantes que forman parte de la carga alimentada, hecho que aporta grandes dificultades analíticas para su caracterización química y altos costos asociados a las mismas; debido a ello, se ha limitado el uso de modelos cinéticos muy detallados de estas redes complejas de reacciones. Generalmente, se acostumbra a agrupar a varias especies en grupos reactivos independientes gracias a cierta semejanza en sus propiedades fisicoquímicas y tratar cada uno de ellos como un único elemento (pseudocomponente)¹¹. Esta simplificación acarrea inevitablemente, el problema del correcto agrupamiento de los diversos componentes, de manera que la cinética propuesta, se adapte a su comportamiento adecuadamente. Para efectos prácticos, se tiende a agrupar aquellas especies que puedan ser rápidamente identificadas, o que sean los productos finales del proceso¹². Ordinariamente, al proponer un modelo de reacción, un aumento en el número de pseudocomponentes conlleva un mejor acercamiento a la realidad del proceso; no obstante, esto implica mayor complejidad en el cálculo de las ecuaciones cinéticas.

2.4 ESQUEMAS CINÉTICOS

Dadas las diferentes posibilidades de agrupamiento de las especies en las reacciones de ruptura catalítica, pueden encontrarse en la literatura una gran variedad de esquemas cinéticos que van desde sencillos modelos de tres pseudocomponentes, hasta altamente complejos superando los veinte. El Anexo 1. presenta un resumen de los principales trabajos encontrados.

¹¹ GOLIKERI, Sudhir V. and LUSS, Dan. Analysis of activation energy of grouped parallel reactions. En: AICHE J. Vol. 18 N° 2. Marzo de 1972. pp. 277-282

¹² WEEKMAN Jr., Vern W. A model of catalytic cracking conversion in fixed, moving and fluid – bed reactors. En: Chem. Process Des. Dev. Vol. 7 N° 1. 1968. pp. 90-95.

2.4.1 Modelo escogido (5 pseudocomponentes).

El modelo cinético escogido, corresponde a una modificación del agrupamiento de 5 pseudocomponentes hecho por Ancheyta y coautores¹³; esta elección proporciona una descripción bastante detallada del proceso, sin complicar en exceso el manejo matemático. El modelo consiste de: Carga (1), Gasolina (2), Gases licuados de Petróleo (3), Gases Secos (4) y Coque (5). La figura 3^{14 15 16 17} presenta el esquema de reacción utilizado en este trabajo. Aunque algunos autores, basados en sus investigaciones, consideran que la constante asociada a la producción de coque por conversión de la gasolina es despreciable comparada con la cantidad total de coque coproducido¹⁸, en este trabajo, dicha relación será tomada en cuenta. De igual forma, se considera una cinética de segundo orden para la ruptura de la carga y de primer orden para las demás reacciones consideradas; decisión respaldada por la mayor parte de estudios consultados¹⁹. La función de desactivación utilizada, corresponde a una adaptación de la ecuación original de Voorhies, con la gran ventaja de presentar un único parámetro a determinar “ α ” (constante de desactivación).

$$\phi = \exp(-\alpha[C_c]) \quad (2)$$

Donde:

ϕ : función de desactivación

α : constante de desactivación, g catalizador/mol catalizador

C_c : concentración de coque, mol catalizador/g catalizador

¹³ ANCHEYTA, Jorge; and SOTELO, Rogelio. Estimation of kinetic constants of a five lump model for fluid catalytic cracking process using simpler submodels. En: Energy & Fuels. 2000. N° 14. pp. 12261231

¹⁴ WEEKMAN, Jr. Vern. Op. Cit. Pág. 4

¹⁵ WEEKMAN Jr., Vern W. and NACE, Donald M. Op. Cit. Pág.4

¹⁶ YEN, Lewis; WRENCH, Richard E. and OMG, Andres S. Reaction kinetic correlation equations predicts fluid catalytic cracking coke yields. En: Oil and Gas J. Vol. 86, N° 2. Enero 1988. pp. 6770

¹⁷ VILLAFUERTE M, E. F.; AGUILAR L, R. y MAYA Y, R. Modelo matemático de reactores de desintegración catalítica de gasóleo. En: Revista Mexicana de Ing. Química. Vol. 2. 2003. pp. 8994

¹⁸ VIEIRA, Roberta y Otros. Simulation of catalytic cracking in a fixed fluidized bed unit. En: Ind. Eng. Chem. Res. Vol. 43. 2004. pp. 60276034

¹⁹ CORELA, J; BILBAO, Op. Cit. Pág. 4

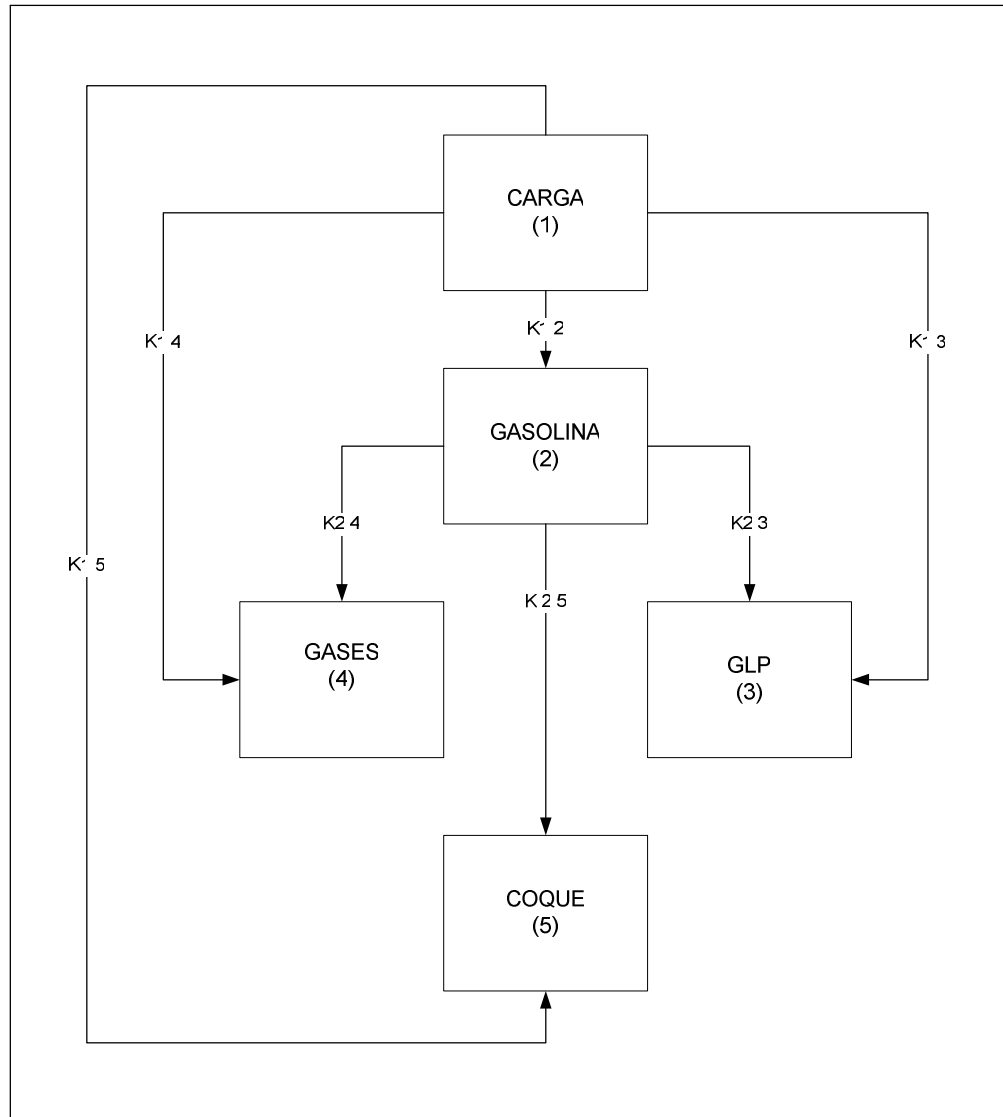


Figura 1. Esquema cinético propuesto de 5 pseudocomponentes

Donde:

- k_{12} : Constante cinética de reacción de Carga a Gasolina ($cm^6/s*mol*g\ cat$)
- k_{13} : Constante cinética de reacción de Carga a GLP ($cm^6/s*mol*g\ cat$)
- k_{14} : Constante cinética de reacción de Carga a Gases ($cm^6/s*mol*g\ cat$)
- k_{15} : Constante cinética de reacción de Carga a Coque ($g\ cat^2 /s*mol$)
- k_{23} : Constante cinética de reacción de Gasolina a GLP ($cm^3/s*g\ cat$)
- k_{24} : Constante cinética de reacción de Gasolina a Gases ($cm^3/s*g\ cat$)
- k_{25} : Constante cinética de reacción de Gasolina a Coque ($g\ cat /s$)

2.5 MODELAMIENTO MATEMATICO DEL REACTOR

El modelo por el cual se describirá el proceso de ruptura catalítica, parte de un balance de masa realizado sobre el sistema.

2.5.1 Consideraciones iniciales.

- La temperatura (773 K) a la que se lleva a cabo el proceso se considera constante tanto en el tiempo como para la longitud.
- La presión (680 mmHg) de la reacción se considera constante e igual a la atmosférica en la ciudad de Bucaramanga.
- Las especies involucradas en la reacción se encuentran en fase gaseosa.
- En el tiempo cero no hay coque sobre el catalizador.
- La desactivación del catalizador sólo considera la acción del coque, despreciando la desactivación por metales pesados.

Con base en lo anterior se seleccionó un sistema de reacción pseudo homogéneo para el reactor MAT.

2.5.2 Balance general de masa fase gaseosa.

La ecuación básica del balance de masa está dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{flujo molar} \\ \text{a la entrada} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{flujo molar} \\ \text{a la salida} \end{array} \right\} \pm \left\{ \begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{generación o} \\ \text{consumo} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{velocidad} \\ \text{de acumulación} \end{array} \right\} \quad (1)$$

Cuando la ecuación de balance de masa se aplica a un elemento diferencial de volumen del reactor (Figura 2.) que contiene un diferencial de masa de catalizador dW , se obtiene la siguiente ecuación:

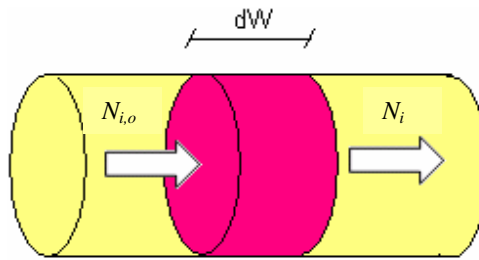


Figura 2. Esquema del balance diferencial en el reactor.

$$N_{i0}|_w - N_i|_{w+\Delta w} \pm \sum r_i \times \Delta W = \frac{d}{dt} \left(C_i \frac{\Delta W}{\rho_B} \right) \quad (2)$$

➤ Dividiendo la Ecuación (2) por ΔW y haciendo que este $\Delta W \rightarrow 0$

$$\frac{\partial N_i}{\partial W} = \sum r_i + \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (3)$$

Donde:

N_i : flujo molar del componente i , mol/s

r_i : velocidad de reacción del componente i en base al peso del catalizador, mol/s*g catalizador

W : masa de catalizador, g catalizador

C_i : concentración molar del componente i , mol/cm³

ρ_B : densidad de aparente del catalizador, g catalizador/cm³

➤ Velocidades de Reacción $\sum r_i$:

$$r_i = k_i [C_i]^n \phi \quad (4)$$

Donde:

r_i : velocidad de reacción del componente i con base en el peso del catalizador, mol/s

k_i : constante cinética de la reacción de ruptura catalítica:

k_{12} : Carga a Gasolina ($\text{cm}^6/\text{s} \cdot \text{mol} \cdot \text{g catalizador}$)

k_{13} : Carga a GLP ($\text{cm}^6/\text{s} \cdot \text{mol} \cdot \text{g catalizador}$)

k_{14} : Carga a Gases ($\text{cm}^6/\text{s} \cdot \text{mol} \cdot \text{g catalizador}$)

k_{15} : Carga a Coque ($\text{g catalizador}^2 / \text{s} \cdot \text{mol}$)

k_{23} : Gasolina a GLP ($\text{cm}^3/\text{s} \cdot \text{g catalizador}$)

k_{24} : Gasolina a Gases ($\text{cm}^3/\text{s} \cdot \text{g catalizador}$)

k_{25} : Gasolina a Coque ($\text{g catalizador} / \text{s}$)

C_i : concentración del pseudocomponente i , mol/cm^3

n : orden de la reacción de acuerdo al pseudocomponente, siendo de orden 1 para las fracciones que utilizan gasolina como reactivo y de orden 2 para las que usan carga como reactivo..

ϕ : función de desactivación por deposición de coque. Se consideran dos tipos, ϕ_1 que corresponde al coque depositado sobre el lecho y que se forma a partir de carga y ϕ_2 que es el coque depositado, que se forma a partir de gasolina. La forma de la ecuación es la misma en ambos casos, su diferencia radica en el parámetro α .

➤ Función de Desactivación:

$$\phi = \exp(-\alpha [C_c]) \quad (5)$$

Donde:

α : constante de desactivación, $\text{g catalizador}/\text{mol coque}$

C_c : concentración de coque, $\text{mol coque}/\text{g catalizador}$.

2.5.3 Balance general de masa fase sólida.

$$R_j \Delta W = \frac{d}{dt} C_j \frac{\Delta W}{\rho_B} \quad (6)$$

➤ Dividiendo la Ecuación (7) por ΔW y haciendo que este $\Delta W \rightarrow 0$

$$R_j = \frac{1}{\rho_B} \frac{dC_j}{dt} \quad (7)$$

Donde:

R_j : velocidad de reacción para formación de coque con base en el peso de catalizador, mol coque/s

ρ_B : densidad de aparente del catalizador, g catalizador/cm³

C_j : concentración de coque, mol de coque /g catalizador.

Aplicando el modelo matemático previamente presentado a la red de reacciones mostradas en el esquema cinético propuesto (ver Figura 1, sección 2.4.1), se genera el sistema de ecuaciones que representa el fenómeno de ruptura catalítica para el MAT.

2.5.4 Balances para cada pseudocomponente.

1. Balance para Carga:

$$\frac{\partial N_{carga}}{\partial W} - [(r_{12} + r_{13} + r_{14} + r_{15})\phi_1] = \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_{carga}}{\partial t} \quad (8)$$

2. Balance para Gasolina:

$$\frac{\partial N_{gasolina}}{\partial W} - [(r_{12} - r_{23} - r_{24} - r_{25})\phi_2] = \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_{gasolina}}{\partial t} \quad (9)$$

3. Balance para GLP:

$$\frac{\partial N_{GLP}}{\partial W} - [(r_{13} + r_{23})\phi_2] = \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_{GLP}}{\partial t} \quad (10)$$

4. Balance para Gases :

$$\frac{\partial N_{gases}}{\partial W} - [(r_{14} + r_{24})\phi_2] = \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_{gases}}{\partial t} \quad (11)$$

5. Balance para Coque:

$$[(r_{15} + r_{25})\phi_2] = \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_{coque}}{\partial t} \quad (12)$$

Donde:

- r_{12} : Velocidad de reacción de Carga a Gasolina, mol/s
 r_{13} : Velocidad de reacción de Carga a GLP, mol/s
 r_{14} : Velocidad de reacción de Carga a Gases, mol/s
 r_{15} : Velocidad de reacción de Carga a Coque, g coque/s
 r_{23} : Velocidad de reacción de Gasolina a GLP, mol/s
 r_{24} : Velocidad de reacción de Gasolina a Gases, mol/s
 r_{25} : Velocidad de reacción de Gasolina a Coque, g coque/s
 Φ : Función de desactivación por acumulación de Coque
 P_B : Densidad de bulto del catalizador, g catalizador/cm³
 C_{carga} : concentración de Carga, mol/cm³
 C_{GLP} : concentración de GLP, mol/cm³
 C_{gases} : concentración de Gases, mol/cm³
 C_{coque} : concentración de Coque, mol/cm³
 N_{carga} : flujo molar, mol/s
 N_{GLP} : flujo molar, mol/s
 N_{gases} : flujo molar, mol/s
 N_{coque} : flujo molar, mol/s

2.5.5 Solución general del modelo.

Partimos de la forma general de la ecuación del modelo:

$$\frac{\partial N_i}{\partial W} = \sum r_i + \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (3)$$

Tal como lo sugiere Van Landeghem en este trabajo se utiliza la aproximación de estado pseudo estacionario²⁰, entonces:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} \cong 0 \quad (13)$$

Luego la ecuación (3) queda de la siguiente forma, empleada para describir el comportamiento de las especies en estado gaseoso:

$$\frac{dN_i}{dW} = \sum r_i \quad (14)$$

Para describir el comportamiento de las especies en estado sólido se utiliza la ecuación 12:

$$[(r_{15} + r_{25})\phi_2] = \frac{1}{\rho_B} \frac{\partial C_{coque}}{\partial t} \quad (12)$$

²⁰ VAN LANDEGHEM, F. y Otros. Fluid catalytic cracking modelling of an industrial riser. En: Applied Catalysis A: General. Vol. 138. 9 de mayo de 1996. pp. 381-405

2.5.6 Método para la estimación de los parámetros.

Dada la masa de catalizador, el tiempo de inyección, la carga y los parámetros cinéticos es posible calcular los rendimientos en porcentaje en peso de los pseudocomponentes obtenidos en un experimento MAT a través de la solución del conjunto de ecuaciones diferenciales que representan el sistema (Ec. 8 a 12). La estimación de los parámetros cinéticos se realiza por mínimos cuadrados a través de la optimización de la función objetivo definida como la sumatoria de los errores al cuadrado entre los rendimientos experimentales y los calculados en cada uno de los experimentos ²¹, de acuerdo a la siguiente ecuación.

$$Error = \sum_{i=1}^{\# \text{ experimentos}} \sum_{j=1}^{\# \text{ pseudocomponentes}} \left((rend)_{\text{calculado},j} - (rend)_{\text{experimental},j} \right)^2_i \quad (13)$$

Esta función objetivo será resuelta utilizando un método de optimización no lineal basado en el ajuste de los parámetros cinéticos.

2.6 CÁLCULO DE LA REGION DE CONFIANZA Y DISEÑO SECUENCIAL DE EXPERIMENTOS

2.6.1 Cálculo de la región de confianza.

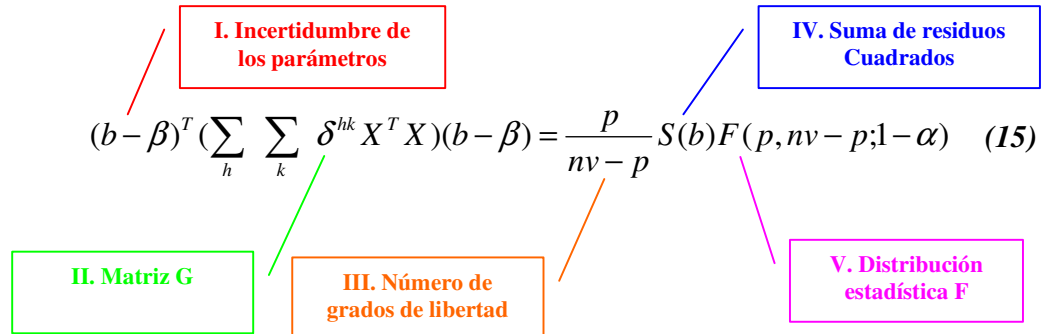
Una vez que los parámetros de un modelo se han calculado a partir de la optimización de la función objetivo, es normalmente necesario calcular la precisión de los mismos. La teoría estadística para el cálculo de la incertidumbre de parámetros en modelos no lineales está bien desarrollada ^{22 23 24}. La ecuación (15), extraída del libro “Chemical reactor analysis and design” de G. Froment, permite el cálculo del vector de errores asociado a cada parámetro cinético:

²¹ ANCHEYTA, Jorge; and SOTELO, Rogelio. Op. Cit. Pág. 6

²² MARIN, G. B.; FROMENT, G. F. Hexane reforming on Pt/Al₂O₃ Catalysts. En: Chem. Ing. Sci. Vol. 37. 1982. pp. 754-812

²³ VAN PARIJS, I. A.; and FROMENT, G. Investigated hydrodesulfurization on Co/Mo by means model like thiophene and benzothiophene. En: Ind. Chem. Prod. Res. Vol. 25. 1986. pp. 273-286

²⁴ FROMENT, G.; and BISCHOFF, Kenneth. Chemical reactor analysis and design. 2 Ed. Singapore: WILEY. 1990. pp. 61-117



- I. Incertidumbre de los parámetros: b corresponde al vector de valores estimados de los parámetros, calculados por mínimos cuadrados y β es el vector correspondiente al valor real de los mismos. La resta $(b - \beta)$ genera el vector de errores asociados a cada parámetro estimado. Cabe resaltar, que β es normalmente desconocido.
- II. Formación de la matriz G: X_k es la matriz jacobiana para cada pseudocomponente k , como se muestra en la Figura 4.

$$X_k = \begin{bmatrix} \frac{\partial S_k^1}{\partial b_1} & \cdots & \frac{\partial S_k^1}{\partial b_9} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial S_k^h}{\partial b_1} & \cdots & \frac{\partial S_k^h}{\partial b_9} \end{bmatrix}$$

Figura 4. Visualización matriz X_k .

Donde:

- S_k : concentración del pseudocomponente k , va de 1 a 5 (carga(1), Gasolina (2), GLP(3), Gases(4) y Coque(5)).
- b : parámetros de modelo, va de 1 a 9 ($b_1: k_1$; $b_2: k_2$; $b_3: k_3$; $b_4: k_4$; $b_5: k_5$; $b_6: k_6$; $b_7: k_7$; $b_8: \alpha_1$ y $b_9: \alpha_2$)
- h : número de experimentos alimentados a la estimación, parte de 1 y va hasta el número total de experimentos.

Después de calcular la matriz X_k , se forma la matriz G como se muestra en la Figura 5.

$$\sum_h \sum_k \delta^{hk} X^T X = \sum_h \sum_k \begin{bmatrix} \frac{\partial S^1_k}{\partial b_1} & \dots & \frac{\partial S^1_k}{\partial b_9} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial S^h_k}{\partial b_1} & \dots & \frac{\partial S^h_k}{\partial b_9} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \frac{\partial S^1_k}{\partial b_1} & \dots & \frac{\partial S^1_k}{\partial b_9} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial S^h_k}{\partial b_1} & \dots & \frac{\partial S^h_k}{\partial b_9} \end{bmatrix}$$

Figura 5. Visualización matriz G .

- III. Número de grados de libertad: p , número de parámetros del modelo (en este caso es 9), los grados de libertad ν , se calculan a partir del número total de experimentos n , alimentados a la estimación de los parámetros.
- IV. Suma de residuos cuadrados: sumatoria de los errores al cuadrado entre los rendimientos experimentales y los calculados en cada uno de los experimentos, de acuerdo a la siguiente ecuación.

$$Error = \sum_{i=1}^{\# \text{ experimentos}} \sum_{j=1}^{\# \text{ pseudocomponentes}} \left((rend)_{\text{calculado},j} - (rend)_{\text{experimental},j} \right)^2_i \quad (13)$$

- V. Distribución estadística F ²⁵ : el valor de la distribución F calculado a (p) grados de libertad en el numerador y $(n\nu-p)$ para el denominador y a un nivel de confianza $(1-\alpha)$.

²⁵ BOX, G. E.; HUNTER, W.; and HUNTER, J. S. Estadística para investigadores. Barcelona: Revertè, 1989. pp. 123-125

2.6.2 .Solución de la ecuación para cálculo de incertidumbre.

Inicialmente se calcula el determinante de la matriz G de acuerdo al siguiente diagrama de flujo (Figura 6):

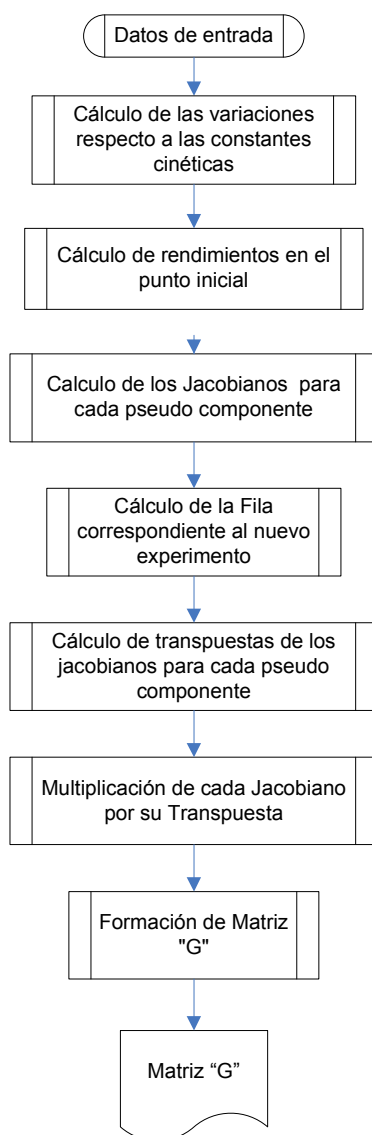


Figura 6. Diagrama de flujo correspondiente al calculo de la matriz G

Cabe aclarar que para el procedimiento anterior cuando se hace referencia a “calculo de rendimientos” se realiza la solución modelo (Ec. 8 a 12) siguiendo el procedimiento de la Figura 7. El código desarrollado en Visual Basic para Excel se presenta en el Anexo 3. Una vez calculada la matriz G que corresponde al segundo término de la Ec. 15 y dado que los

términos del lado derecho de dicha ecuación son conocidos se precede a calcular el término correspondiente a la incertidumbre de los parámetros efectuando una optimización con el Solver de Excel. Para ello, normalmente se dejan todos los parámetros constantes excepto aquel al que se le calcula la incertidumbre.

