

DISEÑO DE UNA METODOLOGÍA PARA LOGRAR UNA COMBUSTIÓN  
ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE MEZCLAS DE GASES

LOURDES ISABEL MERIÑO STAND

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
DOCTORADO EN INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA  
2015

DISEÑO DE UNA METODOLOGÍA PARA LOGRAR UNA COMBUSTIÓN  
ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE MEZCLAS DE GASES

LOURDES ISABEL MERIÑO STAND

**Tesis presentada como requisito para acceder al título de  
Doctor en Ingeniería Química**

Director:  
Dr. Sc. VIATCHESLAV KAFAROV

Co-Director:  
Ph. D. JAQUELINE SAAVEDRA RUEDA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
DOCTORADO EN INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA  
2015

## TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN .....	15
1.COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE GASES.....	17
1.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	17
1.2 ESTADO DEL ARTE.....	19
1.3 HIPÓTESIS.....	27
1.4 OBJETIVOS.....	27
1.4.1 Objetivo General .....	27
1.4.2 Objetivos específicos .....	27
1.5 ASPECTOS METODOLÓGICOS .....	28
2. METODOLOGÍA PARA LA GESTIÓN ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE LA COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE GASES.....	32
2.1 INTRODUCCIÓN .....	32
2.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	34
2.2.1 Norma ISO 50001 .....	34
2.2.2 Sistema de gestión .....	36
2.3 ETAPAS PARA EL DISEÑO DE LA METODOLOGÍA PARA LA GESTIÓN ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE LA COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE GASES	36
2.3.1 Revisión bibliográfica.....	37
2.3.2 Procesamiento de la información.....	37
2.3.3. Estructuración de la metodología.....	37
2.4 RESULTADOS.....	38

2.4.1 Etapa Planear .....	40
2.4.2 Etapa Hacer .....	44
2.4.3. Etapa Verificar .....	45
2.4.4 Etapa Actuar .....	46
2.5 CONCLUSIONES .....	47
3. VIGILANCIA TECNOLÓGICA DE PROCESOS DE COMBUSTIÓN Ecoeficientes .....	49
3.1 INTRODUCCIÓN .....	49
3.2 REVISIÓN LITERARIA .....	50
3.3 METODOLOGÍA .....	51
3.3.1. Selección de información .....	52
3.3.2 Etapas de pre y procesamiento de datos .....	52
3.4 RESULTADOS .....	53
3.4.1 Análisis cuantitativo de patentes .....	53
3.4.2 Análisis cuantitativo de producción científica .....	57
3.5 CONCLUSIONES .....	62
4. CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN .....	64
4.1. INTRODUCCIÓN .....	64
4.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS .....	66
4.2.1 Poder calorífico .....	66
4.2.2 Temperatura adiabática de llama .....	67
4.2.3 Eficiencia del proceso .....	67

4.2.4 Dióxido de carbono equivalente (CO <sub>2</sub> equivalente) .....	68
4.3 METODOLOGÍA PARA LA CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN.....	69
4.4 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS .....	70
4.4.1. Inventario de corriente de gases aportantes a la red de combustible. ....	70
4.4.2. Evaluación de mezclas de gases combustibles .....	75
4.5 CONCLUSIONES .....	79
5. MODELO PARA EL PROCESO DE COMBUSTIÓN .....	81
5.1 INTRODUCCIÓN .....	81
5.2 FUNDAMENTO TEÓRICO .....	82
5.3 METODOLOGÍA .....	89
5.3.1 Definición de variables dependientes e independientes. ....	89
5.3.2 Diseño de experimentos. ....	90
5.3.3 Equipo para evaluación experimental .....	91
5.3.4 Evaluación computacional de la combustión de mezclas de gases.....	94
5.4 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS .....	95
5.4.1 Emisiones generadas en la combustión de las mezclas representativas. ....	95
5.4.2 Temperatura de combustión. ....	103
5.4.3 Velocidad de frente de combustión:.....	107
5.5 CONCLUSIONES .....	108
6. HERRAMIENTA DE SEGUIMIENTO Y CONTROL Y PROCEDIMIENTOS PARA LA METODOLOGÍA DE GESTIÓN ECO-EFICIENTE .....	110
6.1 INTRODUCCIÓN .....	110

6.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	111
6.2.1 Indicadores de gestión.....	111
6.2.2 Lógica difusa.....	114
6.2.3 Inferencia difusa.....	116
6.3 METODOLOGÍA: .....	117
6.4 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	119
6.4.1 Indicador de eco-eficiencia .....	119
6.4.2 Procedimientos para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión... 128	
6.5 CONCLUSIONES .....	133
7. CONCLUSIONES GENERALES .....	135
8. NOVEDAD CIENTÍFICA .....	137
8.1. Generación de nuevo conocimiento o desarrollo tecnológico.....	137
8.2. Fortalecimiento de la capacidad científica y tecnológica: .....	137
8.3. Apropiación social de conocimiento.....	138
BIBLIOGRAFÍA.....	142
ANEXOS.....	162

## LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Fases, etapas, actividades y recursos de la metodología diseñada .....	39
Tabla 2. Principales categorías de patentes en el área de combustión + eficiencia. .....	54
Tabla 3. Líderes en solicitudes de patentes en el área de Combustión y Eficiencia energética. ....	55
Tabla 4. Líderes en producción científica .....	58
Tabla 5. Frecuencia acumulada de áreas declaradas en los trabajos. ....	59
Tabla 6. Factores de emisión.....	68
Tabla 7. Composición de las corrientes aportantes a la red de combustible .....	74
Tabla 8. Condiciones de proceso.....	75
Tabla 9. Características de los compuestos representativos de las mezclas .....	76
Tabla 10. Mezclas representativas. ....	77
Tabla 11. Lista de especies para mecanismos de cinética química.....	88
Tabla 12. Variables identificadas para el estudio.....	90
Tabla 13. Número de experimentos.....	91
Tabla 14: Composición Gas natural.....	95
Tabla 15. Resultados de la simulación en PREMIX de Gas Natural Chile.....	96
Tabla 16. Valores de CO <sub>2</sub> generado en las pruebas experimentales .....	96
Tabla 17. Tabla ANOVA para porcentaje de CO <sub>2</sub> . ....	97
Tabla 18. Composición de mezclas representativas.....	101
Tabla 19. Temperatura de combustión (K) obtenida en las pruebas experimentales .....	103
Tabla 20. Tabla ANOVA para valores de temperatura de combustión. ....	103
Tabla 21. Criterios para selección de indicadores. ....	112
Tabla 22. Entradas del modelo difuso.....	120
Tabla 23. Medidas operacionales para el mejoramiento del indicador de eco- eficiencia.....	125

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Beneficios del sistema de gestión de la energía.....	33
Figura 2. Evolución de la gestión energética .....	34
Figura 3. Ciclo Planifica- Hacer- Verificar – Actuar (PHVA).....	35
Figura 4. Esquema del sistema de gestión.....	36
Figura 5. Etapas para el diseño de la metodología para la gestión eco-eficiente