2.6.2 Diseño secuencial de experimentos.

La metodología tradicional seguida hasta ahora, para selección de los valores de carga, tiempo de inyección y masa de catalizador, requeridos para cada prueba de microactividad; sugiere que dichas pruebas se lleven a cabo con un valor fijo de catalizador, mientras la cantidad de carga y tiempo de inyección se incrementen de forma proporcional entre uno y otro. Sin embargo, estudios muestran^{26 27} que cuando los resultados de estas pruebas son utilizados para la estimación de parámetros cinéticos, no se tiene control sobre la incertidumbre asociada a los mismos^{28 29}, restringiendo su nivel de aplicabilidad y confianza. De aquí nace la necesidad de implementar una metodología para la disminución de la incertidumbre, en este caso se seleccionó el diseño secuencial de experimentos, ya que sus características brindan la posibilidad de ser simulada.

Una vez seleccionado el modelo que describa adecuadamente el proceso surge la necesidad de obtener mas precisión en la estimación de los parámetros. Box y coautores³⁰ y Froment y coautores³¹, desarrollaron un procedimiento de diseño secuencial para disminuir la incertidumbre asociada con la estimación de parámetros, encontrando que bajo ciertas suposiciones, el conjunto experimental que maximiza el determinante de la matriz G

²⁶ FROMENT, G.; and BISCHOFF, Kenneth. Op. Cit. Pág. 4

²⁷ HIMMELBLAU, D. Process analysis and simulation: deterministic systems. New Cork. John wiley, 1968.

²⁸ LENDREM, Dennis. OWEN, Martin and GODBERT, Sonya. DOE (desing of experiments) in development chemistry: potential obstacles. En: Organic Process Research an Development. 2001. Vol. 5. pp. 324-327

²⁹ EL SOLH, Tarek. JAROSCH, Kai and DE LASA, Hugo. Catalytic dry reforming of methane in a CREC riser simulator kinetic modeling and model discrimination. En: Ind. Eng. Chem. Res. 2003. Vol. 42. pp. 2507-2515.

³⁰ BOX, G. E.; and LUCAS, H. L. Methods for optimal parameter estimation. En: Biometrika. Vol. 46. 1959. pp. 77-92.

³¹ FROMENT, G.; and MEZAI, R. Sequential discrimination and estimation procedures for rate modelling in heterogeneous catalysis. En: Chem. Ing. Sci. Vol. 25. 1970. pp. 293-311

también minimiza el volumen de la región de confianza asociado a la estimación de parámetros. El procedimiento desarrollado se resume a continuación. Para n experimentos y p parámetros, G es una matriz cuadrada de $(p \times p)$ (Figura 5). Si n experimentos se han realizado, se deben especificar las condiciones del experimento $n+1$ de tal forma que maximicen el valor del determinante de G . Bajo esas nuevas condiciones se realiza el experimento, se obtienen los datos y se estiman nuevamente los parámetros. Luego se examina la región de confianza y si la incertidumbre aún es grande debemos repetir el ciclo hasta obtener una precisión satisfactoria. (Figura 7).

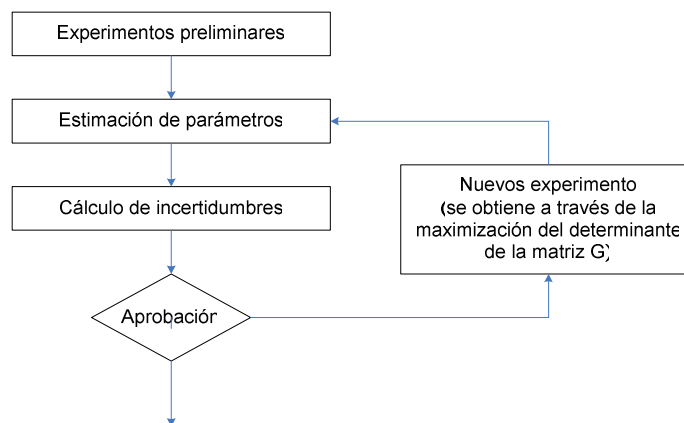


Figura 7. Diagrama de flujo correspondiente al diseño secuencial.

En la literatura se encuentran una cantidad considerable de artículos que estudian el modelamiento, la simulación y la estimación de parámetros cinéticos para el proceso de FCC^{32 33 34 35 36 37 38}. En ellos sus autores se enfocan en estudiar el correcto agrupamiento de las especies, la relación entre diferentes pseudocomponentes y la cinética del fenómeno, pero en ninguno se encontró estudios respecto a la incertidumbre asociada a los parámetros, ni tampoco la implementación de un diseño secuencial de experimentos aplicado a este proceso. La importancia en la estimación de los parámetros radica en que al momento de extrapolarlos a nivel de planta industrial una mala estimación conllevará a una baja

³² ANCHEYTA, Jorge; and SOTELO, Rogelio. Op. Cit. Pág. 7

³³ WEEKMAN, Jr. Vern. Op. Cit. Pág. 4

³⁴ WEEKMAN Jr., Vern W. and NACE, Donald M. Op. Cit. Pág. 4

³⁵ YEN, Lewis; WRENCH, Richard E. and OMG, Andres S. Op. Cit. Pág. 7

³⁶ VILLAFUERTE M, E. F.; AGUILAR L, R. y MAYA Y, R. Op. Cit. Pág. 7

³⁷ VIEIRA, Roberta y Otros. Op. Cit. Pág. 7

³⁸ CORELA, J; BILBAO, Op. Cit. Pág. 4

representatividad del proceso. La propuesta es desarrollar un modelo del proceso que nos permita estimar parámetros y posteriormente implementar un diseño secuencial de experimentos que nos permita disminuir la incertidumbre asociada a éstos para luego identificar el conjunto de condiciones experimentales que nos garanticen una buena estimación de parámetros para el proceso de FCC.

3. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

En este capítulo se presenta las seis hojas electrónicas que se desarrollaron para la estimación de parámetros, cálculo de incertidumbre y predicción del nuevo punto experimental por el diseño secuencial. Se explica la metodología de generación de datos experimentales utilizado en la simulación y cómo es el procedimiento general usado.

El inconveniente que intenta solucionar la metodología experimental planteada, se dirige en principio a la estructura del diseño secuencial, ya que ésta solo permite proveer un punto experimental por vez, siendo necesario retroalimentar éste antes de predecir uno nuevo y dado que el análisis de cada prueba MAT tarda aproximadamente quince días en su análisis químico, se ha optado por implementar una simulación de los datos experimentales, reduciendo así el tiempo empleado y los gastos que conllevan cada análisis.

3.1.1 Simulación de un MAT experimental.

Para la simulación de los datos experimentales de un MAT es necesario adicionar un error estadísticamente aleatorio a los rendimientos de los productos calculados mediante la solución del sistema de ecuaciones (8- 12) de la sección 2.5.4, tal como lo hicieron Bing y Asprey³⁹ :

$$\vec{Y} = f(\vec{X}; \vec{k}) + \epsilon$$

Donde:

- \vec{Y} : Vector de rendimientos calculados de productos del MAT. (rendimientos en porcentaje en peso de carga(1), Gasolina (2), GLP(3), Gases(4) y Coque(5).
- \vec{X} : Vector de condiciones operacionales del MAT. Carga inyectada, masa de catalizador y tiempo de inyección.
- \vec{k} : Vector de parámetros del modelo. $k_1; k_2; k_3; k_4; k_5; k_6; k_7; \alpha_1$ y α_2 .
- ϵ : El vector de errores aleatorios asociado a cada parámetro.

³⁹ BING H, Chen and STEVEN P, Asprey. On the desing of optimally informative dynamic experiments for model discrimination in multiresponse nonlinear situations. En: Ind. Eng. Chem. Res. 2003. Vol. 42. pp. 1379-1390.

Para solucionar el sistema de ecuaciones que representa el proceso se implementó en Visual Basic para Excel una función definida llamada *rendim*, cuyo código está en el Anexo 2. Los datos de los MAT simulados como experimentales durante la ejecución de un diseño secuencial de experimentos se presentan en una hoja electrónica denominada *Generación Datos* (Figura 8). Las constantes de la literatura, las condiciones experimentales. El valor de los rendimientos calculados, los errores estadísticos aleatorios y el valor de los rendimientos calculados como experimentales.

Constantes cinéticas										Datos experimentales					Datos calculados					Distribución de Error							
k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2		Carga	Gasolina	GLP	Gases	Coque	Carga	Gasolina	GLP	Gases	Coque	Error	0,5%						
g	s	g	g	g	g	g				g	g	g	g	g	g	g	g	g	g								
3,000	8,000	1,200	3,000	0,500	0,000	0,000	0,050	0,020		1,67	39,34	3,96	0,678	0,229	0,069	0,013	0,016	0,675	0,225	0,068	0,009	0,023	0,001	0,002	-0,006	-0,004	-0,002
										0,91	23,90	4,39	0,487	0,349	0,120	0,010	0,035	0,490	0,350	0,110	0,015	0,036	-0,006	-0,005	0,009	-0,002	0,002
										1,76	52,96	3,65	0,689	0,220	0,060	0,006	0,025	0,697	0,210	0,064	0,009	0,022	0,011	-0,001	-0,003	0,003	-0,011
										0,75	57,56	5,00	0,299	0,450	0,182	0,016	0,043	0,300	0,449	0,181	0,020	0,050	0,003	0,005	0,010	-0,002	0,000
										0,70	20,00	5,00	0,362	0,410	0,134	0,019	0,034	0,378	0,421	0,139	0,018	0,044	0,003	-0,007	-0,013	0,000	-0,006
										0,78	60,00	5,00	0,309	0,444	0,182	0,029	0,052	0,310	0,443	0,178	0,020	0,049	-0,005	0,002	-0,008	-0,005	0,011
										1,06	60,00	5,00	0,417	0,382	0,139	0,010	0,039	0,418	0,384	0,140	0,017	0,041	0,003	0,002	-0,004	-0,005	0,002
										0,70	20,00	5,00	0,374	0,414	0,139	0,022	0,044	0,378	0,421	0,139	0,018	0,044	-0,011	-0,003	0,005	0,005	-0,002
										0,70	53,85	5,00	0,274	0,463	0,186	0,023	0,050	0,284	0,458	0,187	0,020	0,051	0,003	-0,003	-0,002	-0,003	0,002
										0,70	20,00	5,00	0,374	0,419	0,136	0,022	0,045	0,378	0,421	0,139	0,018	0,044	-0,005	0,001	0,005	-0,001	0,001
										0,78	60,00	5,00	0,308	0,439	0,174	0,019	0,052	0,310	0,443	0,178	0,020	0,049	-0,010	0,004	-0,002	-0,007	0,002
										1,31	60,00	5,00	0,496	0,345	0,116	0,020	0,035	0,496	0,338	0,116	0,014	0,036	-0,012	0,002	0,001	0,004	0,011
										0,70	20,00	5,00	0,377	0,425	0,146	0,023	0,049	0,378	0,421	0,139	0,018	0,044	0,004	0,005	0,002	-0,002	-0,002

Figura 8. Hoja de cálculo “Generación Datos”

3.1.2 Cálculo de parámetros.

Como se explica en la sección 2.5.6 del capítulo anterior, el cálculo de parámetros se realizó utilizando mínimos cuadrados, para tal efecto se creó una hoja de Excel denominada *Cálculo Ctes*, en ésta se aprecian las condiciones experimentales en las que se realizaron los MATs, así como los rendimientos experimentales calculados en cada caso (Figura 9). Para iniciar el cálculo de los parámetros se oprime el botón *ESTIMAR*, comenzando así la minimización de la función objetivo (Ec.13 sección 2.2.6) haciendo uso del Solver de Excel. Esta herramienta ajusta los parámetros cinéticos hasta alcanzar el mínimo valor de la función objetivo. Es importante resaltar que el Solver ofrece la posibilidad de ajustarlo a la operación que el usuario necesite, en nuestro caso, tomamos las opciones que se muestran en la Figuras 10 y 11.

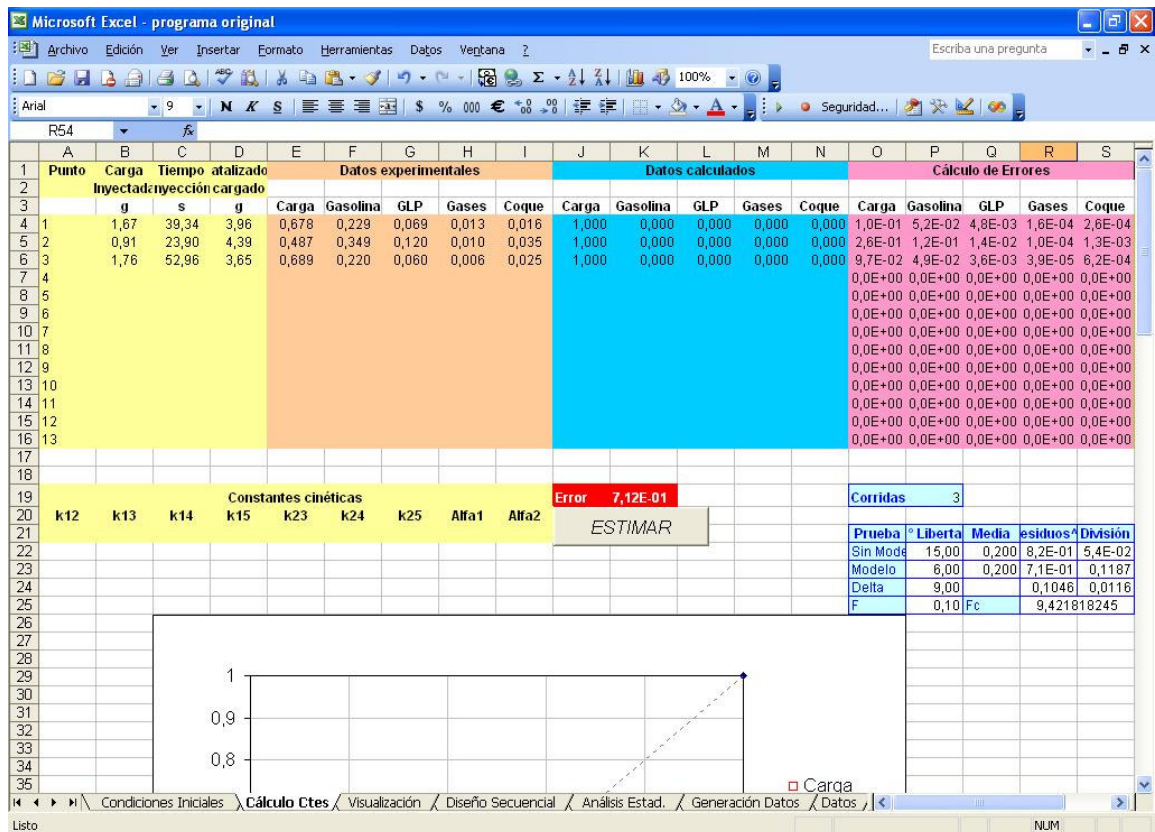


Figura 9. Hoja de cálculo "Generación Datos"



Figura 10. Ventana principal del Solver, en ella se define el procedimiento a realizar y las celdas que se van a modificar.

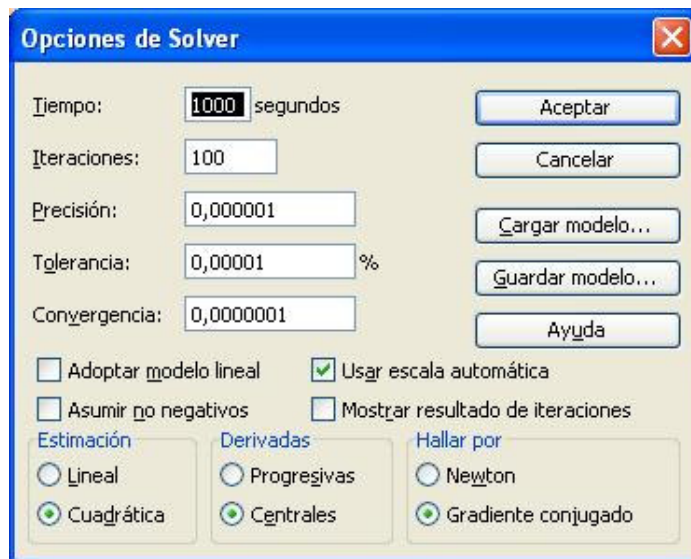


Figura 11. Ventana secundaria del Solver donde el usuario configura las características de forma del programa.

En esta hoja también se construye el diagrama de paridad entre los rendimientos calculados y los rendimientos experimentales.

3.1.3 Visualización.

Después de estimar el conjunto de parámetros cinéticos; construimos las gráficas de la distribución de coque en el lecho catalítico y los rendimientos a través del tiempo, para observar si los valores numéricos de las constantes son significativos físicamente. En esta hoja el usuario debe primero oprimir el botón **LLAMAR CONSTANTES** y luego el botón **GRAFICAR**, con lo cual, se ejecutará una rutina que le solicitará ingresar las tres condiciones de operación para el MAT y enseguida aparecerán en pantalla las dos gráficas que se muestran a continuación en las Figuras 12 y 13.

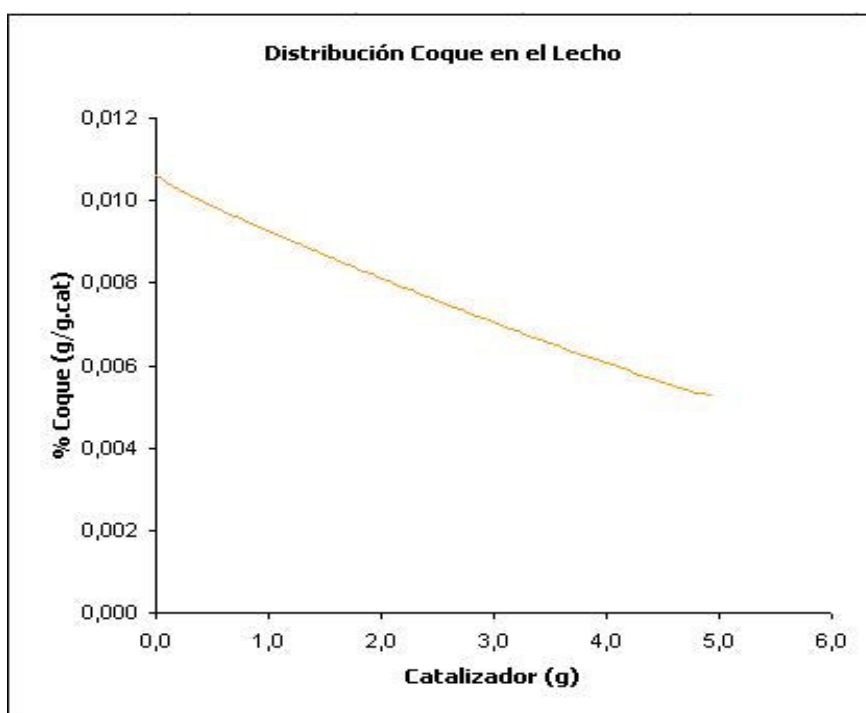


Figura 12. Distribución de coque a lo largo del lecho de catalizador.

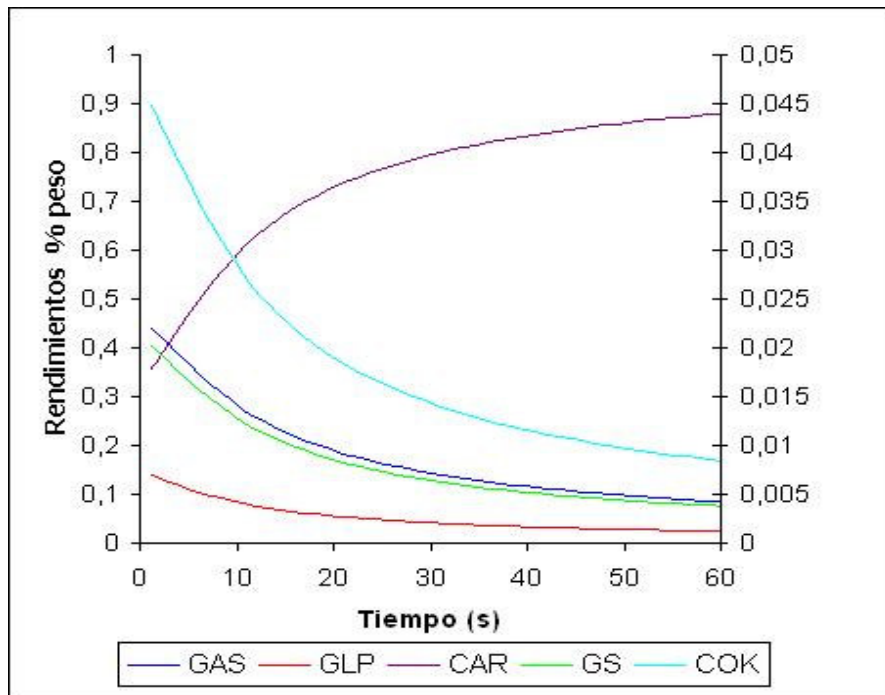


Figura 13. Comportamiento de los rendimientos a través del tiempo

3.1.4 Diseño secuencial.

La función *diseño secuencial* calcula la matriz G (Figura 5, sección 2.3.1), tomando como argumentos: el número de experimentos que se ha hecho hasta ese momento, la matriz de condiciones experimentales, el delta y los parámetros cinéticos que son traídos hasta esta hoja oprimiendo en el botón **LLAMAR CONSTANTES**. Cuando se ejecuta la función *diseño secuencial* para el cálculo de incertidumbre en la casilla correspondiente a **número de corridas** se coloca el número de las que se han realizado menos uno y cuando se utiliza para predecir el próximo conjunto de condiciones se utiliza el número total de corridas. La hoja se muestra en la Figura 14. Para la maximización del determinante de la matriz G primero se oprime el botón **SENSIBILIZAR**, para determinar el punto de partida y a continuación se oprime el botón **MAXIMIZAR** para comenzar a ajustar las condiciones del nuevo experimento empleando el Solver de Excel, que harán máxima a la función objetivo (determinante de la matriz G). Dichos valores deben estar dentro del rango de operación del equipo, en este caso la carga inyectada pueden estar entre 0,7 - 2 gramos, los de catalizador 3 – 5 gramos y el tiempo de inyección entre 20 - 60 segundos;

Punto experimental	Carga Inyectada	Tiempo Inyección	Catalizador cargado	Punto experimental	Carga Inyectada	Tiempo Inyección	Catalizador cargado	Velocidad inyección	
	g	s	g		g	s	g	g/s	
1	1,87	39,34	3,96	Prox. Cond.	0,70	20,00	5,00	3,50E-02	
2	0,91	23,90	4,39	Mínimo	0,70	20	3,0	1,30E-02	
3	1,76	52,96	3,65	Máximo	2,00	60	5,0	8,33E-01	
4	0,75	57,56	5,00	Numero Corridas	12		Sensibilizar		
5	0,70	20,00	5,00	Deltak	0,001				
6	0,78	60,00	5,00	Determinante	1,43E+06		Maximizar		
7	1,06	60,00	5,00						
8	0,70	20,00	5,00						
9	0,78	60,00	5,00						
10	1,31	60,00	5,00						
11	0,70	20,00	5,00						
12	0,78	60,00	5,00						
13	1,31	60,00	5,00						
14	0,70	20,00	5,00						
15	0,78	60,00	5,00						
16	1,31	60,00	5,00						
Constantes cinéticas									
k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
2,9515	8,1414	1,3086	2,9206	0,6336	0,0059	0,0000	0,0501	0,0424	
Llamar Ctes Cinéticas									
Matriz G									
2,15E-01	1,32E-03	-1,27E-02	-1,40E-01	-4,97E-02	-6,12E-02	-6,98E-01	-8,97E+00	4,17E-01	
1,32E-03	2,94E-03	-1,72E-04	-6,61E-03	8,85E-03	9,56E-04	-3,59E-02	-3,85E-01	-6,60E-02	
-1,27E-02	-1,72E-04	4,08E-03	7,14E-03	2,59E-03	1,35E-02	4,13E-02	4,38E-01	-2,26E-02	
-1,40E-01	-6,61E-03	7,14E-03	1,04E-01	1,42E-02	3,39E-02	5,09E-01	6,51E+00	-1,35E-01	
-4,97E-02	8,85E-03	2,59E-03	1,42E-02	4,63E-02	2,12E-02	7,10E-02	1,06E+00	-3,55E-01	
-6,12E-02	9,56E-04	1,35E-02	3,39E-02	2,12E-02	5,51E-02	2,02E-01	2,11E+00	-1,73E-01	
-6,98E-01	-3,59E-02	4,13E-02	5,09E-01	7,10E-02	2,02E-01	3,14E+00	3,25E+01	-6,95E-01	
-8,97E+00	-3,85E-01	4,38E-01	6,51E+00	1,06E+00	2,11E+00	3,25E+01	4,22E+02	-9,82E+00	
4,17E-01	-6,60E-02	-2,26E-02	-1,35E-01	-3,55E-01	-1,73E-01	-6,95E-01	-9,82E+00	2,73E+00	

Figura 14. Hoja de cálculo “Diseño Secuencial”.

3.1.5 Análisis estadístico.

Después de estimados los parámetros y de calcular la matriz G, se procede a calcular las incertidumbres (sección 2.6.2). Comenzamos oprimiendo el botón **MATRIZ G** y el botón **LLAMAR CONSTANTES**, que se encarga de traer la matriz G y las constantes cinéticas, respectivamente, posteriormente oprimimos el botón **ERRORES** para comenzar el cálculo utilizando de nuevo el Solver de Excel que se encarga de solucionar la ecuación de diseño secuencial (Ec. 15, sección 2.3.1) y generar el vector de errores. En esta hoja también puede apreciarse el valor de la distribución estadística F para los datos calculados con el modelo. Ver Figura 15.

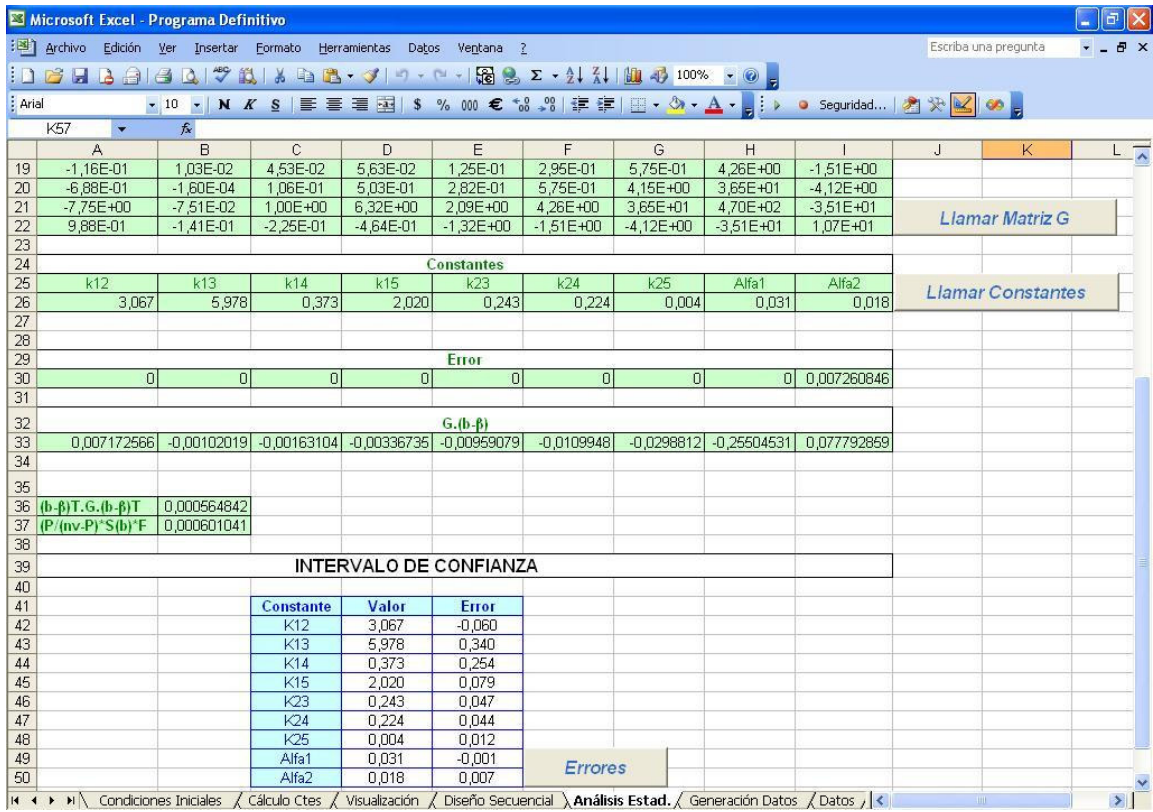


Figura 15. Hoja de cálculo “Análisis Estad.”.

3.1.6 Esquema general del procedimiento.

Las condiciones experimentales se llevan a la hoja de **Generación Datos** donde se calculan los rendimientos experimentales para estas condiciones de operación, se llevan junto con las condiciones operativas a la hoja **Cálculo Constantes**, ahí se estiman los parámetros cinéticos. Pasamos a la hoja **diseño secuencial** donde calculamos la matriz G para $n-1$ experimentos realizados y luego vamos a la hoja **Análisis Estad.** donde se calculan las incertidumbres para cada constante. A continuación volvemos a la hoja **diseño secuencial** donde se calcula la matriz G para n experimentos, se sensibiliza el punto de partida y se maximiza el determinante de la matriz G ajustando las condiciones del nuevo experimento. Estas condiciones predichas se llevan de nuevo a la hoja **Generación Datos** donde se comienza de nuevo el procedimiento. Los datos correspondientes a las constantes, las incertidumbres y el determinante de la matriz G se copian y se pegan en la hoja **Datos**. El procedimiento termina cuando el usuario observa que se ha llegado a un valor muy próximo

a las constantes teóricas. Todo el procedimiento anterior se llevo a cabo con los ocho conjuntos de tres condiciones experimentales y para los cuatro conjuntos de constantes. Un esquema de esta rutina se muestra en el diagrama de flujo de la Figura 16.

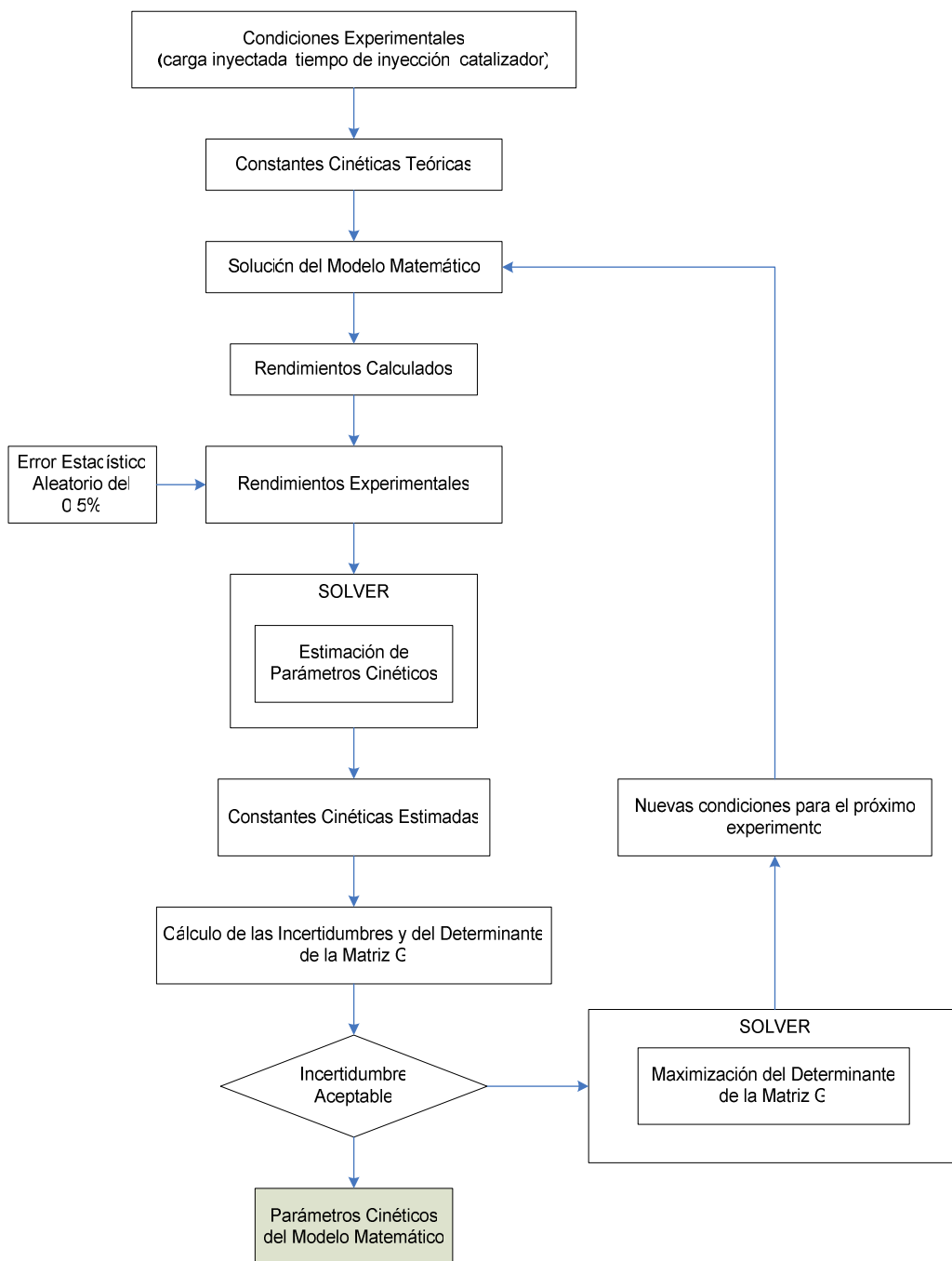


Figura 16. Diagrama total del proceso de estimación y diseño secuencial.

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En primera instancia se muestra el comportamiento de una constante su incertidumbre y el valor del determinante de la matriz G asociado a este cálculo. Luego se presenta la distribución de frecuencias para todos los casos estudiados y por último el conjunto de condiciones óptimas para pruebas MAT destinadas a la estimación de parámetros.

4.1 PRESENTACIÓN DE DATOS

Se tomaron cuatro grupos de constantes cinéticas para el proceso de ruptura catalítica representativas de catalizadores: REY, USY y REUSY.

Tabla 1. Juegos de Constantes Cinéticas y de Desactivación.

Juego	k_{12}	k_{13}	k_{14}	k_{15}	k_{23}	k_{24}	k_{25}	α_1	α_2
Uno	3,000	8,000	1,200	3,000	0,500	0,000	0,000	0,050	0,020
Dos	1,000	4,000	0,600	2,000	0,200	0,000	0,500	0,030	0,010
Tres	3,000	6,000	0,400	2,000	0,200	0,200	0,000	0,030	0,010
Cuatro	3,500	12,000	1,500	3,000	0,000	0,000	0,000	0,030	0,000

1. Para cada grupo de constantes se diseño secuencias de experimentos partiendo de ocho grupos de condiciones de operación las cuales fueron escogidas de manera aleatoria dentro de la ventana operativa del MAT. Ver Tabla 3

Tabla 2. Condiciones experimentales iniciales a partir de las cuales se simuló diseño de experimentos.

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
1	1,67	39,34	3,96
	0,91	23,90	4,39
	1,76	52,96	3,65
2	0,79	36,21	3,44
	1,22	34,18	4,27
	1,08	28,17	4,07
3	0,96	59,52	3,67
	1,19	23,14	3,95
	1,90	59,17	3,45
4	0,96	25,43	4,97
	1,07	40,35	4,84
	1,27	26,54	4,84

5	1,72	51,15	3,03
	0,93	24,36	3,04
	0,94	34,90	3,88
6	1,91	51,46	4,33
	0,79	29,50	3,63
	1,36	27,91	3,52
7	1,25	20,42	4,05
	1,00	41,56	3,71
	1,60	37,46	4,33
8	1,00	36,71	4,28
	1,23	27,85	4,72
	0,89	40,70	4,05

4.2 RESULTADOS OBTENIDOS PARA UN CONJUNTO DE CONSTANTES CINÉTICAS

A continuación se muestran los resultados obtenidos para el grupo de constantes tres (Ver Tabla 1, sección 3.2) en el punto de partida ocho (Ver Tabla 2, sección 3.2).

➤ *Parámetros obtenidos con primera estimación.*

En la Tabla 3 se muestra los parámetros cinéticos obtenidos a partir de la optimización con las tres condiciones de operación que corresponden al punto de partida ocho. Como se puede apreciar el valor de las constantes estimadas es lejano del valor teórico.

Tabla 3. Parámetros obtenidos para la primera estimación, constantes tres, punto de partida ocho.

Constantes Estimadas								
k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2
1,068	2,046	0,380	0,445	1,224	0,011	0,444	0,000	0,079
Constantes de la Literatura								
k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2
3,000	6,000	0,400	2,000	0,200	0,200	0,000	0,030	0,010

➤ *Condiciones de operación seleccionadas por diseño secuencial.*

A continuación se presentan las condiciones seleccionadas por diseño secuencial a través de la optimización de la matriz G. (Ver Tabla 4). En esta tabla se puede ver que se repiten algunos puntos de condiciones operativas.

Tabla 4. Condiciones de operación seleccionadas por diseño secuencial..

Puntos Experimentales		
Carga	Tiempo	Cata.
2,00	60,00	3,00
0,70	53,85	5,00
0,70	20,00	5,00
0,78	60,00	5,00
1,63	60,00	5,00
0,78	60,00	5,00
0,70	20,00	5,00
2,00	60,00	5,00
0,78	60,00	5,00
0,70	20,00	3,52

➤ *Parámetros estimados e incertidumbres asociadas..*

En la Tabla 5, se muestran las constantes cinéticas y de desactivación que fueron estimadas a partir de las condiciones de operación seleccionadas por el diseño secuencial de experimentos (Tabla 4) . De igual forma en la Tabla 6, son presentadas las incertidumbres asociadas a estos parámetros.

Tabla 5. Puntos experimentales y parámetros estimados para el conjunto de constantes 3

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								
Carga	Tiempo	Cata.	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2
2,00	60,00	3,00	2,778	5,635	0,941	1,624	0,906	0,012	0,000	0,033	0,134
0,70	53,85	5,00	3,148	6,651	1,443	1,808	0,605	0,018	0,044	0,035	0,110
0,70	20,00	5,00	3,113	6,178	1,142	1,810	0,217	0,036	0,019	0,033	0,001
0,78	60,00	5,00	2,912	6,106	0,364	1,828	0,131	0,171	0,006	0,031	0,001
1,63	60,00	5,00	2,854	5,990	0,189	1,864	0,124	0,204	0,001	0,030	0,002
0,78	60,00	5,00	2,896	6,024	0,256	1,926	0,139	0,197	0,001	0,029	0,002
0,70	20,00	5,00	2,889	5,820	0,216	1,925	0,149	0,191	0,000	0,029	0,000
2,00	60,00	5,00	2,899	5,810	0,248	1,927	0,153	0,188	0,000	0,029	0,000
0,78	60,00	5,00	2,919	5,872	0,315	1,959	0,152	0,175	0,000	0,029	0,000
0,70	20,00	3,52	2,911	5,931	0,290	1,961	0,146	0,180	0,000	0,029	0,001

Tabla 6. Puntos experimentales e incertidumbres asociadas a parámetros estimados.

Puntos Experimentales			Incertidumbres								
Predichos			k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2
Carga	Tiempo	Cata.									
2,00	60,00	3,00	0,082	0,586	0,420	0,088	0,477	0,434	0,052	0,002	0,098
0,70	53,85	5,00	0,126	0,815	0,609	0,141	0,316	0,293	0,061	0,002	0,070
0,70	20,00	5,00	0,093	0,596	0,433	0,110	0,073	0,062	0,016	0,002	0,012
0,78	60,00	5,00	0,065	0,394	0,291	0,084	0,045	0,040	0,011	0,001	0,007
1,63	60,00	5,00	0,058	0,360	0,269	0,073	0,044	0,039	0,010	0,001	0,006
0,78	60,00	5,00	0,057	0,344	0,259	0,075	0,039	0,035	0,009	0,001	0,005
0,70	20,00	5,00	0,056	0,330	0,244	0,075	0,037	0,033	0,009	0,001	0,005
2,00	60,00	5,00	0,050	0,307	0,230	0,064	0,035	0,031	0,008	0,001	0,004
0,78	60,00	5,00	0,049	0,293	0,220	0,064	0,032	0,028	0,008	0,001	0,004
0,70	20,00	3,52	0,045	0,273	0,202	0,060	0,031	0,027	0,007	0,001	0,004

A continuación se muestra (Figura 17) la evolución de los valores para la constante k_{12} . En la Figura 17 el experimento cero corresponde a la estimación inicial hecha con los 3 puntos experimentales escogidos aleatoriamente dentro de la zona operativa del MAT. La curva azul muestra la tendencia del valor de k_{12} calculado implementando un diseño secuencial de experimentos, vemos que se aproxima al valor teórico a medida que el número de experimentos aumenta.

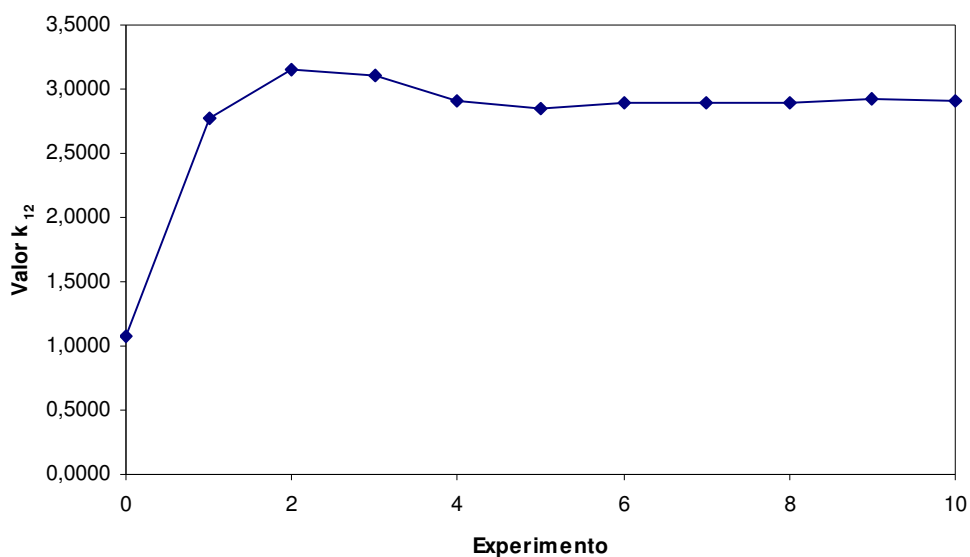


Figura 17. Visualización de la evolución del valor de k_{12}

El comportamiento de la incertidumbre de la constante k_{12} , se ve en la Figura 18. Se observa que disminuye significativamente a medida que aumenta el número de experimentos diseñados, con una disminución más rápida para los primeros cuatro experimentos.

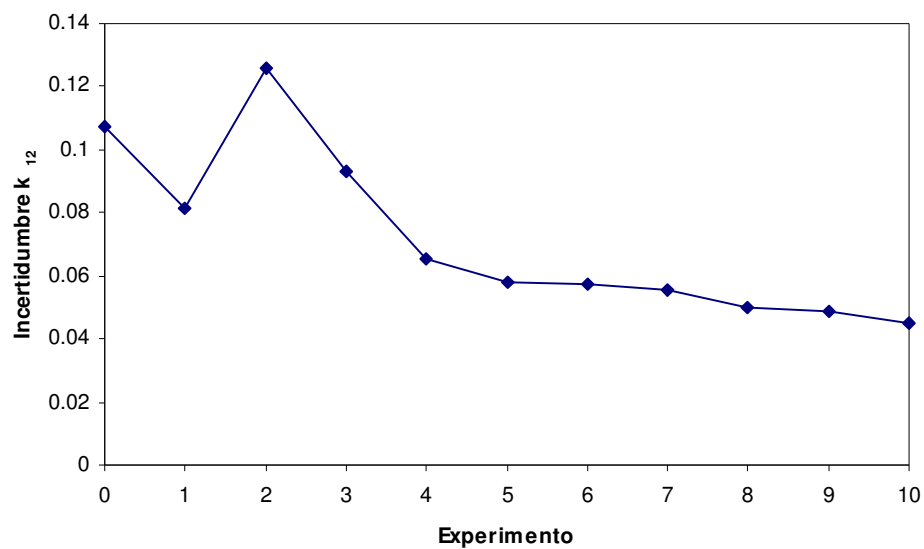


Figura 18. Visualización evolución del valor de la incertidumbre asociada a k_{12}

Este mismo comportamiento se observó para todos los demás parámetros del modelo. Los valores inicialmente calculados así como aquellos obtenidos después de simular diez experimentos por metodología de diseño secuencial con diferentes puntos de partida se presentan en la Tabla 7. Podemos notar que en todos los casos las estimaciones iniciales de los parámetros no están próximas de los valores teóricos mientras que con la implementación del diseño secuencial se obtiene una aproximación notable frente a los datos reales.

Tabla 7. Valor de los parámetros en la estimación inicial y final para las constantes tres.

Valor Teórico		3,0000	6,0000	0,4000	2,0000	0,2000	0,2000	0,0000	0,0300	0,0100
P1	Inicial	3,1131	4,1320	0,8501	1,9840	0,6836	0,0000	0,0000	0,0301	0,0000
	Final	2,9791	6,1554	0,4837	1,9129	0,2564	0,3021	0,0005	0,0316	0,0489
P2	Inicial	3,0925	6,8188	1,1974	2,1479	0,1224	0,0000	0,4424	0,0268	0,2002
	Final	3,0659	6,0913	0,6608	2,0250	0,2884	0,2143	0,0149	0,0304	0,0303
P3	Inicial	3,0717	5,9280	0,5059	1,9626	0,3082	0,1382	0,0000	0,0313	0,0054
	Final	2,8649	6,1265	0,3504	1,9987	0,1851	0,2326	0,0000	0,0290	0,0230
P4	Inicial	2,5734	3,6044	0,8214	1,6867	0,6415	0,0390	0,0000	0,0231	0,0110
	Final	3,0304	6,0242	0,3595	2,0609	0,1802	0,1980	0,0000	0,0295	0,0058
P5	Inicial	2,7467	5,1292	0,0000	2,0615	0,1377	0,3955	0,0000	0,0254	0,0072
	Final	3,0719	6,0777	0,6711	2,0996	0,2239	0,1626	0,0000	0,0299	0,0129
P6	Inicial	3,1808	6,1694	0,8599	2,0646	0,2312	0,0005	0,0269	0,0322	0,0030
	Final	3,0602	5,9970	0,4656	2,0181	0,1875	0,1600	0,0000	0,0311	0,0014
P7	Inicial	3,4437	6,3189	0,9663	1,9925	0,4205	0,0000	0,0318	0,0352	0,0196
	Final	3,0673	5,9776	0,3734	2,0204	0,2430	0,2235	0,0036	0,0307	0,0179
P8	Inicial	1,0682	2,0460	0,3804	0,4446	1,2243	0,0114	0,4441	0,0000	0,0788
	Final	2,9109	5,9306	0,2901	1,9607	0,1460	0,1803	0,0000	0,0291	0,0010

➤ **Evolución de la matriz G.**

La evolución del valor del determinante de la matriz G, que se utilizó como criterio para la optimización llevada a cabo por el módulo de diseño secuencial, la Figura 19 muestra el comportamiento del logaritmo natural del valor del determinante de la matriz G, en función del número de experimentos calculados por diseño secuencial.

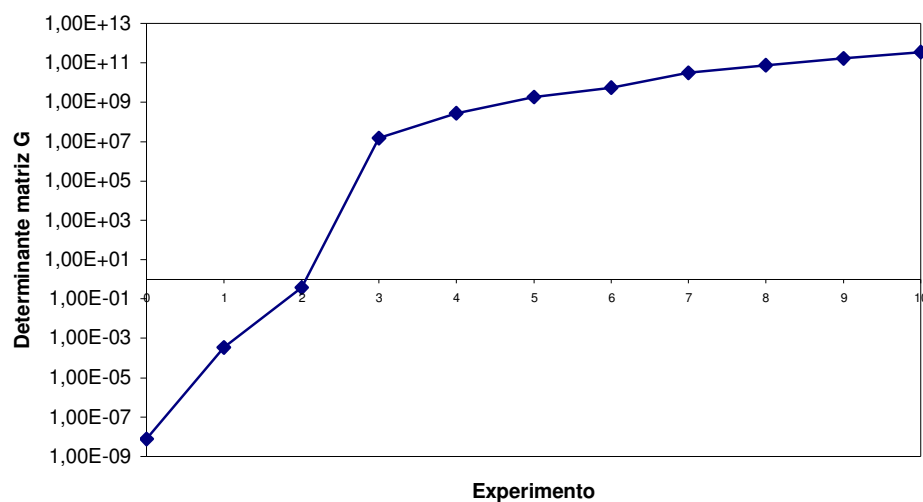


Figura 19. Visualización del determinante de la matriz G en escala logarítmica.

4.3 EXTENSIÓN DE LOS RESULTADOS A LOS DEMÁS CASOS

La extensión de los resultados a los tres conjuntos de constantes restantes requirió de un tiempo total de computo de 458 horas s se llevan a cabo 10 optimizaciones, estimaciones de parámetros y cálculo del siguiente experimento. Estos resultados se muestran en el Anexo 4.

4.4 ANÁLISIS ESTADÍSTICO

Después de realizar los cálculos de simulación de diseño secuencial de experimentos para los cuatro grupos de constantes cinéticas y de los 8 conjuntos de experimentos iniciales, se observó que las condiciones de operación calculados por el diseño secuencial en muchos casos eran las mismas y con distribuciones muy similares. Se procedió entonces a realizar un análisis de frecuencias sobre los diferentes puntos experimentales predichos.

La Tabla 8 presenta el porcentaje de ocurrencia de los experimentos más frecuentes calculados por el diseño secuencial de experimentos para cada uno de los conjuntos de parámetros del modelo cinético. Los puntos de partida fueron desechados, ya que el análisis va dirigido únicamente al comportamiento del diseño secuencial. La mayoría de los experimentos calculados por el diseño secuencial se encuentran representados por cinco condiciones de operación que representan entre 78% y 98% sobre el número total de experimentos calculados.

Tabla 8. Porcentaje representado por las 5 condiciones de operación principales en cada caso.

Carga	Tiempo	Catalizador	Repetición Total	Repetición Constantes 1	Repetición Constantes 2	Repetición Constantes 3	Repetición Constantes 4
0,7	20	5	37,15%	35,00%	43,75%	26,25%	47,92%
0,78	60	5	31,60%	23,75%	35,00%	36,25%	31,25%
0,7	53,85	5	17,01%	20,00%	13,75%	6,25%	16,67%
2	60	5	2,43%	1,25%	0,00%	7,50%	0,00%
2	60	3	1,39%	1,25%	1,25%	1,25%	2,08%
Porcentaje			90%	81%	94%	78%	98%

El hecho de que la distribución de experimentos calculados dependa poco del grupo de constantes usadas y de los conjuntos de experimentos iniciales, permite sugerir que existe un diseño óptimo de experimentos que puede ser usado de forma independiente del sistema carga – catalizador. Entonces, se probaron conjuntos formados de siete a diez condiciones experimentales respetando la distribución del análisis de frecuencia (Tabla 8), para cada uno de estos conjuntos se simuló los datos experimentales del MAT y se realizó la estimación de los parámetros cinéticos. Luego, se examinó los resultados que se obtuvieron, teniendo en cuenta: la proximidad del valor de cada constante con su valor real, la incertidumbre asociada y el valor del determinante de la matriz G. Se determinó que el conjunto que generaba una mejor estimación es el que se muestra en la Tabla 9 formado por diez puntos experimentales. Bajo estas condiciones operativas se garantiza una buena estimación de las constantes cinéticas y de desactivación sin la necesidad de aplicar el diseño secuencial de experimentos (Tablas 10 y 11).

Tabla 9. Grupo de condiciones experimentales óptimas.

Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador Cargado (g)
0,70	20,00	5,00
0,70	20,00	5,00
0,70	20,00	5,00
0,78	60,00	5,00
0,78	60,00	5,00
0,78	60,00	5,00
0,70	53,85	5,00
0,70	53,85	5,00
2,00	60,00	5,00
2,00	60,00	3,00

Tabla 10. Parámetros estimados para condiciones de operación óptimas.

Constantes Calculadas									
Constante	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2
Uno	2,641	6,990	0,745	2,549	0,334	0,039	0,000	0,048	0,000
Dos	0,775	3,303	0,480	1,611	0,062	0,000	0,322	0,027	0,000
Tres	3,076	6,211	0,395	2,037	0,195	0,240	0,000	0,031	0,020
Cuatro	3,608	12,334	1,594	3,008	0,000	0,000	0,004	0,031	0,005

Tabla 11. Incertidumbres asociadas para condiciones de operación óptimas.

Incertidumbres										
Constante	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2	Mat. G
Uno	0,049	0,412	0,329	0,073	0,046	0,039	0,007	0,001	0,005	1,01E+09
Dos	0,030	0,218	0,214	0,096	0,090	0,089	0,031	0,001	0,002	5,31E+04
Tres	0,074	0,389	0,292	0,103	0,050	0,047	0,014	0,002	0,009	1,20E+09
Cuatro	0,070	0,471	0,331	0,125	0,038	0,033	0,011	0,001	0,194	7,10E+05

Luego de haber determinado el conjunto de condiciones experimentales óptimo, notamos la diferencia en las características entre este y el conjunto de condiciones de operación tradicionalmente usadas para pruebas MAT (Tablas 12). Por lo cual se procedió a realizar una comparación entre los resultados arrojados usando cada uno de estos conjuntos para el cálculo de los parámetros del modelo cinético. Los datos experimentales fueron calculados bajo el mismo procedimiento teórico propuesto en el capítulo 3. Después de la estimación se utilizó la ecuación 16 para contrastar los resultados.

$$error = \sum_1^9 (k_{calculada} - k_{teorica})^2 \quad (16)$$

Como podemos observar el conjunto de constantes cinéticas y de desactivación que se estimaron empleando las condiciones tradicionales (Tablas 13 y 14), difieren considerablemente del valor teórico, tienen alta incertidumbre y un bajo valor del determinante de la matriz G. En cambio la estimación realizada con las condiciones experimentales del conjunto propuesto producen resultados satisfactorios como se ve en la Tabla 15.

Tabla 12. Grupo de condiciones experimentales según metodología tradicional.

Carga Inyectada	Tiempo Inyección	Catalizador cargado
g	s	g
0,7	20	5
0,83	24	5
0,96	28	5
1,09	32	5
1,22	36	5
1,35	40	5
1,48	44	5
1,61	48	5
1,74	52	5
1,87	56	5

Tabla 13. Parámetros estimados para condiciones de operación según metodología tradicional.

Constantes Calculadas									
Constante	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2
Uno	4,119	1,383	0,000	0,803	1,361	0,174	0,344	0,049	0,004
Dos	0,872	2,408	0,098	1,820	0,739	0,265	0,179	0,028	0,003
Tres	3,398	0,667	0,000	0,304	0,989	0,198	0,294	0,022	0,002
Cuatro	4,044	0,989	0,000	0,224	1,377	0,170	0,349	0,022	0,001

Tabla 14. Incertidumbres asociadas para condiciones de operación según metodología tradicional.

Incertidumbres										
Constante	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2	Mat. G
Uno	0,194	0,688	0,613	0,123	0,113	0,107	0,013	0,001	0,001	4,31E-03
Dos	0,028	0,233	0,236	0,085	0,159	0,143	0,041	0,001	0,003	4,96E-06
Tres	0,142	0,434	0,358	0,118	0,067	0,060	0,014	0,001	0,001	1,20E+00
Cuatro	0,155	0,462	0,346	0,117	0,060	0,052	0,012	0,001	0,001	1,39E-01

Tabla 15. Diferencia entre constantes teóricas y estimadas por metodología propuesta y tradicional.

Ctes	Metodología	k12	K13	k14	k15	k23	k24	k25	α_1	α_2	Σ error
Uno	Teórica	3	8	1,2	3	0,5	0	0	0,05	0,02	
	Propuesta	2,641	6,99	0,745	2,549	0,334	0,039	0	0,048	0	1,59
	Tradicional	4,119	1,383	0	0,803	1,361	0,174	0,344	0,049	0,004	52,19
Dos	Teórica	1	4	0,6	2	0,2	0	0,5	0,03	0,01	
	Propuesta	0,775	3,303	0,48	1,611	0,062	0	0,322	0,027	0	0,754
	Tradicional	0,872	2,408	0,098	1,82	0,739	0,265	0,179	0,028	0,003	3,3
Tres	Teórica	3	6	0,4	2	0,2	0,2	0	0,03	0,01	
	Propuesta	3,076	6,211	0,395	2,037	0,195	0,24	0	0,031	0,02	0,054
	Tradicional	3,398	0,667	0	0,304	0,989	0,198	0,294	0,022	0,002	32,349
Cuatro	Teórica	3,5	12	1,5	3	0	0	0	0,03	0	
	Propuesta	3,608	12,334	1,594	3,008	0	0	0,004	0,031	0,005	0,132
	Tradicional	4,044	0,989	0	0,224	1,377	0,17	0,349	0,022	0,001	133,538

Un hecho que confirma la importancia de una buena selección de experimentos para la estimación de parámetros cinéticos se presenta en las Figuras 20 y 21. Allí es posible apreciar el perfil de coque a lo largo del lecho de acuerdo a las constantes de la literatura y las obtenidas por la metodología propuesta y la tradicional. En el caso de las constantes reales y las estimadas por la nueva metodología, el perfil de coque

es perfectamente representativo de la realidad, además de que la desviación en uno y otro caso es mínima. La diferencia está en de perfil generado por las constantes estimadas por la metodología tradicional, en donde puede apreciarse una tendencia al aumento de coque depositado a través de la longitud del lecho, hecho desmentido por las observaciones cotidianas.

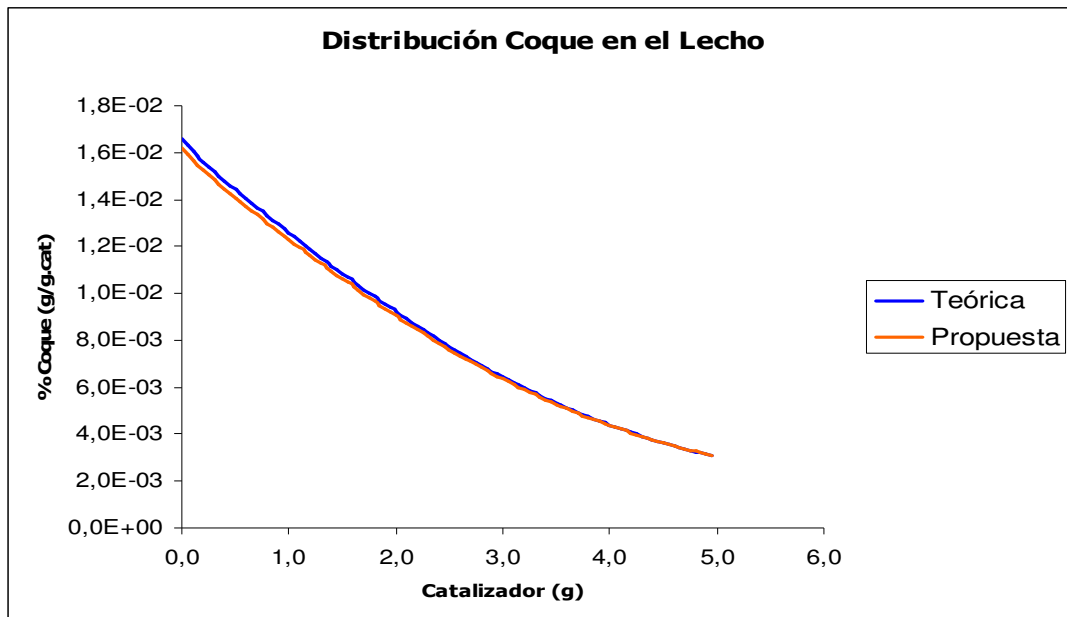


Figura 20. Perfil de coque a lo largo del lecho dado por ctes reales y estimadas por nueva met.

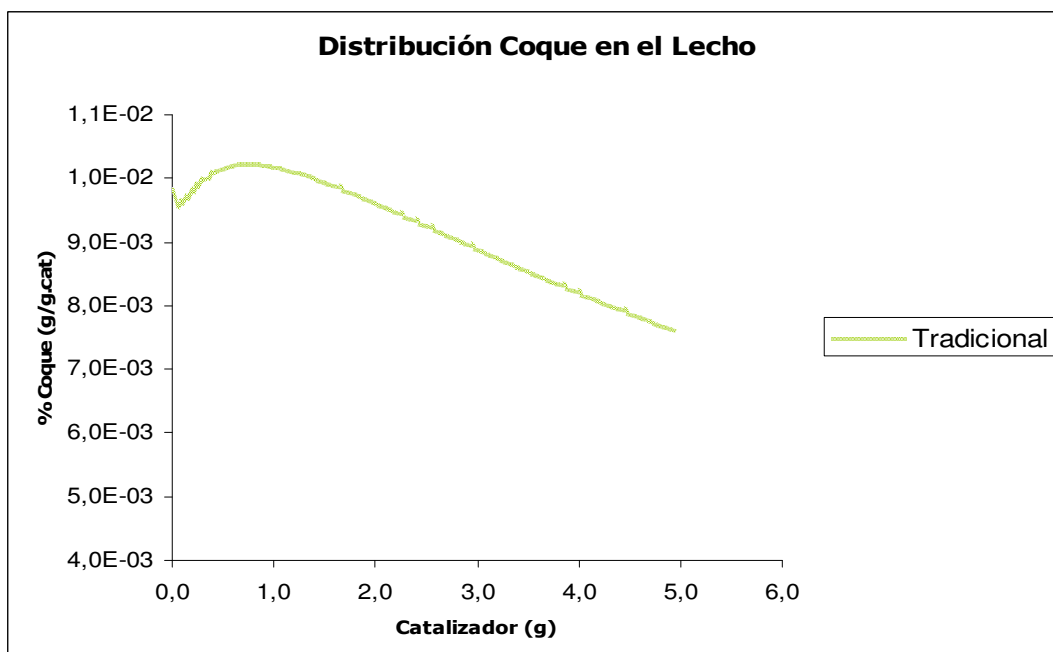


Figura 21. Perfil de coque a lo largo del lecho dado por ctes estimadas por met. Tradicional.

6. CONCLUSIONES

- A través del software de Diseño Secuencial que se desarrolló se pudo predecir como debía realizarse el próximo experimento y con esto mejorar la incertidumbre propia de cada parámetro cinético hasta llegar cerca de los valores teóricos para cada constante, con lo cual se garantizó que el modelo generara datos fiables del proceso de ruptura catalítica en todo el rango de operación del equipo.
- Aun cuando la metodología del diseño secuencial de experimentos es bastante larga y conlleva gran cantidad de cálculos, representa una herramienta de gran importancia que permite predecir cual debe ser el próximo punto (conjunto de condiciones de operación del MAT) en el que debemos experimentar, sustentado bajo un criterio tangible, evitando hacer experimentos al azar.
- Independiente de los tres conjuntos de partida y de los grupos de constantes cinéticas. Se determinó, usando diseño secuencial de experimentos, un conjunto de diez (10) condiciones de operación de MAT (carga inyectada, tiempo de inyección y catalizador cargado) que permiten estimar parámetros del sistema de reacción que sean representativos de la región experimental, que tengan una incertidumbre considerablemente baja y generen buenos rendimientos calculados para los diferentes pseudocomponentes involucrados en el proceso de ruptura catalítica; es decir, se consigue una buena aproximación a la realidad del proceso.

7. RECOMENDACIONES

- Dada la naturaleza teórica de este trabajo recomendamos realizar en el laboratorio diez pruebas de MAT bajo las condiciones experimentales a las que se llegó, a través del diseño secuencial para obtener los rendimientos de cada pseudo componente en porcentajes en peso y así compararlos con los que se usaron dentro de la simulación para poder establecer si la metodología de generación de datos experimentales es adecuada.
- A partir de los datos experimentales arrojados por las diez pruebas realizadas en el laboratorio calcular las constantes cinéticas, sus respectivas incertidumbres y el determinante de la matriz G, para establecer diferencias con las calculadas en este trabajo.
- Utilizando la metodología del diseño secuencial de experimentos y tomando como punto de partida el cálculo aconsejado en el párrafo anterior, hacer la secuencia de mejoramiento de la incertidumbre de los parámetros cinéticos, predecir tres conjuntos de condiciones experimentales para el MAT y determinar si se mejora el error para cada constante, o si, con estos diez conjuntos se ha alcanzado la mejor estimación posible para el sistema y sus condiciones de operación.
- Probar la metodología presentada en este trabajo en otros esquemas cinéticos, en los que se plantee una nueva red de reacción, para establecer como afectan estos cambios al conjunto de condiciones experimentales óptimas, al que se llega para la estimación de parámetros.

- Por ultimo llevar la metodología del diseño secuencial a otro tipo de reactor de ruptura catalítica, como por ejemplo el FFB y hacerle todo el desarrollo hecho en este trabajo.

8. BIBLIOGRAFÍA

- ANCHEYTA, Jorge; and SOTELO, Rogelio. Estimation of kinetic constants of a five-lump model for fluid catalytic cracking process using simpler submodels. En: Energy & Fuels. 2000. N° 14. pp. 1226-1231
- BING H, Chen and STEVEN P, Asprey. On the design of optimally informative dynamic experiments for model discrimination in multiresponse nonlinear situations. En: Ind. Eng. Chem. Res. 2003. Vol. 42. pp. 1379-1390.
- BOX, G. E.; and LUCAS, H. L. Methods for Optimal parameter estimation. En: Biometrika. Vol. 46. 1959. pp. 77-92.
- BOX, G. E.; HUNTER, W.; and HUNTER, J. S. Estadística para investigadores. Barcelona: Revertè, 1989. pp. 123-125
- CORELA, J; BILBAO, R y ARTIGAS, A. Proceso FCC de craqueo catalítico de gasoil a gasolina. Parte 1, Modelos cinéticos de craqueo, métodos de cálculo de sus constantes en diversos tipos de reactores. En: Ingeniería Química. N° 152. Noviembre de 1981. pp 87- 95
- EL SOLH, Tarek. JAROSCH, Kai and DE LASA, Hugo. Catalytic dry reforming of methane in a CREC riser simulator kinetic modeling and model discrimination. En: Ind. Eng. Chem. Res. 2003. Vol. 42. pp. 2507-2515.
- FROMENT, G. F. the kinetic of complex catalytic reaction. En: Chem. Eng. Sci. Vol. 42, N° 5. 1987. pp. 1073-1087
- FROMENT, G.; and BISCHOFF, Kenneth. Chemical reactor analysis and design. 2 Ed. Singapore: WILEY. 1990. pp. 61-117
- FROMENT, G.; and MEZAI, R. Optimal parameter estimation. En: Chem. Ing. Sci. Vol. 25. 1970. pp. 293-311
- GATES, Bruce; KATZER, James R.; and SCHUIT, G. Chemistry of catalytic process. New York: Mc Graw Hill, 1979. pp. 1 -100
- GOLIKERI, Sudhir V. and LUSS, Dan. Analysis of activation energy of grouped parallel reactions. En: AIChE J. Vol. 18 N° 2. Marzo de 1972. pp. 277-282.
- HAENSEL, V. Catalytic cracking of pure hydrocarbons. En: Advances in Catalysis. Vol. 3. 1951. pp. 179-197
- JACOB, Salomón M. y Otros. A lumping and reaction scheme for catalytic cracking. En: AIChE J. Vol. 22, N° 4. Julio de 1976. pp. 701-713
- LENDREM, Dennis. OWEN, Martin and GODBERT, Sonya. DOE (design of experiments) in development chemistry: potential obstacles. En: Organic Process Research and Development. 2001. Vol. 5. pp. 324-327

- MARIN, G. B.; FROMENT, G. F. Hexane reforming on Pt/Al₂O₃ Catalysts. En: Chem. Eng. Sci. Vol. 37. 1982. pp. 754-812
- NACE, Donald. Catalytic cracking over crystalline aluminosilicates: microreactor study of gas oil cracking. En: Ind. Chem. Prod. Res. Develop. Vol. 9, N° 2. 1970. pp. 203-209
- NACE, Donald; VOLTZ, Sterling and WEEKMAN, Jr. Vern. Application of kinetic model for catalytic cracking: Effects of charge stock. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.10, N°4. 1971. pp. 530-538
- PACHOVSKY, R; BEST, D. and WOJCIECHOSKY, B. Application of the time – on – stream theory of catalytic decay. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.15, N°1. 1976. pp. 165-169
- PARASKOS, R. y Otros. A kinematic model of catalytic cracking in transfer line reactor. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.15, N°1. 1971. pp. 165-169
- SHAH, Y. y Otros. A kinematic model for an adiabatic transfer line catalytic cracking reactor. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.16, N°1. 1977. pp. 89-94
- VAN PARIJS, I. A.; and FROMENT, G. Investigated hydrodesulfurization on Co/Mo by means model like thiophene and benzothiophene. En: Ind. Chem. Prod. Res. Vol. 25. 1986. pp. 273-286
- VAN LANDEGHEM, F. y Otros. Fluid catalytic cracking modelling of an industrial riser. En: Applied Catalysis A: General. Vol. 138. 9 de mayo de 1996. pp. 381-405
- VOLTZ, Sterling; NACE, Donald and WEEKMAN, Jr. Vern. Application of kinetic model for catalytic cracking: some correlations of rate constants. En: . Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.10, N°4. 1971. pp. 538-541
- VOORHIES, Alexis. Carbon formation in catalytic cracking. En: Industrial and Engineering Chemistry. Vol. 37, N° 4. Abril de 1945. pp. 319-322
- WEEKMAN Jr., Vern W. A model of catalytic cracking conversion in fixed, moving and fluid – bed reactors. En: Chem. Process Des. Dev. Vol. 7 N° 1. 1968. pp. 90-95.
- WEEKMAN Jr., Vern W. and NACE, Donald M. A model of catalytic cracking conversión in fixed, moving and fluid – bed reactors. En: AIChE J. Vol. 16 N° 3. 1970. pp. 397-404
- VIEIRA, Roberta y Otros. Simulation of catalytic cracking in a fixedfluidizedbed unit. En: Ind. Eng. Chem. Res. Vol. 43. 2004. pp. 6027-6034
- VILLAFUERTE M, E. F.; AGUILAR L, R. y MAYA Y, R. Modelo matemático de reactores de desintegración catalítica de gasóleo. En: Revista Mexicana de Ing. Química. Vol. 2. 2003. pp. 89-94
- YEN, Lewis; WRENCH, Richard E. and OMG, Andres S. Reaction Kinetic correlation equations predicts fluid catalytic cracking coke yields. En: Oil and Gas J. Vol. 86, N° 2. Enero 1988. pp. 67-70.

ANEXO 1

ESQUEMAS CINÉTICOS

Dadas las diferentes posibilidades de agrupamiento de las especies en las reacciones de ruptura catalítica, pueden encontrarse en la literatura una gran variedad de esquemas cinéticos que van desde simples modelos de tres pseudocomponentes, hasta altamente complejos superando los diez, a continuación se presentan los más destacados:

➤ **Modelo de Weekman y Nace (3 pseudocomponentes).**

El amplio espectro de especies reaccionantes y productos de la ruptura catalítica, fueron resumidos por *Weekman y Nace*⁴⁰ en 3 grandes bloques: gasóleo (O), p. eb. > 483 K (C₂₀⁺); gasolina (G), p. eb. 309.5 hasta 483 K (C₅ – C₁₁) y el conjunto (D), formado por el coque y el llamado gas seco (<= C₄); el esquema de reacción⁴¹ se presenta en la figura 1:

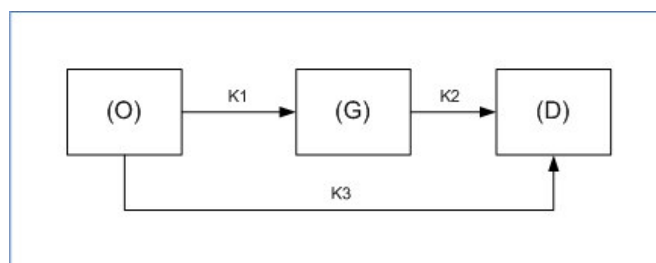


Figura 26. Esquema cinético de 3 pseudocomponentes

Donde:

$K_0 = K_1 + K_3$: constante de velocidad global para la ruptura de gasóleo.

K_1 : constante de velocidad para la formación de gasolina.

K_2 : constante de velocidad para la ruptura de gasolina.

K_3 : constante de velocidad para la formación de coque y gases livianos.

⁴⁰ WEEKMAN Jr., Vern W. and NACE, Donald M. A model of catalytic cracking conversión in fixed, moving and fluid – bed reactors. En: AICHE J. Vol. 16 N° 3. 1970. pp. 397-404

⁴¹ CORELA, J; BILBAO, R y ARTIGAS, A. Proceso FCC de craqueo catalítico de gasoil a gasolina. Parte 1, Modelos cinéticos de craqueo, métodos de cálculo de sus constantes en diversos tipos de reactores. En: Ingeniería Química. N° 152. Noviembre de 1981. pp 87 - 95

El modelo de tres pseudocomponentes consta de tres reacciones, exigiendo para su aplicación el cálculo de tres constantes cinéticas: K_0 ($K_1 + K_3$), K_1 , K_2 .⁴² Esto hace que presente la ventaja de sencillez tanto en el cálculo como en la aplicación del modelo, permitiendo controlar las diferentes variables en diversas situaciones de operación. El inconveniente radica en que las constantes cinéticas dependen de la composición de la carga a procesar y del catalizador utilizado, por lo cual deben determinarse en cada caso concreto. Además no proporciona información sobre la distribución de productos o sobre la calidad de las gasolinas y tipos de gases.

➤ **Modelo de Yen y coautores (4 pseudocomponentes)⁴³.**

Se han hecho varias extensiones a la ecuación de Weekman y Nace para la predicción de rendimientos de gasolina y simulación del proceso FCC). Yen y coautores, desarrollaron ecuaciones cinéticas haciendo énfasis en la predicción del rendimiento de coque. La importancia de la producción de coque radica, en su elevado efecto sobre el proceso de desactivación del catalizador, limitando la extensión de la reacción de ruptura y afectando el rendimiento de los productos primarios.

Los autores llevaron el modelo de tres lumps de Weekman y Nace, a un modelo de cuatro pseudocomponentes, desarrollando una ecuación para el rendimiento de coque. El esquema cinético propuesto es:

⁴² WEEKMAN Jr., Vern W. Op. Cit. Pág.50

⁴³ YEN, Lewis; WRENCH, Richard E. and OMG, Andres S. Reaction Kinetic correlation equatios predicts fluid catalytic cracking coke yields. En: Oil and Gas J. Vol. 86, N° 2. Enero 1988. pp. 67-70

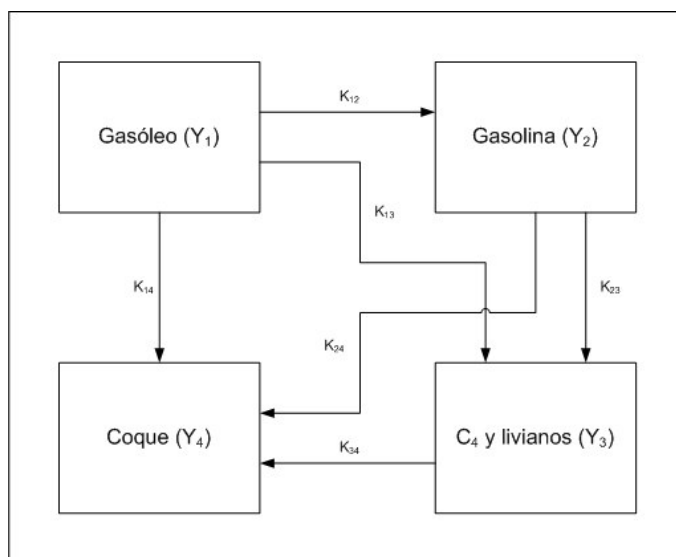


Figura 27. Esquema cinético de 4 pseudocomponentes.

Donde:

- Y: es la fracción en peso.
- K la constante de velocidad de ruptura y los subíndices 1,2,3,4 corresponden al gasóleo, la gasolina, los componentes menores o iguales a C₄ y el coque respectivamente.

➤ **Modelo de Jacob y coautores (10 pseudocomponentes)⁴⁴.**

Nace y coautores⁴⁵ y Voltz y coautores⁴⁶, mostraron que las constantes de velocidad para el sistema de tres pseudocomponentes cambian con la composición de la carga; pero pueden relacionarse con las composiciones de parafinas, naftenos y aromáticos, la misma. Aunque estas correlaciones de constantes de velocidad, son adecuadas para los intervalos de carga investigados, no pueden extrapolarse en forma confiable, para alimentos diferentes a los

⁴⁴ JACOB, Salomón M. y Otros. A lumping and reaction scheme for catalytic cracking. En: AICHE J. Vol. 22, N° 4. Julio de 1976. pp. 701-713

⁴⁵ NACE, Donald; VOLTZ, Sterling and WEEKMAN, Jr. Vern. Application of kinetic model for catalytic cracking: Effects of charge stock. En: Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.10, N°4. 1971. pp. 530-538

⁴⁶ VOLTZ, Sterling; NACE, Donald and WEEKMAN, Jr. Vern. Application of kinetic model for catalytic cracking: some correlations of rate constants. En: . Eng. Chem. Process. Des. Develop. Vol.10, N°4. 1971. pp. 538-541

tratados en principio. Basados en estos resultados y en la ruptura de hidrocarburos puros⁴⁷ y de diferentes tipos de carga; Jacob y coautores, sugirieron el esquema cinético descrito en la figura(). El agrupamiento y esquema de reacción, se basan en las concentraciones de parafinas, naftenos, anillos aromáticos y grupos sustituyentes aromáticos (grupos parafínicos y nafténicos unidos a los anillos aromáticos); en fracciones pesadas y livianas de carga.

Son necesarios diez pseudocomponentes, para describir la ruptura de gasóleos virgenes y corrientes de recicló. Este esquema de agrupamiento determina adecuadamente la gasolina G (309.5 a 494.3 K), el pseudocomponente C (H_2 , HS, $C_1 - C_4$ + coque) y los rendimientos de combustóleo liviano (494.3 a 616.5 K), resultantes de la ruptura de gasóleo; la conversión total (porcentaje en peso), es la suma de los pseudocomponentes G y C. Los cambios de composición resultantes en el LFO (combustóleo liviano: 494.3 a 616.5 K) y en el HFO (combustóleo pesado: 616.15⁺ K) se obtienen con el seguimiento de las concentraciones de los grupos parafínicos, nafténicos, anillos aromáticos y grupos sustituyentes aromáticos, a medida que transcurre la ruptura del gasóleo.

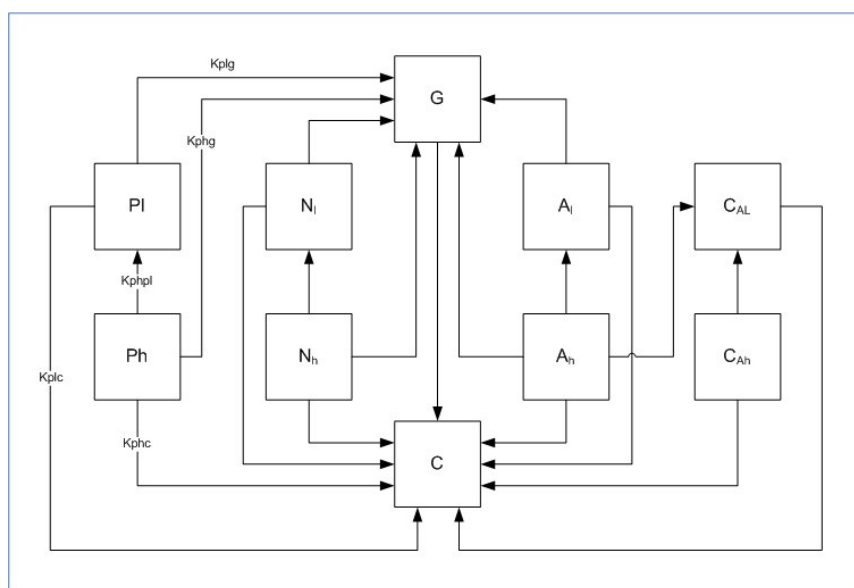


Figura 28. Esquema cinético de 10 pseudocomponentes.⁴⁸

Donde:

⁴⁷ HAENSEL, V. Catalytic cracking of pure hydrocarbons. En: Advances in catalysis. Vol. 3. 1951. pp.179-197

⁴⁸ FROMENT, G. F. the kinetic of complex catalytic reaction. En: chem. Eng. Science. Vol. 42, N° 5. 1987. pp. 1073-1087

K_i : Constantes de velocidad de Ruptura.

K_i : % W de moléculas parafínicas (análisis espec. de masas), 494.3 – 616.5 K

N_i : % W de moléculas nafténicas (análisis espec. de masas), 494.3 - 616.5 K

C_{al} : % W de átomos de carbono entre anillos aromáticos (método n-d-M), 494,3 - 616.5 K

A_i : % W de grupos sustituyentes aromáticos (494.3 - 616.5 K)

P_h : % W de moléculas parafínicas (análisis espectrométrico de masas), 616.5 + K

N_h : % W de moléculas nafténicas (análisis espectrométrico de masas), 616.5 + K

C_{ah} : % W de átomos de carbono entre anillos aromáticos (método n-d-M) 616.5 + K

A_h : % W de grupos sustituyentes aromáticos (616.5 + K)

G: pseudocomponente gasolina (C_5 - 494.5 K)

C: pseudocomponente C (C_1 a C_4 + coque)

$C_{al} + P_i + N_i$: LFO (494.3 – 616.5 K)

$C_{ah} + P_h + N_h + A_h$: (616.5+ K)

El esquema cinético muestra, que una molécula parafínica en el HFO, produce moléculas parafínicas en el LFO ($P_h \rightarrow P_i$) moléculas en el pseudocomponente G, ($P_h \rightarrow G$) y en el pseudocomponente C ($P_h \rightarrow C$). Las moléculas parafínicas en el LFO, se rompen únicamente a moléculas en el pseudocomponente G ($P_i \rightarrow G$) y en el pseudocomponente C ($P_i \rightarrow C$). Igualmente, una molécula nafténica en el HFO, puede formar una molécula nafténica en el LFO y moléculas en los pseudocomponentes G y C. Este esquema indica que no hay interacción entre los grupos parafínicos, nafténicos y aromáticos. La gran ventaja de este modelo, es que restringe la influencia del tipo de carga y catalizador sobre los parámetros calculados, permitiendo un margen mucho mayor de confianza en el momento extrapolar; sin embargo, su alta complejidad analítica que conlleva un intrincado proceso de cálculo lo hace de poca utilidad práctica.⁴⁹

⁴⁹ JACOB, Salomón M. Op. Cit. Pág. 52

ANEXO 2

CODIGO FUENTE DE LA FUNCION RENDIM.

Function rendim(cargainyec, tiempoynec, catalizador, k120, k130, k140, k150 As Double, k230, k240, k250, alfa10, alfa20)

'ESTA FUNCIÓN CALCULA LOS RENDIMIENTOS PARA UN MODELO DE 5 SEUDOCOMPONENTES

'Parámetros cinéticos del sistema.

Dim k12 As Double 'Cte cinética carga-gasolina
Dim k13 As Double 'Cte cinética carga-GLP
Dim k14 As Double 'Cte cinética carga-gases
Dim k15 As Double 'Cte cinética carga-coque
Dim k23 As Double 'Cte cinética gasolina-GLP
Dim k24 As Double 'Cte cinética gasolina-gases
Dim k25 As Double 'Cte cinética gasolina-coque
Dim alfa1 As Double 'Cte de desactivación por carga
Dim alfa2 As Double 'Cte de desactivación por gasolina

'Condiciones de Operación.

Dim presion As Double 'Presión de la reacción en Pa
Dim temperatura As Double 'Temperatura en K
Dim R As Double 'R en (m³*Pa)/(mol*K)
Dim concentot As Double 'Concentración Total en mol/m³
Dim numdeltaw As Integer 'Número de deltas de peso de catalizador
Dim numdeltat As Integer 'Número de deltas de tiempo
Dim dimension As Double 'Definición largo de matriz
Dim i As Long 'Contador para el delta de peso de catalizador
Dim j As Long 'Contador para el delta de tiempo

'PESOS MOLECULARES DE LOS LUMPS

Dim pmcar As Double 'Peso molecular promedio de la carga
Dim pmgal As Double 'Peso molecular promedio de la gasolina
Dim pmglp As Double 'Peso molecular promedio de la GLP
Dim pmgas As Double 'Peso molecular promedio de la gases

'Matrices de los Seudocomponentes.

Dim carga() As Double 'en mol/s
Dim gasolina() As Double 'en mol/s

```

Dim glp() As Double          'en mol/s
Dim gases() As Double       'en mol/s
Dim cargap() As Double      'en mol/s
Dim gasolinap() As Double   'en mol/s
Dim glpp() As Double        'en mol/s
Dim gasesp() As Double      'en mol/s
Dim ccarga() As Double      'en mol/m3
Dim cgasolina() As Double   'en mol/m3
Dim cglp() As Double        'en mol/m3
Dim cgases() As Double      'en mol/m3
Dim coque() As Double       'en g/g (coque/catalizador)
Dim coquet() As Double      'en g/g (coque/catalizador)
Dim fmol()                  'en mol/s
Dim fmoltot As Double       'en mol/s
Dim inerte As Double        'en mol/s
'
'Funciones de desactivación
'
Dim fi1() As Double         'función de desactivación respecto a la carga
Dim fi2() As Double         'función de desactivación respecto a la gasolina
'
'Velocidades de reacción
'
Dim r12() As Double         'en mol/(s*g.cat)
Dim r13() As Double         'en mol/(s*g.cat)
Dim r14() As Double         'en mol/(s*g.cat)
Dim r15() As Double         'en mol/(s*g.cat)
Dim r23() As Double         'en mol/(s*g.cat)
Dim r24() As Double         'en mol/(s*g.cat)
Dim r25() As Double         'en mol/(s*g.cat)
'
'Definición de deltas.
'
Dim deltaw As Double        'en gramos de catalizador
Dim deltat As Double        'en segundos
'
'Cantidad de datos que se van a presentar y escala de ajuste.
'
Dim numdatpresen As Integer
Dim escala As Double
'
'Escalamiento de constantes cinéticas
'
k12 = k120 * 0.000001
k13 = k130 * 0.0000001
k14 = k140 * 0.0000001
k15 = k150 * 0.0000001

```

```

k23 = k230 * 0.000001
k24 = k240 * 0.000001
k25 = k250 * 0.000001
alfa1 = alfa10 * 10000
alfa2 = alfa20 * 10000
'presion en Pa y temperatura en K
'
presion = 680 / 760 * 101325
temperatura = 773
'
'R en m3Pa/molK
'
R = 8.31416953
'
'Concentración total de gases en mol/m3
'
concentot = presion / (R * temperatura)
'
'Asignación de pesos molares
'
pmcar = Worksheets("Condiciones Iniciales").Cells(14, 3).Value
pmgal = Worksheets("Condiciones Iniciales").Cells(15, 3).Value
pmglp = Worksheets("Condiciones Iniciales").Cells(16, 3).Value
pmgas = Worksheets("Condiciones Iniciales").Cells(17, 3).Value
'
'Número de iteraciones a lo largo del reactor y del tiempo
'
numdeltaw = 100
numdeltat = 100
If numdeltaw > numdeltat Then
    dimension = numdeltaw
Else
    dimension = numdeltat
End If
'
'Redimensionamiento de matrices
'
ReDim carga(dimension)
ReDim gasolina(dimension)
ReDim glp(dimension)
ReDim gases(dimension)
ReDim fmol(dimension)
'
ReDim ccarga(numdeltaw)
ReDim cgasolina(numdeltaw)
ReDim cglp(numdeltaw)
ReDim cgases(numdeltaw)

```

```

ReDim r12(numdeltaw)
ReDim r13(numdeltaw)
ReDim r14(numdeltaw)
ReDim r15(numdeltaw)
ReDim r23(numdeltaw)
ReDim r24(numdeltaw)
ReDim r25(numdeltaw)
ReDim fi1(numdeltaw)
ReDim fi2(numdeltaw)
'
ReDim cargap(numdeltat)
ReDim gasolinap(numdeltat)
ReDim glpp(numdeltat)
ReDim gasesp(numdeltat)
ReDim coquet(numdeltat)
ReDim coque(numdeltaw, numdeltat)
'
'Cálculo de deltaw y deltat
'
deltaw = catalizador / numdeltaw
deltat = tiempoyec / numdeltat
'
'Asignación de valores iniciales de los flujos molares, mol/s
carga(0) = cargainyec / (tiempoynyec * pmcar)
gasolina(0) = 0
glp(0) = 0
gases(0) = 0
inerte = 0.000018
'
'Asignación inicial de la cantidades depositadas de coque en el catalizador
'
For j = 0 To numdeltat - 1
    coquet(j + 1) = 0
    For i = 0 To numdeltaw - 1
        coque(i, j) = 0
    Next i
Next j
'
'CÁLCULO DE LOS RENDIMIENTOS INSTANTÁNEOS
'
'Resolución del sistema de ecuaciones en el tiempo
'
For j = 0 To numdeltat - 1
    '
    'Calculo de las funciones de desactivación
    '
    For i = 0 To numdeltaw - 1

```

```

    fi1(i) = Exp(-alfa1 * coque(i, j))
    fi2(i) = Exp(-alfa2 * coque(i, j))
Next i
,
'Resolución del modelo a lo largo del reactor
,
For i = 0 To numdeltaw - 1
    'Cálculo de las concentraciones de los lumps a la entrada de dw
    'concentraciones en mol/m3
    'fmoltot en mol/s
    ,
    fmol(i) = carga(i) + gasolina(i) + glp(i) + gases(i) + inerte
    ccarga(i) = carga(i) / fmol(i) * concentot
    cgasolina(i) = gasolina(i) / fmol(i) * concentot
    cglp(i) = glp(i) / fmol(i) * concentot
    cgases(i) = gases(i) / fmol(i) * concentot
    ,
    'Cálculo de las velocidades de reacción, mol/s
    ,
    r12(i) = k12 * ccarga(i) ^ 2 * deltaw * fi1(i)
    r13(i) = k13 * ccarga(i) ^ 2 * deltaw * fi1(i)
    r14(i) = k14 * ccarga(i) ^ 2 * deltaw * fi1(i)
    r15(i) = k15 * ccarga(i) ^ 2 * deltaw * fi1(i)
    r23(i) = k23 * cgasolina(i) * deltaw * fi2(i)
    r24(i) = k24 * cgasolina(i) * deltaw * fi2(i)
    r25(i) = k25 * cgasolina(i) * deltaw * fi2(i)
    ,
    'Cálculo de las nuevas moles salientes de cada dx
    ,
    carga(i + 1) = carga(i) - r12(i) - r13(i) - r14(i) - r15(i)
    gasolina(i + 1) = gasolina(i) + (pmcar / pmgal) * r12(i) - r23(i) - r24(i) - r25(i)
    glp(i + 1) = glp(i) + (pmcar / pmglp) * r13(i) + (pmgal / pmglp) * r23(i)
    gases(i + 1) = gases(i) + (pmcar / pmgas) * r14(i) + (pmgal / pmgas) * r24(i)
    ,
    'Coque g de coque acumuladas en el catalizador, g/g catal fresco
    ,
    coque(i, j + 1) = coque(i, j) + (pmcar * r15(i) + pmgal * r25(i)) * deltat / deltaw
Next i
,
'Cálculo de la concentración instantánea de productos a la salida de MAT
,
cargap(j + 1) = carga(numdeltaw)
gasolinap(j + 1) = gasolina(numdeltaw)
glpp(j + 1) = glp(numdeltaw)
gasesp(j + 1) = gases(numdeltaw)
,
'cálculo del contenido promedio de coque acumulado en el catalizador en g coque/g catal

```

```

',
  For i = 0 To numdeltaw - 1
    coquet(j + 1) = coquet(j + 1) + coque(i, j + 1)
  Next i
coquet(j + 1) = coquet(j + 1) / numdeltaw
Next j
',
'CÁLCULO DE LOS RENDIMIENTOS PROMEDIO EN EL TIEMPO
',
'Inicialización de valores
',
carga(0) = 0
gasolina(0) = 0
glp(0) = 0
gases(0) = 0
',
'Sumatorias en g
'carga(),gasolina(), glp(), gases(), fmol() en g
',
For i = 0 To numdeltat - 1
  carga(i + 1) = carga(i) + pmcar * cargap(i + 1) * deltat
  gasolina(i + 1) = gasolina(i) + pmgal * gasolinap(i + 1) * deltat
  glp(i + 1) = glp(i) + pmglp * glpp(i + 1) * deltat
  gases(i + 1) = gases(i) + pmgas * gasesp(i + 1) * deltat
  fmol(i + 1) = carga(i + 1) + gasolina(i + 1) + glp(i + 1) + gases(i + 1) + coquet(i + 1) *
catalizador
Next i
',
'Rendimientos promedio en masa glump/gtotales de salida
',
cargap(0) = carga(numdeltat) / fmol(numdeltat)
cargap(1) = gasolina(numdeltat) / fmol(numdeltat)
cargap(2) = glp(numdeltat) / fmol(numdeltat)
cargap(3) = gases(numdeltat) / fmol(numdeltat)
cargap(4) = coquet(numdeltat) / fmol(numdeltat) * catalizador
rendim = cargap()
',
End Function

```

ANEXO 3

CODIGO FUENTE DE LA FUNCION DISEÑO SECUENCIAL.

```
Function diseñosecuencial(cargan, tiempn, catalizadorn, numerodatos)
'
Dim k(9) As Double          ' Vector de constes de reacción
Dim rendimiento As Variant  ' Vector de rendimientos de los seudocomponentes
Dim rendimiento1 As Variant ' Vector de rendimimiento con variación de las ctes
cinéticas
Dim deltak As Double       ' Definición delta de cambio
Dim cargainye() As Double  ' Vector de gramos de carga inyectada en cada corrida
Dim tiempoinye() As Double ' Vector de tiempos de inyección en cada corrida
Dim catalizado() As Double ' Vectos de gramos de catalizador en cada corrida
Dim jacobcarga() As Double ' Matriz jacobiano de la carga
Dim jacobgasolina() As Double ' Matriz jacobiano de la gasolina
Dim jacobglp() As Double   ' Matriz jacobiano del GLP
Dim jacobgases() As Double ' Matriz jacobiano de los gases
Dim jacobcoque() As Double ' Matriz jacobiano del coque
'
Dim jacobcargat() As Double ' Matriz transpuesta del jacobiano de la carga
Dim jacobgasolinat() As Double ' Matriz transpuesta del jacobiano de la gasolina
Dim jacobglpt() As Double   ' Matriz transpuesta del jacobiano del GLP
Dim jacobgaseset() As Double ' Matriz transpuesta del jacobiano de los gases
Dim jacobcoquet() As Double ' Matriz transpuesta del jacobiano del coque
'
Dim jacobcargac() As Double ' Matriz de la multiplicación de matriz de carga por su
transpuesta
Dim jacobgasolinac() As Double ' Matriz de la multiplicación de matriz de gasolina por su
transpuesta
Dim jacobglpc() As Double    ' Matriz de la multiplicación de matriz de GLP por su
transpuesta
Dim jacobgasesc() As Double  ' Matriz de la multiplicación de matriz de gases por su
transpuesta
Dim jacobcoquec() As Double  ' Matriz de la multiplicación de matriz de coque por su
transpuesta
'
Dim sumajab() As Double      ' Definición matris G (suma de la multiplicación de
jacobianos)
'
' Variables Operacionales
'
Dim i As Integer
Dim j As Integer
Dim l As Integer
```

```

',
'Lectura del valor delta desde la hoja
',
deltak = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(10, 7).Value
',
',
'Redimensionamiento de variables
',
ReDim cargainye(numerodatos) As Double
ReDim tiempoinye(numerodatos) As Double
ReDim catalizado(numerodatos) As Double
',
',
' LECTURA DE LOS DATOS DE LAS CONDICIONES EN QUE LOS ANTERIORES
MATS SE REALIZARON
'Verificado
',
For i = 0 To numerodatos - 1
    cargainye(i) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(i + 4, 2).Value
    tiempoinye(i) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(i + 4, 3).Value
    catalizado(i) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(i + 4, 4).Value
Next i
',
'Redimensionamiento de variables
',
ReDim jacobcarga(numerodatos, 9) As Double
ReDim jacobgasolina(numerodatos, 9) As Double
ReDim jacobglp(numerodatos, 9) As Double
ReDim jacobgases(numerodatos, 9) As Double
ReDim jacobcoque(numerodatos, 9) As Double

ReDim jacobcargat(9, numerodatos) As Double
ReDim jacobgasolinat(9, numerodatos) As Double
ReDim jacobglpt(9, numerodatos) As Double
ReDim jacobgaseset(9, numerodatos) As Double
ReDim jacobcoquet(9, numerodatos) As Double

ReDim jacobcargac(9, 9) As Double
ReDim jacobgasolinac(9, 9) As Double
ReDim jacobglpc(9, 9) As Double
ReDim jacobgasesc(9, 9) As Double
ReDim jacobcoquec(9, 9) As Double
ReDim sumajab(9, 9) As Double
',
',
'CÁLCULO DE LOS JACOBIANOS PARA LOS MATS YA REALIZADOS
'Verificado

```

```

',
For l = 0 To numerodatos - 1
  'Cálculo de rendimientos en el punto inicial de cada experimento
  For i = 0 To 8
    k(i + 1) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(20, i + 1).Value
  Next i
  rendimiento = rendim(cargainye(l), tiempoinye(l), catalizado(l), k(1), k(2), k(3), k(4),
k(5), k(6), k(7), k(8), k(9))
',
'Calculo de los jacobianos en las variaciones de las Constantes cinéticas para cada
seudocomponente
',
  For i = 0 To 8
    For j = 0 To 8
      If j = i Then
        k(j + 1) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(20, j + 1).Value + deltak
      Else
        k(j + 1) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(20, j + 1).Value
      End If
    Next j
    rendimiento1 = rendim(cargainye(l), tiempoinye(l), catalizado(l), k(1), k(2), k(3), k(4),
k(5), k(6), k(7), k(8), k(9))
    jacobcarga(l, i) = (rendimiento1(0) - rendimiento(0)) / deltak
    jacobgasolina(l, i) = (rendimiento1(1) - rendimiento(1)) / deltak
    jacobglp(l, i) = (rendimiento1(2) - rendimiento(2)) / deltak
    jacobgases(l, i) = (rendimiento1(3) - rendimiento(3)) / deltak
    jacobcoque(l, i) = (rendimiento1(4) - rendimiento(4)) / deltak
  Next i
Next l
',
',
'CALCULO DE LA ÚLTIMA FILA DE LOS JACOBIANOS
',
',
'Cálculo de rendimientos en el punto inicial de cada experimento
For i = 0 To 8
  k(i + 1) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(20, i + 1).Value
Next i
rendimiento = rendim(cargan, tiempom, catalizadom, k(1), k(2), k(3), k(4), k(5), k(6), k(7),
k(8), k(9))
',
'Calculo de los jacobianos en las variaciones de las Constantes cinéticas para cada
seudocomponente
',
  For i = 0 To 8
    For j = 0 To 8
      If j = i Then

```

```

        k(j + 1) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(20, j + 1).Value + deltak
    Else
        k(j + 1) = Worksheets("Diseño Secuencial").Cells(20, j + 1).Value
    End If
Next j
rendimiento1 = rendim(cargan, tiempon, catalizadorn, k(1), k(2), k(3), k(4), k(5), k(6),
k(7), k(8), k(9))
jacobcarga(umerodatos, i) = (rendimiento1(0) - rendimiento(0)) / deltak
jacobgasolina(umerodatos, i) = (rendimiento1(1) - rendimiento(1)) / deltak
jacobglp(umerodatos, i) = (rendimiento1(2) - rendimiento(2)) / deltak
jacobgases(umerodatos, i) = (rendimiento1(3) - rendimiento(3)) / deltak
jacobcoque(umerodatos, i) = (rendimiento1(4) - rendimiento(4)) / deltak
Next i
'
'
'TRANSPOSICION DE JACOBIANOS
'
'
'Cálculo de transpuestas de los jacobianos de los diferentes pseudocomponentes
'
For i = 0 To 8
    For j = 0 To umerodatos
        jacobcargat(i, j) = jacobcarga(j, i)
        jacobgasolinat(i, j) = jacobgasolina(j, i)
        jacobglpt(i, j) = jacobglp(j, i)
        jacobgasesat(i, j) = jacobgases(j, i)
        jacobcoquet(i, j) = jacobcoque(j, i)
    Next j
Next i
'
'
'MULTIPLICACIÓN DE TRANSPUESTAS POR MATRICES
'
'
'Inicialización de jacobianos cuadrados
'
For i = 0 To 8
    For j = 0 To 8
        jacobcargac(i, j) = 0
        jacobgasolinac(i, j) = 0
        jacobglpc(i, j) = 0
        jacobgasesc(i, j) = 0
        jacobcoquec(i, j) = 0
    Next j
Next i
'
'Multiplicación de jacobianos

```

```

',
For i = 0 To 8
  For j = 0 To 8
    For l = 0 To numerodatos
      jacobcargac(i, j) = jacobcargac(i, j) + jacobcargat(i, l) * jacobcarga(l, j)
      jacobgasolinac(i, j) = jacobgasolinac(i, j) + jacobgasolinat(i, l) * jacobgasolina(l, j)
      jacobglpc(i, j) = jacobglpc(i, j) + jacobglpt(i, l) * jacobglp(l, j)
      jacobgasesc(i, j) = jacobgasesc(i, j) + jacobgasesest(i, l) * jacobgases(l, j)
      jacobcoquec(i, j) = jacobcoquec(i, j) + jacobcoquet(i, l) * jacobcoque(l, j)
    Next l
  Next j
Next i
',
',
',
'CÁLCULO DE LA MATRIZ "G" (o matríz de las suma de las multiplicaciones matríz por
transpuesta)
',
',
For i = 0 To 8
  For j = 0 To 8
    sumajab(i, j) = jacobcargac(i, j) + jacobgasolinac(i, j) + jacobglpc(i, j) + jacobgasesc(i,
j) + jacobcoquec(i, j)
  Next j
Next i
',
diseñosecuencial = sumajab()
',
End Function

```

ANEXO 4

Constantes

Juego	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2
Uno	3,000	8,000	1,200	3,000	0,500	0,000	0,000	0,050	0,020

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
1	1,67	39,34	3,96
	0,91	23,90	4,39
	1,76	52,96	3,65

Datos Generados.

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	
0,75	57,56	5,00	0,862	2,490	0,503	0,024	0,000	0,052	0,027	0,108	0,973	0,871	0,132	0,213	0,192	0,026	-0,003	0,028	-0,003	0,028	7,04E-06
0,70	20,00	5,00	1,005	2,353	0,627	0,014	0,000	0,052	0,048	0,089	0,780	0,662	0,115	0,250	0,228	0,030	0,002	0,036	0,002	0,036	1,43E+01
0,78	60,00	5,00	1,116	2,468	0,698	0,015	0,000	0,051	0,055	0,077	0,654	0,557	0,102	0,199	0,183	0,023	0,002	0,028	0,002	0,028	5,92E+01
1,06	60,00	5,00	1,070	2,519	0,675	0,015	0,000	0,051	0,050	0,066	0,569	0,493	0,087	0,169	0,156	0,019	-0,002	0,023	-0,002	0,023	1,60E+02
0,70	20,00	5,00	1,165	2,652	0,656	0,015	0,000	0,050	0,046	0,061	0,528	0,451	0,084	0,152	0,140	0,018	0,001	0,020	0,001	0,020	1,96E+03
0,70	53,85	5,00	1,217	2,759	0,622	0,015	0,000	0,051	0,047	0,057	0,484	0,409	0,080	-0,128	0,117	0,015	0,001	0,017	0,001	0,017	5,47E+04
0,70	20,00	5,00	1,277	2,828	0,587	0,011	0,000	0,050	0,039	0,054	0,459	0,386	0,077	0,110	0,100	0,014	0,001	0,015	0,001	0,015	2,63E+05
0,78	60,00	5,00	1,261	2,863	0,558	0,010	0,000	0,050	0,034	0,049	0,416	0,350	0,072	0,090	0,082	0,011	0,001	-0,012	0,001	-0,012	1,54E+06
1,31	60,00	5,00	1,284	2,870	0,620	0,009	0,000	0,050	0,041	0,045	0,389	0,333	0,065	-0,095	0,088	0,012	0,001	0,012	0,001	0,012	9,59E+05
0,70	20,00	5,00	1,309	2,921	0,634	0,006	0,000	0,050	0,042	0,044	0,376	0,319	0,063	-0,095	0,087	0,012	0,001	0,012	0,001	0,012	1,43E+06

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
2	0,79	36,21	3,44
	1,22	34,18	4,27
	1,08	28,17	4,07

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	3,599	9,121	1,462	3,356	0,859	0,000	0,017	0,056	0,044	0,179	1,577	1,506	0,218	0,383	0,354	0,044	0,003	0,035	2,610E-02
0,70	20,00	5,00	3,338	8,578	1,463	3,123	0,945	0,000	0,012	0,055	0,056	-0,095	0,826	0,747	-0,122	0,257	0,237	0,030	0,002	0,026	3,581E-03
0,78	60,00	5,00	3,257	8,524	1,412	3,164	1,038	0,000	0,010	0,053	0,074	-0,076	0,646	0,581	-0,102	0,220	0,203	0,024	0,002	0,025	3,300E+00
0,70	20,00	5,00	3,428	9,035	1,444	3,283	1,051	0,000	0,015	0,054	0,075	-0,069	0,588	0,522	-0,093	0,202	0,188	0,022	0,001	-0,023	5,699E+00
0,78	60,00	5,00	3,409	8,911	1,390	3,275	1,155	0,000	0,014	0,054	0,081	-0,061	0,508	0,451	-0,082	0,175	0,163	0,019	0,001	0,019	9,224E+00
0,70	20,00	5,00	3,143	8,265	1,265	3,036	1,303	0,000	0,009	0,053	0,103	-0,057	0,477	0,418	-0,078	0,170	0,158	0,018	0,001	0,019	2,642E+01
0,78	60,00	5,00	3,127	8,263	1,277	2,996	1,399	0,000	0,005	0,053	0,120	-0,047	0,393	0,340	0,065	0,184	0,169	0,018	0,001	0,024	1,110E+01
1,72	60,00	5,00	3,113	8,162	1,272	2,989	1,360	0,000	0,005	0,053	0,112	-0,043	0,364	0,318	0,059	0,167	0,154	0,017	0,001	0,021	6,147E+01
1,79	60,00	5,00	3,120	8,189	1,273	3,019	1,223	0,000	0,004	0,052	0,095	-0,040	0,342	0,301	-0,054	0,143	0,131	0,015	0,001	0,018	2,389E+02
0,70	53,85	5,00	3,125	8,290	1,278	3,038	1,289	0,000	0,002	0,052	0,111	-0,038	0,321	0,281	-0,051	0,139	0,128	0,014	0,001	0,019	5,993E+02

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
3	0,96	59,52	3,67
	1,19	23,14	3,95
	1,90	59,17	3,45

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	3,067	7,644	1,293	3,171	0,410	0,000	0,001	0,047	0,001	-0,133	1,209	1,100	0,180	0,139	0,117	0,021	-0,002	0,012	4,261E+03
0,70	20,00	5,00	3,128	7,539	1,032	3,107	0,428	0,028	0,001	0,049	0,001	-0,106	0,940	0,817	-0,145	0,117	0,099	0,017	0,002	0,010	2,159E+05
0,78	60,00	5,00	3,039	7,566	1,016	2,988	0,389	0,016	0,002	0,049	0,002	-0,086	0,749	0,643	0,117	0,085	0,072	0,013	0,002	0,008	1,869E+06
0,70	20,00	5,00	3,208	8,369	1,210	3,104	0,577	0,000	0,013	0,051	0,025	-0,075	0,638	0,547	-0,104	0,119	0,108	0,016	-0,002	0,012	6,543E+04
0,78	60,00	5,00	3,243	8,438	1,227	3,147	0,672	0,000	0,018	0,051	0,033	-0,065	0,539	0,466	-0,090	-0,109	0,100	0,014	0,001	-0,010	5,167E+04
0,70	20,00	5,00	3,057	8,210	1,034	3,017	0,736	0,017	0,016	0,050	0,045	-0,063	0,517	0,437	-0,090	0,134	0,124	0,017	0,001	0,014	2,844E+04
0,78	60,00	5,00	3,031	8,205	1,028	2,956	0,947	0,015	0,017	0,050	0,072	-0,057	0,469	0,397	0,081	0,158	0,147	0,019	0,001	0,018	8,357E+02
1,05	20,00	5,00	2,987	8,287	1,039	2,922	1,012	0,014	0,009	0,051	0,092	0,056	0,466	0,397	0,079	0,186	0,173	0,021	0,001	0,026	9,543E+01
2,00	60,00	5,00	3,075	8,553	1,096	3,024	1,215	0,010	0,009	0,052	0,123	-0,054	0,458	0,397	-0,074	0,222	0,207	0,023	0,001	0,034	8,721E+01
0,70	53,85	5,00	3,087	8,603	1,114	3,019	1,072	0,009	0,011	0,052	0,103	-0,050	0,424	0,365	-0,070	0,173	0,161	0,019	0,001	0,025	2,570E+02

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
4	0,96	25,43	4,97
	1,07	40,35	4,84
	1,27	26,54	4,84

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	2,453	6,932	0,967	2,494	0,734	0,017	0,000	0,046	0,058	0,084	0,735	0,637	0,124	0,278	0,255	0,036	-0,002	0,038	4,067E-01
0,70	20,00	5,00	3,304	8,796	1,282	3,442	0,808	0,018	0,019	0,049	0,049	-0,113	0,974	0,864	0,167	0,294	0,274	0,038	0,002	0,029	5,144E+00
0,78	60,00	5,00	3,104	8,474	1,072	3,276	0,798	0,012	0,010	0,048	0,060	-0,095	0,813	0,709	-0,143	0,254	0,238	0,032	-0,002	0,031	1,411E+01
0,70	20,00	5,00	2,928	8,089	1,007	3,156	0,828	0,010	0,008	0,046	0,068	0,076	0,647	0,547	-0,121	0,238	0,222	0,030	-0,002	0,031	2,168E+01
0,78	60,00	5,00	2,947	8,207	1,076	3,117	0,870	0,007	0,010	0,047	0,080	0,067	0,565	0,480	-0,106	0,196	0,183	0,025	-0,001	0,026	9,003E+01
1,95	60,00	5,00	3,016	8,562	1,149	3,203	0,947	0,006	0,011	0,048	0,100	-0,065	0,557	0,483	-0,098	0,246	0,231	0,029	-0,001	0,039	7,057E+00
1,74	60,00	5,00	3,006	8,527	1,165	3,127	1,176	0,004	0,015	0,049	0,137	-0,062	0,533	0,468	-0,089	0,303	0,285	0,034	-0,001	0,051	4,296E+00
0,70	53,85	5,00	3,019	8,629	1,214	3,111	1,243	0,004	0,017	0,049	0,161	-0,059	0,502	0,438	-0,085	0,297	0,278	0,033	0,001	0,054	4,202E+00
0,70	20,00	4,00	3,011	8,663	1,213	3,102	1,302	0,004	0,017	0,049	0,176	-0,053	0,460	0,401	-0,078	0,300	0,281	0,033	-0,001	0,056	5,371E+00
0,70	53,85	5,00	3,018	8,649	1,236	3,083	1,372	0,004	0,016	0,050	0,184	-0,050	0,423	0,367	-0,072	0,270	0,252	0,029	-0,001	0,050	1,092E+01

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
5	1,72	51,15	3,03
	0,93	24,36	3,04
	0,94	34,90	3,88

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	3,422	8,827	0,943	3,694	0,575	0,048	0,000	0,049	0,023	0,140	1,249	1,160	0,195	0,217	0,197	0,030	0,002	0,021	9,684E-01
0,70	20,00	5,00	2,945	7,820	0,826	3,206	0,684	0,033	0,000	0,047	0,040	0,096	0,836	0,724	-0,144	0,232	0,212	0,032	-0,002	0,026	3,127E+01
0,86	60,00	5,00	3,004	7,959	0,891	3,158	0,707	0,033	0,000	0,048	0,039	-0,078	0,677	0,594	-0,113	0,172	0,157	0,022	-0,002	0,018	6,003E+02
0,70	20,00	5,00	3,101	8,172	1,105	3,249	0,793	0,019	0,000	0,049	0,047	-0,072	0,623	0,538	-0,107	0,179	0,164	0,022	-0,001	0,019	5,218E+02
0,78	60,00	5,00	3,152	8,374	1,213	3,272	0,773	0,019	0,000	0,050	0,048	-0,066	0,565	0,491	-0,097	0,149	0,138	0,018	0,001	0,017	1,743E+03
0,78	60,00	5,00	3,120	8,431	1,201	3,323	0,768	0,020	0,000	0,049	0,056	-0,063	0,538	0,468	-0,095	0,148	0,138	0,018	-0,001	0,019	1,101E+03
0,70	20,00	5,00	3,138	8,488	1,234	3,305	0,767	0,020	0,000	0,049	0,056	-0,057	0,488	0,420	-0,087	0,138	0,128	0,016	0,001	0,018	2,778E+03
0,78	60,00	3,62	3,147	8,635	1,257	3,283	0,751	0,020	0,000	0,050	0,056	-0,055	0,472	0,412	-0,081	0,135	0,125	0,016	0,001	0,018	7,932E+03
0,70	53,85	5,00	3,135	8,538	1,236	3,221	0,769	0,020	0,000	0,050	0,055	-0,051	0,433	0,375	-0,075	0,116	0,108	0,014	0,001	0,015	3,460E+04
0,70	20,00	5,00	3,082	8,545	1,238	3,208	0,747	0,019	0,000	0,049	0,056	-0,048	0,409	0,350	-0,072	0,115	0,107	0,014	-0,001	0,015	5,905E+04

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
6	1,91	51,46	4,33
	0,79	29,50	3,63
	1,36	27,91	3,52

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	3,086	8,759	0,830	2,946	0,294	0,099	0,000	0,053	0,002	-0,159	1,435	1,335	0,198	0,172	0,151	0,025	0,003	0,019	3,884E+02
0,70	20,00	5,00	2,960	8,312	1,091	2,847	0,309	0,060	0,000	0,052	0,002	0,108	0,969	0,847	0,145	0,130	0,112	0,020	0,002	0,016	3,954E+04
0,78	60,00	5,00	2,898	8,176	1,239	2,829	0,313	0,005	0,000	0,051	0,002	0,087	0,777	0,662	0,121	0,093	0,079	0,014	0,002	0,012	6,136E+05
0,70	20,00	5,00	2,999	8,192	1,237	2,861	0,338	0,005	0,000	0,052	0,002	0,078	0,687	0,576	0,107	0,084	0,071	0,012	0,002	0,011	2,978E+06
0,78	60,00	5,00	2,976	8,148	1,203	2,897	0,331	0,005	0,000	0,051	0,002	0,067	0,587	0,492	0,092	-0,067	0,057	0,010	-0,002	0,008	1,273E+07
1,39	60,00	5,00	3,067	8,363	1,220	2,968	0,337	0,006	0,000	0,052	0,002	-0,059	0,529	0,452	0,080	-0,062	0,053	0,009	0,001	0,007	5,274E+07
0,70	20,00	5,00	3,007	8,241	1,214	2,941	0,331	0,006	0,000	0,051	0,002	-0,055	0,488	0,413	0,077	-0,060	0,051	0,009	0,001	0,007	1,234E+08
0,78	60,00	5,00	2,994	8,227	1,197	2,929	0,337	0,005	0,000	0,051	0,004	0,050	0,439	0,371	0,070	-0,053	0,045	0,008	0,001	0,007	2,556E+08
0,70	20,00	5,00	2,972	8,156	1,204	2,892	0,337	0,005	0,000	0,051	0,004	0,045	0,398	0,333	0,064	-0,050	0,042	0,007	0,001	0,006	5,973E+08
0,78	60,00	5,00	2,972	8,183	1,213	2,903	0,331	0,005	0,000	0,051	0,004	0,041	0,363	0,304	0,059	-0,044	0,037	0,006	0,001	0,006	1,227E+09

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
7	1,25	20,42	4,05
	1,00	41,56	3,71
	1,60	37,46	4,33

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25		Alfa1	Alfa2
0,70	53,85	5,00	2,668	8,528	1,213	2,770	0,000	0,613	0,000	0,049	0,597	0,169	1,695	1,776	0,215	7,057	7,162	0,645	-0,004	10,039	4,438E-16
0,70	20,00	5,00	2,879	8,599	1,201	3,042	1,172	0,000	0,006	0,049	0,163	0,112	1,010	0,939	-0,154	0,639	0,595	0,070	0,002	0,131	5,971E-06
0,70	20,00	5,00	2,810	8,393	1,129	3,034	0,842	0,000	0,003	0,047	0,099	0,076	0,677	0,593	-0,113	0,330	0,308	0,041	-0,002	0,061	5,552E-02
0,70	53,85	5,00	2,792	8,338	1,142	2,977	0,722	0,000	0,004	0,048	0,079	0,062	0,535	0,461	0,093	0,195	0,182	0,025	-0,001	0,035	6,865E-01
0,70	53,85	4,01	2,736	8,203	1,102	2,867	0,827	0,000	0,001	0,048	0,105	0,055	0,474	0,409	0,081	0,208	0,195	0,025	-0,001	0,043	2,245E+00
0,70	20,00	5,00	2,809	8,181	1,044	2,944	0,937	0,006	0,001	0,048	0,112	0,055	0,474	0,403	0,083	0,225	0,209	0,026	-0,001	0,042	8,490E+00
0,70	53,85	5,00	2,864	8,381	1,117	2,996	1,075	0,006	0,001	0,049	0,144	0,050	0,428	0,363	0,076	0,220	0,205	0,024	-0,001	0,045	7,554E+00
0,70	20,00	5,00	2,882	8,347	1,096	3,017	1,162	0,006	0,001	0,049	0,154	0,046	0,393	0,330	-0,071	0,220	0,204	0,024	-0,001	-0,044	1,486E+01
1,59	60,00	5,00	2,895	8,266	1,083	3,032	0,999	0,013	0,001	0,049	0,115	0,043	0,368	0,314	-0,064	0,173	0,161	0,020	-0,001	0,031	1,792E+02
0,70	53,85	5,00	2,903	8,334	1,064	3,081	1,044	0,013	0,001	0,048	0,128	0,041	0,344	0,292	-0,062	0,165	0,153	0,019	-0,001	0,031	2,684E+02
0,70	20,00	5,00	2,884	8,272	1,066	3,032	1,361	0,016	0,000	0,048	0,192	0,038	0,323	0,271	-0,058	0,213	0,196	0,022	-0,001	0,043	5,745E+01

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
8	1,00	36,71	4,28
	1,23	27,85	4,72
	0,89	40,70	4,05

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25		Alfa1	Alfa2
2,00	60,00	3,00	0,332	0,884	0,096	0,323	0,433	0,000	0,074	0,000	0,024	-0,050	0,322	0,164	0,269	0,665	0,506	0,870	0,004	0,068	3,780E-02
0,70	53,85	5,00	2,192	5,632	0,182	2,291	0,703	0,313	0,000	0,041	0,030	0,110	1,023	0,978	0,156	0,568	0,532	0,066	-0,003	0,032	5,579E-04
0,70	20,00	5,00	2,691	7,657	0,529	2,696	0,508	0,086	0,000	0,048	0,035	0,114	1,023	0,922	0,153	0,271	0,250	0,035	0,003	0,035	8,559E+00
0,70	20,00	5,00	2,753	7,897	0,856	2,703	0,590	0,022	0,000	0,050	0,046	0,092	0,820	0,709	0,127	0,254	0,233	0,032	0,002	0,037	1,558E+02
0,78	60,00	5,00	2,801	7,899	0,951	2,650	0,514	0,027	0,002	0,051	0,030	0,081	0,711	0,614	0,109	0,157	0,143	0,020	-0,002	0,020	1,795E+04
0,70	20,00	5,00	2,898	7,854	0,990	2,789	0,419	0,026	0,002	0,050	0,013	0,075	0,656	0,557	0,104	0,108	0,095	0,015	0,002	-0,012	1,426E+06
0,78	60,00	5,00	2,885	7,854	1,032	2,784	0,412	0,016	0,000	0,050	0,013	0,066	0,576	0,487	0,092	0,089	0,078	0,012	0,002	-0,011	5,736E+06
0,70	20,00	5,00	2,868	7,664	1,058	2,758	0,385	0,008	0,000	0,050	0,007	0,059	0,511	0,425	0,083	0,073	0,063	0,010	0,001	0,009	4,881E+07
0,78	60,00	5,00	2,877	7,678	1,072	2,747	0,392	0,008	0,000	0,051	0,007	0,052	0,455	0,379	0,074	0,062	0,054	0,009	0,001	0,007	1,242E+08
1,44	60,00	5,00	2,848	7,625	1,027	2,698	0,386	0,008	0,000	0,051	0,007	0,053	0,463	0,389	0,073	0,064	0,055	0,009	0,001	0,007	4,377E+08
0,70	20,00	5,00	2,917	7,716	1,045	2,758	0,378	0,012	0,000	0,051	0,005	0,050	0,440	0,368	0,069	0,059	0,050	0,008	0,001	0,007	1,215E+09

Juego de Constantes

Juego	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2
Dos	1,000	4,000	0,600	2,000	0,200	0,000	0,500	0,030	0,010

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
1	1,67	39,34	3,96
	0,91	23,90	4,39
	1,76	52,96	3,65

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅		Alfa1	Alfa2
0,70	53,85	5,00	1,003	3,736	0,279	1,794	0,238	0,175	0,359	0,032	0,004	0,088	0,623	0,657	0,213	0,279	0,292	0,082	-0,002	0,005	3,13E+03
0,70	20,00	5,00	0,943	3,578	0,500	1,717	0,269	0,047	0,377	0,031	0,005	0,055	0,403	0,408	0,147	0,203	0,202	0,062	-0,002	0,004	2,11E+05
0,78	60,00	5,00	0,905	3,519	0,471	1,719	0,234	0,036	0,380	0,031	0,006	0,046	0,328	0,332	0,129	0,160	0,161	0,050	-0,001	0,003	2,17E+06
0,70	20,00	5,00	0,971	3,723	0,495	1,865	0,288	0,032	0,439	0,031	0,009	0,040	0,287	0,286	0,116	0,157	0,157	0,050	-0,001	0,003	1,98E+06
0,78	60,00	5,00	1,000	3,938	0,535	1,992	0,240	0,034	0,516	0,031	0,013	0,043	0,305	0,306	0,130	0,180	0,183	0,059	-0,001	-0,003	1,21E+09
0,70	20,00	5,00	0,038	0,278	0,277	0,120	0,169	0,171	-0,055	-0,001	-0,003	0,039	0,280	0,279	0,124	0,199	0,201	-0,067	-0,001	-0,003	8,31E+05
0,70	53,85	5,00	1,016	3,780	0,505	2,019	0,408	0,048	0,601	0,030	0,016	0,036	0,253	0,252	0,115	0,171	0,173	-0,058	-0,001	-0,002	3,06E+06
0,86	20,00	3,00	1,007	3,852	0,503	1,992	0,349	0,054	0,601	0,030	0,016	0,034	0,244	0,244	0,107	0,167	0,170	-0,057	0,001	0,002	8,52E+06
0,78	60,00	5,00	0,954	3,695	0,460	1,903	0,263	0,061	0,527	0,030	0,013	-0,030	0,216	0,216	0,097	0,130	0,132	0,044	0,001	0,002	1,03E+08
0,70	20,00	5,00	0,936	3,633	0,480	1,859	0,234	0,045	0,475	0,030	0,010	0,028	0,200	0,199	0,089	0,112	0,113	0,038	-0,001	0,002	7,25E+08

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
2	0,79	36,21	3,44
	1,22	34,18	4,27
	1,08	28,17	4,07

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅		Alfa1	Alfa2
0,70	53,85	5,00	0,396	1,470	0,263	0,872	0,181	0,026	0,207	0,018	0,000	0,034	0,282	0,267	0,141	0,217	0,193	0,091	-0,002	0,009	5,36E+05
0,70	20,00	5,00	0,776	3,184	0,494	1,602	0,076	0,027	0,290	0,027	0,000	0,040	0,314	0,319	0,126	0,147	0,143	0,049	-0,001	0,004	3,60E+06
0,78	60,00	5,00	0,852	3,509	0,529	1,674	0,082	0,010	0,299	0,029	0,000	0,043	0,316	0,322	0,124	0,122	0,122	0,039	0,001	0,003	2,86E+07
0,70	20,00	5,00	0,844	3,441	0,534	1,685	0,091	0,007	0,301	0,029	0,000	0,038	0,284	0,285	0,115	0,116	0,114	-0,037	-0,001	0,003	1,93E+08
0,78	60,00	5,00	0,861	3,514	0,557	1,689	0,090	0,003	0,304	0,030	0,000	0,036	0,257	0,259	0,105	0,097	0,096	-0,031	-0,001	0,003	7,74E+08
0,70	20,00	5,00	0,840	3,504	0,569	1,652	0,073	0,001	0,305	0,029	0,000	0,032	0,238	0,238	0,099	0,094	0,093	-0,031	-0,001	0,003	2,86E+09
0,78	60,00	5,00	0,836	3,519	0,569	1,651	0,054	0,001	0,311	0,029	0,000	0,029	0,212	0,212	0,090	0,080	0,080	-0,026	-0,001	0,002	9,55E+09
1,79	60,00	5,00	0,868	3,613	0,579	1,721	0,066	0,001	0,305	0,030	0,000	0,029	0,209	0,210	0,085	0,078	0,078	-0,025	-0,001	0,002	1,58E+10
0,78	60,00	5,00	0,866	3,572	0,556	1,708	0,088	0,001	0,301	0,030	0,000	0,028	0,195	0,196	0,080	0,071	0,071	-0,022	0,001	0,002	3,70E+10
0,70	20,00	5,00	0,893	3,641	0,569	1,757	0,098	0,001	0,301	0,030	0,000	0,026	0,186	0,186	0,076	0,068	0,068	-0,021	0,001	0,002	6,86E+10

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
3	0,96	59,52	3,67
	1,19	23,14	3,95
	1,90	59,17	3,45

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	0,927	3,384	0,470	1,909	0,334	0,000	0,704	0,027	0,014	0,096	0,736	0,775	0,266	0,912	0,933	0,243	0,002	-0,008	5,13E-03
0,70	20,00	5,00	1,156	4,465	0,616	2,103	0,315	0,013	0,585	0,033	0,016	0,067	0,483	0,489	0,177	0,306	0,312	0,092	-0,001	-0,004	6,99E+02
0,78	60,00	5,00	1,081	4,118	0,594	1,979	0,326	0,014	0,499	0,033	0,012	0,055	0,383	0,388	0,147	0,207	0,210	0,063	0,001	0,003	4,11E+04
0,70	20,00	5,00	1,129	4,374	0,638	2,077	0,326	0,015	0,537	0,033	0,014	0,046	0,326	0,327	0,127	0,188	0,191	0,057	-0,001	-0,003	8,61E+04
0,78	60,00	5,00	1,020	4,081	0,594	1,910	0,174	0,019	0,429	0,032	0,008	0,039	0,269	0,271	0,109	0,123	0,125	0,038	-0,001	0,002	8,37E+06
0,70	20,00	5,00	0,998	3,937	0,542	1,836	0,153	0,046	0,379	0,032	0,005	0,033	0,234	0,234	0,093	0,100	0,102	0,031	-0,001	0,002	1,15E+08
0,78	60,00	5,00	0,985	3,883	0,551	1,822	0,156	0,027	0,374	0,032	0,005	0,030	0,209	0,209	0,085	0,085	0,086	0,026	-0,001	0,002	4,73E+08
0,70	20,00	5,00	0,944	3,726	0,493	1,764	0,158	0,033	0,379	0,031	0,005	0,028	0,194	0,194	0,081	0,086	0,087	0,027	-0,001	0,002	1,40E+09
0,78	60,00	5,00	0,911	3,615	0,476	1,713	0,127	0,045	0,364	0,030	0,004	0,027	0,183	0,183	0,078	0,076	0,077	-0,024	0,001	-0,002	8,18E+09
0,70	20,00	5,00	0,871	3,464	0,378	1,658	0,114	0,077	0,353	0,030	0,004	0,024	0,169	0,168	0,073	0,074	0,075	-0,024	0,001	-0,002	2,26e+10

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
4	0,96	25,43	4,97
	1,07	40,35	4,84
	1,27	26,54	4,84

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,78	60,00	5,00	0,606	2,534	0,310	1,095	0,092	0,036	0,329	0,025	0,000	-0,041	0,297	0,302	0,123	0,166	0,164	-0,056	0,002	0,004	8,90E+05
0,70	20,00	5,00	0,647	2,649	0,293	1,184	0,108	0,044	0,323	0,026	0,000	0,035	0,259	0,255	0,108	0,144	0,141	-0,048	-0,001	0,004	2,92E+07
0,78	60,00	5,00	0,641	2,705	0,308	1,183	0,072	0,000	0,321	0,026	0,000	0,032	0,231	0,227	0,100	0,112	0,111	-0,038	-0,001	0,003	4,71E+08
0,70	20,00	5,00	0,731	3,184	0,355	1,375	0,051	0,000	0,317	0,028	0,000	-0,033	0,239	0,234	0,100	0,108	0,107	-0,036	0,001	0,003	7,20E+08
0,70	53,85	5,00	0,729	3,226	0,355	1,298	0,000	0,000	0,329	0,029	0,000	-0,040	0,279	0,275	0,117	0,115	0,116	-0,039	-0,001	0,003	4,66E+09
0,70	20,00	5,00	0,734	3,212	0,374	1,312	0,000	0,000	0,330	0,029	0,000	-0,035	0,251	0,245	0,106	0,107	0,107	-0,036	-0,001	0,003	1,37E+10
1,99	60,00	5,00	0,750	3,270	0,379	1,360	0,000	0,000	0,342	0,029	0,001	-0,033	0,240	0,235	0,099	0,106	0,106	-0,035	-0,001	0,003	2,39E+10
0,78	60,00	5,00	0,776	3,307	0,428	1,388	0,049	0,000	0,345	0,029	0,001	0,034	0,239	0,236	0,099	0,102	0,103	-0,033	-0,001	0,003	3,58E+10
0,78	60,00	5,00	0,777	3,278	0,403	1,394	0,063	0,013	0,363	0,029	0,002	0,032	0,220	0,218	0,094	0,095	0,096	-0,031	0,001	0,002	6,12E+10
0,70	20,00	5,00	0,816	3,438	0,468	1,484	0,072	0,008	0,406	0,029	0,004	0,033	0,228	0,226	0,100	0,107	0,108	0,036	0,001	0,002	3,10E+10

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
5	1,72	51,15	3,03
	0,93	24,36	3,04
	0,94	34,90	3,88

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	0,777	2,024	0,231	1,267	0,837	0,180	0,358	0,026	0,000	0,064	0,482	0,512	0,153	0,462	0,435	0,109	-0,002	0,005	1,78E+00
0,70	20,00	5,00	0,815	3,246	0,310	1,566	0,244	0,151	0,561	0,028	0,014	0,051	0,378	0,391	0,147	0,300	0,308	0,105	-0,001	-0,005	1,23E+02
0,70	20,00	5,00	0,991	3,841	0,644	1,821	0,230	0,000	0,422	0,031	0,006	0,043	0,316	0,320	0,117	0,161	0,161	0,050	-0,001	0,003	6,76E+04
0,78	60,00	5,00	0,885	3,360	0,544	1,636	0,210	0,039	0,325	0,029	0,001	0,037	0,258	0,262	0,101	0,103	0,103	-0,032	-0,001	0,002	2,43E+07
0,70	20,00	5,00	0,786	2,949	0,492	1,493	0,219	0,035	0,326	0,027	0,001	0,032	0,232	0,230	0,097	0,107	0,105	-0,036	0,001	0,003	4,04E+08
0,78	60,00	5,00	0,785	3,012	0,522	1,488	0,184	0,000	0,333	0,027	0,001	0,030	0,206	0,205	0,090	0,085	0,084	-0,028	-0,001	0,002	6,04E+09
0,70	20,00	5,00	0,853	3,245	0,577	1,622	0,220	0,000	0,373	0,028	0,003	0,030	0,212	0,210	0,092	0,099	0,097	0,033	-0,001	-0,002	1,13E+09
0,78	60,00	5,00	0,869	3,320	0,589	1,635	0,215	0,000	0,383	0,029	0,004	0,028	0,194	0,193	0,085	0,086	0,086	0,028	-0,001	-0,002	2,48E+09
0,78	60,00	5,00	0,889	3,425	0,601	1,668	0,202	0,000	0,403	0,029	0,004	0,028	0,189	-0,189	0,084	0,083	0,083	0,027	-0,001	-0,002	3,38E+09
0,70	20,00	5,00	0,903	3,500	0,614	1,729	0,213	0,000	0,434	0,029	0,006	0,027	0,187	-0,186	0,085	0,089	0,089	0,030	0,001	0,002	3,50E+09
0,70	20,00	5,00	0,954	3,729	0,651	1,832	0,245	0,000	0,509	0,029	0,009	-0,027	0,184	0,182	0,085	0,099	0,099	0,034	-0,001	0,002	1,03E+09

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
6	1,91	51,46	4,33
	0,79	29,50	3,63
	1,36	27,91	3,52

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,78	60,00	5,00	0,607	1,874	0,198	1,096	0,414	0,137	0,337	0,023	0,000	-0,063	0,492	0,520	0,172	0,523	0,489	0,142	0,002	0,007	1,49E+01
0,70	20,00	5,00	0,640	2,261	0,245	1,204	0,237	0,125	0,418	0,024	0,004	0,034	0,265	0,258	0,104	0,247	0,221	0,078	-0,001	0,004	2,85E+03
0,70	20,00	5,00	0,839	3,123	0,407	1,597	0,272	0,106	0,542	0,027	0,008	0,041	0,296	0,300	0,125	0,210	0,212	0,072	-0,001	0,003	1,34E+05
0,70	53,85	5,00	0,907	3,376	0,487	1,743	0,340	0,073	0,654	0,027	0,012	0,036	0,244	0,247	0,111	0,170	0,173	-0,062	0,001	0,002	1,16E+05
0,70	20,00	5,00	0,829	3,151	0,369	1,536	0,219	0,080	0,472	0,028	0,007	0,036	0,253	0,252	0,111	0,146	0,147	0,051	-0,001	0,003	2,93E+07
0,78	60,00	5,00	0,830	3,147	0,347	1,523	0,241	0,094	0,470	0,028	0,007	0,033	0,223	0,224	0,099	0,126	0,128	0,043	-0,001	0,002	9,10E+07
0,70	20,00	5,00	0,737	2,736	0,300	1,342	0,210	0,080	0,387	0,027	0,004	-0,027	0,186	0,183	0,083	0,101	0,100	0,035	-0,001	-0,002	4,47E+09
0,78	60,00	5,00	0,745	2,778	0,288	1,352	0,215	0,105	0,391	0,027	0,005	-0,026	0,177	0,176	0,080	0,096	0,097	0,033	-0,001	0,002	6,25E+09
0,70	20,00	5,00	0,820	3,125	0,290	1,495	0,211	0,128	0,433	0,028	0,007	0,028	0,194	0,192	0,087	0,108	0,109	0,037	-0,001	0,002	2,91E+09
0,78	60,00	5,00	0,828	3,165	0,320	1,533	0,222	0,099	0,468	0,028	0,008	0,028	0,188	0,186	-0,088	0,107	0,108	0,037	0,001	0,002	3,63E+09
0,70	20,00	5,00	0,852	3,224	0,346	1,568	0,229	0,089	0,459	0,028	0,008	0,026	0,181	0,178	-0,083	0,100	0,101	0,034	-0,001	0,002	7,40E+09

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
7	1,25	20,42	4,05
	1,00	41,56	3,71
	1,60	37,46	4,33

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25		Alfa1	Alfa2
0,70	53,85	5,00	1,062	4,151	0,788	2,068	0,075	0,000	0,354	0,031	0,000	0,127	1,016	1,085	0,308	0,647	0,640	0,155	-0,003	0,010	8,84E-03
0,70	20,00	5,00	1,100	4,407	0,514	2,080	0,121	0,000	0,376	0,031	0,000	0,105	0,713	0,730	0,253	0,233	0,242	0,073	-0,002	0,004	2,13E+03
0,70	20,00	5,00	0,901	3,750	0,416	1,774	0,150	0,000	0,470	0,028	0,005	0,064	0,457	0,459	0,184	0,238	0,241	0,081	-0,002	0,004	3,23E+05
0,78	60,00	5,00	0,926	3,689	0,420	1,838	0,273	0,000	0,513	0,028	0,008	0,054	0,373	0,375	0,160	0,201	0,204	0,069	0,001	0,003	9,36E+05
0,70	20,00	5,00	1,049	4,041	0,489	2,064	0,394	0,000	0,623	0,029	0,012	0,050	0,350	0,350	0,153	0,217	0,219	-0,074	-0,001	0,003	3,53E+05
0,78	60,00	5,00	1,204	4,552	0,629	2,344	0,582	0,000	0,804	0,031	0,018	0,053	0,363	0,366	0,159	0,252	0,258	0,087	-0,001	-0,003	3,47E+04
0,70	20,00	5,00	1,182	4,328	0,620	2,272	0,583	0,000	0,736	0,031	0,017	0,048	0,327	0,327	0,144	0,221	0,223	0,074	-0,001	-0,003	2,76E+05
0,70	53,85	5,00	1,186	4,456	0,615	2,287	0,496	0,000	0,766	0,031	0,017	0,045	0,302	0,302	0,137	0,195	0,199	0,068	0,001	-0,002	6,42E+05
0,70	20,00	5,00	1,143	4,360	0,597	2,194	0,439	0,000	0,713	0,031	0,016	0,039	0,267	0,266	0,121	0,170	0,173	-0,059	0,001	-0,002	3,51E+06
0,78	60,00	5,00	1,136	4,399	0,576	2,192	0,388	0,000	0,721	0,031	0,016	0,037	0,248	0,247	0,114	0,155	0,158	-0,054	-0,001	-0,002	7,54E+06
1,60	20,00	5,00	1,103	4,347	0,559	2,183	0,324	0,000	0,629	0,031	0,014	0,033	0,232	0,232	0,103	0,136	0,139	-0,046	-0,001	-0,002	4,37E+07

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
8	1,00	36,71	4,28
	1,23	27,85	4,72
	0,89	40,70	4,05

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25		Alfa1	Alfa2
0,95	60,00	5,00	0,287	0,869	0,103	0,305	0,433	0,000	0,532	0,014	0,002	0,051	0,348	0,295	0,192	0,556	0,476	0,235	-0,003	0,009	7,40E-01
2,00	60,00	3,00	0,227	0,894	0,091	0,235	0,000	0,000	0,665	0,011	0,003	0,031	0,200	0,172	0,117	0,265	0,233	-0,120	0,002	0,004	1,84E+07
0,70	20,00	5,00	0,621	2,591	0,206	1,189	0,011	0,049	0,301	0,026	0,000	-0,054	0,405	0,425	0,151	0,243	0,242	-0,074	-0,002	0,006	3,50E+05
0,70	20,00	5,00	0,739	3,111	0,281	1,412	0,011	0,023	0,305	0,028	0,000	-0,049	0,370	0,374	0,137	0,197	0,194	-0,059	-0,002	0,005	4,65E+06
0,70	53,85	5,00	0,734	3,062	0,194	1,410	0,036	0,080	0,301	0,027	0,000	-0,042	0,306	0,313	0,121	0,140	0,142	-0,045	0,001	0,003	1,93E+08
0,78	60,00	5,00	0,723	2,909	0,110	1,386	0,069	0,137	0,288	0,027	0,000	-0,035	0,248	0,258	0,102	0,110	0,113	0,035	-0,001	0,003	1,19E+09
0,70	20,00	5,00	0,769	3,071	0,114	1,521	0,071	0,146	0,293	0,027	0,000	0,036	0,256	0,263	0,107	0,111	0,114	0,036	-0,001	0,003	3,55E+09
0,78	60,00	5,00	0,807	3,208	0,122	1,589	0,079	0,164	0,324	0,027	0,002	0,034	0,235	0,243	0,101	0,102	0,106	-0,033	-0,001	0,002	3,91E+09
0,70	20,00	5,00	0,883	3,406	0,290	1,745	0,139	0,122	0,357	0,028	0,003	0,035	0,243	0,247	0,105	0,109	0,111	-0,035	-0,001	0,002	2,69E+09
0,70	53,85	5,00	0,910	3,513	0,312	1,792	0,152	0,120	0,370	0,029	0,004	0,032	0,225	0,229	0,098	0,099	0,102	0,032	0,001	-0,002	3,3E+09
0,70	20,00	5,00	0,931	3,627	0,278	1,886	0,156	0,147	0,406	0,029	0,006	0,035	0,245	0,248	0,110	0,119	0,122	0,039	-0,001	0,002	2,40E+09

Juego de Constantes

Juego	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2
Tres	3,000	6,000	0,400	2,000	0,200	0,200	0,000	0,030	0,010

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
1	1,67	39,34	3,96
	0,91	23,90	4,39
	1,76	52,96	3,65

Datos Generados.

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	
0,78	60,00	5,00	3,113	4,132	0,850	1,984	0,684	0,000	0,000	0,030	0,000	-0,149	1,194	0,911	0,153	0,266	0,211	0,033	-0,002	0,011	3,34E-01
0,78	60,00	3,33	2,976	6,428	0,590	1,817	0,476	0,751	0,000	0,034	0,234	0,114	0,771	0,603	0,117	0,439	0,433	0,043	-0,002	0,131	2,36E-02
0,70	54,00	5,00	2,986	6,508	0,654	1,830	0,482	0,757	0,000	0,034	0,239	0,084	0,568	0,441	0,091	0,346	0,341	0,034	-0,002	0,104	5,87E-01
0,70	29,79	5,00	2,982	6,443	0,662	1,812	0,536	0,708	0,007	0,034	0,220	0,071	0,436	0,340	0,079	0,218	0,213	0,025	-0,001	0,059	1,04E+01
0,70	20,00	3,30	2,909	6,298	0,542	1,762	0,527	0,690	0,005	0,034	0,221	0,070	0,411	0,312	0,080	0,210	0,204	0,025	-0,001	0,058	8,29E+01
0,78	60,00	5,00	3,177	6,396	0,533	1,880	0,226	0,226	0,006	0,035	0,021	-0,071	0,430	0,325	0,080	0,064	0,059	0,014	-0,001	0,011	6,10E+07
0,70	20,00	5,00	3,122	6,227	0,428	1,916	0,201	0,201	0,001	0,033	0,011	-0,064	0,378	0,286	0,076	0,046	0,042	0,010	-0,001	0,007	1,04E+09
0,70	20,00	5,00	3,073	6,106	0,518	1,893	0,214	0,196	0,001	0,033	0,014	-0,058	0,342	0,254	0,073	0,046	0,042	0,011	-0,001	-0,008	2,14E+09
1,53	60,00	5,00	3,017	6,026	0,465	1,898	0,235	0,226	0,001	0,032	0,024	-0,055	0,325	0,240	0,068	0,052	0,048	0,012	-0,001	0,009	1,95E+09
0,78	60,00	5,00	3,024	6,144	0,467	1,906	0,245	0,278	0,000	0,032	0,038	-0,053	0,306	0,228	0,068	0,055	0,051	0,013	-0,001	-0,011	7,67E+08
0,70	20,00	5,00	2,979	6,155	0,484	1,913	0,256	0,302	0,000	0,032	0,049	0,051	0,290	0,213	0,068	0,060	-0,056	0,014	-0,001	0,013	4,95E+08

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
2	0,79	36,21	3,44
	1,22	34,18	4,27
	1,08	28,17	4,07

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	3,093	6,819	1,197	2,148	0,122	0,000	0,442	0,027	0,200	-0,178	1,266	0,903	0,277	3,087	2,973	0,607	0,003	0,195	3,88E-14
0,70	20,00	5,00	3,108	6,043	0,885	2,025	0,231	0,105	0,022	0,030	0,009	-0,120	0,761	0,566	0,167	0,102	0,091	0,024	-0,002	0,014	1,38E+03
0,78	60,00	5,00	3,128	6,193	0,933	2,055	0,308	0,135	0,031	0,030	0,028	-0,095	0,573	0,414	0,143	0,113	0,103	0,028	0,002	-0,017	2,75E+04
0,70	20,00	5,00	3,122	6,195	0,902	2,016	0,332	0,169	0,025	0,031	0,034	-0,081	0,463	0,339	0,122	0,086	0,079	-0,022	0,002	-0,014	1,90E+05
0,78	60,00	5,00	3,239	6,410	0,994	2,049	0,371	0,176	0,032	0,032	0,042	-0,074	0,448	0,338	0,094	0,093	0,086	0,022	-0,001	0,014	4,68E+05
0,70	20,00	5,00	3,227	6,357	0,932	2,046	0,348	0,196	0,027	0,032	0,036	-0,068	0,393	0,299	0,088	0,071	0,066	-0,018	-0,001	-0,011	4,14E+06
0,78	60,00	5,00	3,119	6,020	0,824	1,995	0,282	0,164	0,016	0,031	0,019	-0,058	0,336	0,249	0,079	0,050	0,045	0,012	-0,001	0,007	2,54E+08
1,72	60,00	5,00	3,065	5,963	0,765	1,970	0,311	0,192	0,014	0,031	0,028	-0,052	0,305	0,226	0,070	-0,054	0,049	0,013	0,001	-0,008	2,65E+08
1,79	60,00	5,00	3,065	6,043	0,773	2,009	0,309	0,206	0,015	0,031	0,034	-0,051	0,290	0,216	0,071	-0,052	0,048	0,013	0,001	-0,009	2,95E+08
0,70	53,85	5,00	3,072	6,087	0,680	2,032	0,294	0,212	0,015	0,030	0,031	-0,050	0,282	0,207	0,071	0,050	0,046	0,012	-0,001	-0,008	9,82E+08
0,70	20,00	5,00	3,066	6,091	0,661	2,025	0,288	0,214	0,015	0,030	0,030	-0,048	0,279	0,207	0,063	0,050	0,046	0,012	-0,001	-0,008	2,38E+09

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
3	0,96	59,52	3,67
	1,19	23,14	3,95
	1,90	59,17	3,45

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
			3,072	5,928	0,506	1,963	0,308	0,138	0,000	0,031	0,005	-0,103	0,824	0,653	0,107	0,157	0,134	0,020	-0,002	0,012	1,14E+03
0,70	53,85	5,00	3,068	6,554	0,303	2,020	0,146	0,209	0,000	0,031	0,006	-0,087	0,598	0,476	0,098	0,071	0,065	0,015	-0,001	0,010	1,16E+06
0,70	20,00	5,00	2,931	6,295	0,369	1,990	0,144	0,205	0,000	0,029	0,008	0,075	0,486	0,365	0,094	0,067	0,061	0,015	-0,001	0,010	1,55E+07
0,78	60,00	5,00	2,897	6,302	0,463	1,991	0,138	0,179	0,000	0,029	0,010	0,068	0,422	0,315	0,091	0,054	0,049	0,014	-0,001	0,010	6,86E+07
0,70	20,00	5,00	2,824	6,193	0,362	1,987	0,132	0,186	0,000	0,028	0,011	0,062	0,376	0,273	0,089	0,052	0,047	0,014	-0,001	0,010	3,11E+08
0,78	60,00	5,00	2,852	6,193	0,373	1,996	0,152	0,191	0,000	0,028	0,012	0,059	0,344	0,252	0,086	-0,045	0,041	0,012	-0,001	0,008	9,87E+08
1,75	60,00	5,00	2,870	6,188	0,370	1,989	0,160	0,197	0,000	0,029	0,013	0,053	0,319	0,236	0,072	0,044	0,040	0,011	0,001	-0,008	2,35E+09
0,78	60,00	5,00	2,891	6,296	0,374	1,989	0,151	0,211	0,000	0,029	0,016	0,051	0,303	0,225	0,071	-0,041	0,038	0,010	0,001	-0,008	3,70E+09
0,70	20,00	5,00	2,883	6,199	0,410	1,981	0,160	0,205	0,000	0,029	0,016	0,048	0,278	0,204	0,068	-0,039	0,036	0,010	0,001	-0,007	9,55E+09
2,00	60,00	5,00	2,865	6,162	0,347	1,979	0,169	0,229	0,000	0,029	0,021	0,045	0,269	0,199	0,060	0,042	0,039	0,010	-0,001	0,008	1,00E+10
0,78	60,00	5,00	2,865	6,127	0,350	1,999	0,185	0,233	0,000	0,029	0,023	0,043	0,253	0,188	0,060	0,039	0,036	0,010	-0,001	0,007	1,66E+10

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
4	0,96	25,43	4,97
	1,07	40,35	4,84
	1,27	26,54	4,84

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
			2,573	3,604	0,821	1,687	0,642	0,039	0,000	0,023	0,011	0,218	1,265	0,831	0,381	0,333	0,271	0,073	-0,005	0,024	1,27E+01
0,70	53,85	5,00	2,972	5,614	0,524	1,888	0,233	0,161	0,000	0,029	0,004	0,120	0,697	0,497	0,180	0,088	0,077	0,022	-0,003	0,012	7,80E+04
2,00	60,00	5,00	3,135	5,847	0,489	2,009	0,235	0,169	0,000	0,031	0,002	-0,088	0,561	0,416	0,109	0,069	0,061	0,014	-0,002	0,008	9,30E+06
0,78	60,00	5,00	3,039	5,855	0,411	1,974	0,190	0,173	0,000	0,030	0,002	-0,079	0,475	0,355	0,103	0,052	0,046	0,012	-0,001	0,007	1,06E+08
0,70	20,00	5,00	3,038	5,886	0,495	1,987	0,189	0,167	0,000	0,030	0,002	-0,068	0,404	0,296	0,094	0,047	0,041	0,011	-0,001	0,006	5,04E+08
2,00	60,00	4,29	3,106	5,996	0,538	2,039	0,195	0,167	0,000	0,030	0,003	-0,059	0,374	0,279	0,074	0,044	0,039	0,010	-0,001	0,006	1,53E+09
0,78	60,00	5,00	3,083	5,897	0,455	2,028	0,197	0,178	0,000	0,030	0,002	-0,055	0,331	0,250	0,070	0,036	0,032	0,008	0,001	0,005	7,86E+09
0,70	20,00	5,00	3,014	5,933	0,342	2,043	0,180	0,185	0,000	0,029	0,002	-0,057	0,342	0,252	0,077	0,039	0,035	0,010	0,001	0,005	2,53E+10
0,78	60,00	5,00	3,030	6,021	0,389	2,062	0,182	0,185	0,000	0,029	0,004	-0,014	0,083	0,061	0,020	0,009	-0,008	0,002	0,000	-0,001	3,94E+10
2,00	60,00	5,00	3,054	6,041	0,425	2,071	0,196	0,191	0,000	0,030	0,007	-0,050	0,298	0,223	0,065	0,036	0,033	0,009	-0,001	0,005	5,25E+10
0,78	60,00	5,00	3,030	6,024	0,360	2,061	0,180	0,198	0,000	0,030	0,006	-0,048	0,283	0,213	0,064	0,032	0,029	0,008	-0,001	0,004	1,51E+11

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
5	1,72	51,15	3,03
	0,93	24,36	3,04
	0,94	34,90	3,88

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	2,747	5,129	0,000	2,061	0,138	0,395	0,000	0,025	0,007	0,122	0,939	0,727	0,155	0,278	0,237	0,043	-0,002	0,014	1,40E+01
0,70	20,00	5,00	3,046	5,470	0,889	2,218	0,296	0,095	0,000	0,028	0,008	-0,134	0,911	0,694	0,173	0,121	0,107	0,032	-0,002	0,018	1,23E+05
0,70	20,00	5,00	2,991	5,745	0,773	2,140	0,315	0,121	0,000	0,028	0,020	0,108	0,697	0,507	0,147	0,120	0,108	0,032	-0,002	0,021	4,62E+05
1,11	60,00	5,00	3,063	5,804	0,824	2,131	0,280	0,125	0,000	0,029	0,011	-0,096	0,611	0,450	0,128	0,088	0,078	0,020	-0,002	0,013	2,62E+07
0,78	60,00	5,00	3,118	6,108	0,891	2,117	0,249	0,133	0,000	0,030	0,014	-0,090	0,551	0,410	0,122	0,073	0,066	0,017	-0,002	0,013	6,43E+07
0,70	20,00	5,00	3,135	6,044	0,864	2,157	0,244	0,129	0,000	0,030	0,010	-0,079	0,473	0,346	0,111	0,062	0,055	0,015	-0,001	0,010	4,26E+08
1,72	60,00	5,00	3,101	6,049	0,777	2,132	0,237	0,138	0,000	0,030	0,011	-0,068	0,422	0,311	0,091	0,058	0,051	0,013	0,001	0,009	1,44E+09
0,78	60,00	5,00	3,092	6,115	0,729	2,149	0,215	0,152	0,000	0,029	0,011	-0,063	0,381	0,283	0,087	0,049	-0,044	0,012	0,001	0,008	4,13E+09
0,70	20,00	5,00	3,091	6,140	0,718	2,132	0,213	0,155	0,000	0,030	0,011	-0,058	0,346	0,254	0,082	0,046	-0,041	0,011	0,001	0,008	9,06E+09
0,78	60,00	5,00	3,087	6,102	0,712	2,106	0,220	0,155	0,000	0,030	0,011	-0,054	0,316	0,233	0,077	0,040	-0,036	0,010	-0,001	0,007	2,26E+10
2,00	60,00	5,00	3,072	6,078	0,671	2,100	0,224	0,163	0,000	0,030	0,013	-0,050	0,301	0,223	0,068	0,040	-0,036	0,009	-0,001	-0,007	4,18E+10

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
6	1,91	51,46	4,33
	0,79	29,50	3,63
	1,36	27,91	3,52

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,78	60,00	5,00	3,181	6,169	0,860	2,065	0,231	0,001	0,027	0,032	0,003	-0,155	1,251	0,991	0,165	0,274	0,227	0,035	-0,002	0,025	4,12E-10
0,78	60,00	5,00	3,609	6,884	1,595	2,150	0,268	0,001	0,024	0,037	0,004	0,180	1,282	1,019	0,184	0,137	0,120	0,025	-0,003	0,020	7,76E-06
0,70	20,00	5,00	3,339	6,072	1,449	2,118	0,265	0,001	0,016	0,034	0,000	-0,128	0,871	0,649	0,151	0,098	0,083	0,020	-0,002	0,014	9,10E-04
0,78	60,00	5,00	3,467	6,364	1,723	2,218	0,246	0,004	0,021	0,033	0,000	0,127	0,816	0,619	0,156	0,077	0,066	0,017	-0,002	0,012	5,48E-03
1,77	60,00	5,00	3,173	5,701	1,520	2,004	0,260	0,007	0,009	0,032	0,000	-0,119	0,792	0,593	0,141	0,084	0,071	0,018	-0,002	0,013	6,33E-02
0,78	60,00	5,00	3,154	5,641	1,302	2,130	0,259	0,045	0,000	0,031	0,000	-0,098	0,630	0,472	0,125	0,063	0,054	0,014	0,002	0,009	2,83E-01
0,70	20,00	5,00	3,149	5,989	0,681	1,981	0,207	0,128	0,000	0,033	0,000	-0,078	0,485	0,364	0,093	0,050	0,044	0,011	0,002	0,007	9,22E-01
1,91	60,00	5,00	3,085	5,897	0,609	2,018	0,199	0,139	0,000	0,031	0,000	-0,070	0,449	0,340	0,084	0,049	0,043	0,011	-0,001	0,006	3,12E+00
0,78	60,00	5,00	3,113	5,918	0,609	2,024	0,205	0,144	0,000	0,032	0,001	-0,065	0,405	0,308	0,079	0,042	0,037	0,009	-0,001	0,006	7,65E+00
0,70	20,00	5,00	3,063	5,987	0,486	2,030	0,188	0,153	0,000	0,031	0,001	-0,063	0,387	0,290	0,080	0,041	-0,037	0,009	-0,001	0,006	1,95E+01
0,78	60,00	5,00	3,060	5,997	0,466	2,018	0,188	0,160	0,000	0,031	0,001	-0,058	0,349	0,263	0,074	0,037	-0,032	0,008	-0,001	0,005	3,62E+01

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
7	1,25	20,42	4,05
	1,00	41,56	3,71
	1,60	37,46	4,33

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	3,444	6,319	0,966	1,993	0,421	0,000	0,032	0,035	0,020	0,132	1,037	0,810	0,134	0,325	0,285	0,034	0,002	0,027	2,87E-02
0,70	20,00	5,00	3,791	7,720	0,553	2,207	0,190	0,306	0,041	0,038	0,034	0,098	0,657	0,533	0,100	0,110	0,106	0,023	-0,001	-0,015	1,45E+02
0,70	20,00	5,00	3,342	6,970	0,472	2,099	0,236	0,405	0,045	0,033	0,062	-0,087	0,542	0,407	0,105	0,148	0,142	0,036	-0,001	0,022	1,10E+03
0,78	60,00	5,00	3,298	6,808	0,543	2,024	0,371	0,438	0,033	0,034	0,089	-0,107	0,628	0,474	0,130	0,181	0,175	0,043	-0,002	0,031	2,46E+03
0,70	20,00	5,00	3,376	6,835	0,531	2,054	0,319	0,362	0,029	0,035	0,065	-0,096	0,549	0,408	0,119	0,132	0,126	0,032	-0,002	0,022	6,89E+04
0,78	60,00	5,00	3,307	6,502	0,495	2,047	0,240	0,219	0,014	0,034	0,021	-0,087	0,487	0,365	0,112	0,067	0,062	0,016	-0,002	0,010	5,35E+07
1,62	60,00	5,00	3,246	6,394	0,416	2,056	0,228	0,219	0,011	0,033	0,018	-0,077	0,449	0,338	0,097	0,062	0,057	0,014	0,001	0,009	4,37E+08
2,00	60,00	5,00	3,178	6,227	0,397	2,049	0,230	0,218	0,009	0,032	0,018	-0,067	0,406	0,307	0,081	0,059	0,054	0,013	-0,001	0,009	1,51E+09
0,78	60,00	5,00	3,168	6,154	0,402	1,996	0,235	0,207	0,009	0,032	0,016	-0,063	0,373	0,283	0,077	0,049	0,045	0,011	-0,001	-0,007	5,99E+09
0,70	20,00	5,00	3,064	5,996	0,414	2,001	0,241	0,211	0,006	0,031	0,019	-0,062	0,363	0,269	0,081	0,053	0,049	0,013	-0,001	0,008	1,06E+10
0,78	60,00	5,00	3,067	5,978	0,373	2,020	0,243	0,224	0,004	0,031	0,018	-0,060	0,340	0,254	0,079	0,047	0,044	0,012	-0,001	0,007	2,68E+10

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
8	1,00	36,71	4,28
	1,23	27,85	4,72
	0,89	40,70	4,05

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
2,00	60,00	3,00	1,068	2,046	0,380	0,445	1,224	0,011	0,444	0,000	0,079	0,107	0,488	0,282	0,493	1,112	0,895	0,927	0,004	0,073	7,72E-09
0,70	53,85	5,00	2,778	5,635	0,941	1,624	0,906	0,012	0,000	0,033	0,134	0,082	0,586	0,420	0,088	0,477	0,434	0,052	0,002	0,098	3,53E-04
0,70	20,00	5,00	3,148	6,651	1,443	1,808	0,605	0,018	0,044	0,035	0,110	-0,126	0,815	0,609	0,141	0,316	0,293	0,061	-0,002	0,070	3,80E-01
0,70	20,00	5,00	3,113	6,178	1,142	1,810	0,217	0,036	0,019	0,033	0,001	-0,093	0,596	0,433	0,110	0,073	0,062	0,016	-0,002	0,012	1,51E+07
0,78	60,00	5,00	2,912	6,106	0,364	1,828	0,131	0,171	0,006	0,031	0,001	0,065	0,394	0,291	0,084	0,045	0,040	0,011	-0,001	0,007	2,74E+08
1,63	60,00	5,00	2,854	5,990	0,189	1,864	0,124	0,204	0,001	0,030	0,002	0,058	0,360	0,269	0,073	0,044	0,039	0,010	-0,001	0,006	1,84E+09
0,78	60,00	5,00	2,896	6,024	0,256	1,926	0,139	0,197	0,001	0,029	0,002	0,057	0,344	0,259	0,075	0,039	0,035	0,009	-0,001	0,005	5,57E+09
0,70	20,00	5,00	2,889	5,820	0,216	1,925	0,149	0,191	0,000	0,029	0,000	0,056	0,330	0,244	0,075	0,037	0,033	0,009	0,001	0,005	3,05E+10
2,00	60,00	5,00	2,899	5,810	0,248	1,927	0,153	0,188	0,000	0,029	0,000	0,050	0,307	0,230	0,064	-0,035	0,031	0,008	-0,001	0,004	7,54E+10
0,78	60,00	5,00	2,919	5,872	0,315	1,959	0,152	0,175	0,000	0,029	0,000	0,049	0,293	0,220	0,064	-0,032	0,028	0,008	-0,001	0,004	1,71E+11
0,70	20,00	3,52	2,911	5,931	0,290	1,961	0,146	0,180	0,000	0,029	0,001	0,045	0,273	0,202	0,060	0,031	0,027	0,007	-0,001	0,004	3,52E+11

Juego de Constantes

Juego	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2
Cuatro	3,500	12,000	1,500	3,000	0,000	0,000	0,000	0,030	0,000

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
1	1,67	39,34	3,96
	0,91	23,90	4,39
	1,76	52,96	3,65

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
			k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅		Alfa1	Alfa2
Carga	Tiempo	Catalizador	4,337	2,801	0,160	2,582	2,064	0,298	0,094	0,028	0,000	0,306	2,173	1,887	0,285	0,452	0,373	0,049	0,003	0,004	3,4E-01
0,70	53,85	5,00	3,521	12,360	1,659	3,042	0,000	0,000	0,000	0,030	3,159	0,152	1,246	0,948	0,215	3,518	3,397	0,617	-0,002	3,159	1,4E+02
0,70	20,00	5,00	3,458	11,766	0,890	2,981	0,016	0,218	0,000	0,030	0,215	0,089	0,780	0,662	0,115	0,250	0,228	0,030	0,002	0,036	5,3E+02
0,78	60,00	5,00	3,451	11,737	0,944	2,841	0,008	0,191	0,000	0,031	0,250	0,077	0,654	0,557	0,102	0,199	0,183	0,023	0,002	0,028	6,7E+03
0,70	20,00	5,00	3,431	11,701	1,059	2,774	0,004	0,097	0,000	0,031	0,128	0,066	0,569	0,493	0,087	0,169	0,156	0,019	-0,002	0,023	7,3E+02
0,78	60,00	5,00	3,480	11,609	1,477	2,786	0,007	0,000	0,000	0,000	0,000	0,061	0,528	0,451	0,084	0,152	0,140	0,018	0,001	0,020	1,4E+03
0,70	20,00	5,00	3,462	11,790	1,197	2,866	0,001	0,068	0,000	0,000	0,146	-0,062	0,445	0,313	0,099	0,133	0,127	0,018	0,001	0,430	0,0E+00

Punto de partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
2	0,79	36,21	3,44
	1,22	34,18	4,27
	1,08	28,17	4,07

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
			k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅	Alfa1	Alfa2	k ₁₂	k ₁₃	k ₁₄	k ₁₅	k ₂₃	k ₂₄	k ₂₅		Alfa1	Alfa2
Carga	Tiempo	Catalizador	1,076	1,371	0,287	0,450	1,157	0,064	0,166	0,000	0,003	0,323	1,453	0,784	1,208	0,783	0,591	0,908	0,008	0,019	1,2E-02
0,70	53,85	5,00	4,545	15,304	2,044	3,449	0,000	0,012	0,019	0,038	0,004	0,193	1,534	1,205	0,256	0,125	0,112	0,024	-0,003	0,070	1,2E+00
0,70	20,00	5,00	3,749	12,660	1,507	2,884	0,000	0,025	0,003	0,035	0,000	0,125	0,960	0,695	0,189	0,089	0,077	0,020	-0,002	0,093	2,3E+03
0,78	60,00	5,00	3,581	12,092	1,370	2,807	0,000	0,028	0,003	0,033	0,021	0,102	0,802	0,586	0,147	0,119	0,108	0,022	-0,002	0,180	7,2E+02
0,70	20,00	5,00	3,542	11,979	1,308	2,782	0,002	0,031	0,002	0,033	0,028	-0,085	0,638	0,461	0,127	0,087	0,079	0,018	-0,001	0,167	5,5E+03
0,78	60,00	5,00	3,538	11,942	1,349	2,822	0,002	0,018	0,002	0,033	0,036	-0,074	0,546	0,393	0,117	0,075	0,069	0,016	-0,001	0,267	1,6E+03
0,70	20,00	5,00	3,480	11,609	1,477	2,786	0,007	0,000	0,000	0,032	0,000	-0,074	0,540	0,383	0,121	0,077	0,071	0,017	-0,001	0,273	0,0E+00

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
3	0,96	59,52	3,67
	1,19	23,14	3,95
	1,90	59,17	3,45

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
			k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25		Alfa1	Alfa2
Carga	Tiempo	Catalizador	3,329	9,438	0,876	2,740	0,304	0,000	0,000	0,029	0,000	0,3186	2,8063	2,2166	0,3997	0,4126	0,3406	0,0598	-0,0040	0,0345	1,2E-09
0,70	53,85	5,00	3,746	12,647	1,282	3,395	0,000	0,102	0,039	0,029	0,233	0,1579	1,2505	0,9679	0,2311	0,6284	0,6098	0,1568	-0,0018	0,7708	1,6E-06
0,70	20,00	5,00	3,595	12,082	1,320	3,224	0,000	0,169	0,042	0,029	0,490	0,1145	0,8680	0,6404	0,1796	0,8492	0,8250	0,2192	-0,0015	1,5690	6,4E-06
0,78	60,00	5,00	3,581	12,197	1,290	3,313	0,000	0,000	0,059	0,028	0,586	0,1079	0,7826	0,5669	0,1842	0,8332	0,8041	0,2361	-0,0015	2,2092	6,7E-06
0,70	20,00	5,00	3,613	12,375	1,358	3,373	0,000	0,000	0,042	0,028	0,430	0,1059	0,7935	0,5808	0,1791	0,6286	0,6061	0,1684	0,0014	1,8295	2,6E-04
0,78	60,00	5,00	3,613	12,446	1,383	3,263	0,000	0,000	0,033	0,000	0,467	0,0979	0,7141	0,5188	0,1664	0,5325	0,5138	0,1356	0,0014	2,0357	5,3E-04
0,70	20,00	5,00	3,615	12,450	1,430	3,231	0,000	0,000	0,000	0,000	0,660	0,0866	0,6473	0,4731	-0,1433	0,6092	0,5882	0,1468	-0,0012	4,4269	0,0E+00

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
4	0,96	25,43	4,97
	1,07	40,35	4,84
	1,27	26,54	4,84

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas								Incertidumbres								Determinante Matriz (G)		
			k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25		Alfa1	Alfa2
Carga	Tiempo	Catalizador	1,173	3,022	0,322	0,617	1,554	0,000	0,604	0,000	0,052	0,2855	1,3971	0,7836	1,3395	2,3977	1,9349	2,2531	0,0074	0,0882	5,3E-07
0,78	60,00	5,00	3,429	11,260	0,529	2,781	0,240	0,485	0,000	0,031	0,119	0,1173	0,9418	0,6786	0,1607	0,6318	0,6069	0,0834	-0,0017	0,1631	1,9E-05
0,70	20,00	5,00	3,458	11,766	0,890	2,981	0,016	0,218	0,000	0,030	0,215	-0,0941	0,7129	0,5101	0,1471	0,3085	0,3009	0,0698	-0,0014	0,4183	6,6E-03
0,78	60,00	5,00	3,451	11,737	0,944	2,841	0,008	0,191	0,000	0,031	0,250	-0,0846	0,6116	0,4360	0,1330	0,2480	0,2417	0,0538	-0,0014	0,4489	2,0E-02
0,70	20,00	5,00	3,431	11,701	1,059	2,774	0,004	0,097	0,000	0,031	0,128	-0,0764	0,5483	0,3830	0,1243	0,1516	0,1447	0,0326	-0,0013	0,3077	5,6E+00
0,70	53,85	5,00	3,408	11,543	1,043	2,845	0,002	0,097	0,000	0,030	0,127	-0,0723	0,5045	0,3527	0,1255	0,1316	0,1258	0,0293	-0,0013	0,2663	2,1E+01
0,70	20,00	5,00	3,467	11,826	1,179	2,890	0,001	0,071	0,000	0,031	0,151	-0,0682	0,4968	0,3540	0,1070	0,1459	0,1396	0,0307	0,0011	0,4711	0,0E+00

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
5	1,72	51,15	3,03
	0,93	24,36	3,04
	0,94	34,90	3,88

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
0,70	53,85	5,00	2,747	5,129	0,000	2,061	0,138	0,395	0,000	0,025	0,007	0,122	0,939	0,727	0,155	0,278	0,237	0,043	-0,002	0,014	1,40E+01
0,70	20,00	5,00	3,046	5,470	0,889	2,218	0,296	0,095	0,000	0,028	0,008	-0,134	0,911	0,694	0,173	0,121	0,107	0,032	-0,002	0,018	1,23E+05
1,11	60,00	5,00	2,991	5,745	0,773	2,140	0,315	0,121	0,000	0,028	0,020	0,108	0,697	0,507	0,147	0,120	0,108	0,032	-0,002	0,021	4,62E+05
0,78	60,00	5,00	3,063	5,804	0,824	2,131	0,280	0,125	0,000	0,029	0,011	-0,096	0,611	0,450	0,128	0,088	0,078	0,020	-0,002	0,013	2,62E+07
0,70	20,00	5,00	3,118	6,108	0,891	2,117	0,249	0,133	0,000	0,030	0,014	-0,090	0,551	0,410	0,122	0,073	0,066	0,017	-0,002	0,013	6,43E+07
1,72	60,00	5,00	3,135	6,044	0,864	2,157	0,244	0,129	0,000	0,030	0,010	-0,079	0,473	0,346	0,111	0,062	0,055	0,015	-0,001	0,010	4,26E+08
1,72	60,00	5,00	3,101	6,049	0,777	2,132	0,237	0,138	0,000	0,030	0,011	-0,068	0,422	0,311	0,091	0,058	0,051	0,013	0,001	0,009	1,44E+09

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
6	1,91	51,46	4,33
	0,79	29,50	3,63
	1,36	27,91	3,52

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
1,36	27,91	3,52	4,018	3,247	0,597	2,446	1,928	0,117	0,000	0,033	0,000	0,674	5,412	4,240	0,634	1,087	0,836	0,117	-0,008	0,016	8,7E-09
0,78	60,00	5,00	3,855	13,703	1,371	3,322	0,118	0,168	0,027	0,031	0,356	0,132	1,070	0,823	0,183	0,725	0,709	0,163	-0,002	0,978	1,3E-06
0,70	20,00	5,00	3,847	13,399	1,408	3,432	0,000	0,056	0,014	0,030	0,077	0,143	1,097	0,816	0,222	0,245	0,232	0,055	-0,002	0,328	2,6E-01
0,70	53,85	5,00	3,815	13,187	1,503	3,388	0,000	0,023	0,012	0,030	0,102	0,123	0,907	0,666	0,201	0,207	0,197	0,046	-0,002	0,551	2,8E-01
0,70	20,00	5,00	3,808	13,173	1,413	3,364	0,000	0,036	0,010	0,030	0,075	0,106	0,799	0,598	0,157	0,158	0,149	0,035	0,001	0,322	5,9E+00
0,78	60,00	5,00	3,857	13,289	1,466	3,361	0,000	0,026	0,012	0,031	0,049	0,091	0,690	0,518	0,134	0,114	0,107	0,024	-0,001	0,175	6,7E+02
0,78	60,00	5,00	3,682	12,618	1,256	3,230	0,000	0,044	0,003	0,030	0,034	0,080	0,611	0,448	-0,123	0,092	0,085	0,020	-0,001	0,137	0,0E+00

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
7	1,25	20,42	4,05
	1,00	41,56	3,71
	1,60	37,46	4,33

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
			1,545	3,166	0,485	1,211	0,834	0,000	0,000	0,014	0,003	0,371	2,643	1,621	0,833	1,113	0,853	0,297	-0,009	0,039	2,2E+00
0,70	53,85	5,00	3,673	12,327	1,624	2,918	0,004	0,000	0,009	0,033	0,003	0,145	1,166	0,897	0,199	0,108	0,095	0,026	-0,002	0,165	4,6E+01
0,70	20,00	5,00	3,556	12,071	1,501	3,125	0,000	0,000	0,008	0,030	0,003	0,131	1,023	0,746	0,214	0,158	0,145	0,039	-0,002	0,507	3,6E+01
0,78	60,00	5,00	3,503	11,899	1,464	3,008	0,000	0,000	0,000	0,030	0,004	0,109	0,814	0,586	-0,182	0,118	0,108	0,028	-0,002	0,037	4,5E+01
0,70	20,00	5,00	3,482	12,347	1,496	3,017	0,000	0,000	0,000	0,049	0,002	0,046	0,393	0,330	-0,071	0,220	0,204	0,024	-0,001	-0,044	4,9E+01
0,78	60,00	5,00	2,495	12,266	1,383	3,032	0,000	0,000	0,000	0,049	0,001	0,043	0,368	0,314	-0,064	0,173	0,161	0,020	-0,001	0,031	2,3E+02
1,62	60,00	5,00	3,490	12,134	1,464	3,081	0,000	0,000	0,000	0,048	0,001	0,041	0,344	0,292	-0,062	0,165	0,153	0,019	-0,001	0,031	0,0E+00

Punto de Partida

Conjunto	Carga Inyectada (g)	Tiempo Inyección (s)	Catalizador cargado (g)
8	1,00	36,71	4,28
	1,23	27,85	4,72
	0,89	40,70	4,05

Datos Generados

Puntos Experimentales Predichos			Constantes Estimadas									Incertidumbres									Determinante Matriz (G)
Carga	Tiempo	Catalizador	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	k12	k13	k14	k15	k23	k24	k25	Alfa1	Alfa2	
			1,082	1,395	0,224	0,558	1,333	0,072	0,231	0,000	0,010	0,364	1,450	0,799	1,226	0,896	0,695	0,926	0,008	0,019	7,3E-01
0,95	60,00	5,00	3,325	11,297	0,355	3,014	0,000	0,126	0,000	0,028	0,002	-0,124	1,035	0,770	-0,185	0,153	0,128	0,028	-0,002	0,024	1,4E+01
2,00	60,00	3,00	3,358	11,354	0,772	2,940	0,000	0,062	0,000	0,029	0,002	-0,102	0,790	0,578	0,157	0,077	0,066	0,019	-0,001	0,033	1,7E+04
0,70	20,00	5,00	3,377	11,495	1,006	2,978	0,000	0,044	0,000	0,029	0,002	-0,087	0,664	0,472	0,144	0,068	0,058	0,017	-0,001	0,042	1,7E+05
0,70	53,85	5,00	3,440	11,841	1,273	2,992	0,000	0,000	0,000	0,030	0,002	-0,088	0,656	0,462	0,150	0,057	0,049	0,015	-0,001	0,000	3,9E+05
0,78	60,00	5,00	3,485	11,862	1,327	2,698	0,000	0,000	0,000	0,051	0,007	0,053	0,463	0,389	0,073	0,064	0,055	0,009	0,001	0,007	5,5E+06
0,70	20,00	5,00	3,492	11,716	1,345	2,758	0,000	0,000	0,000	0,051	0,005	0,050	0,440	0,368	0,069	0,059	0,050	0,008	0,001	0,007	0,0E+00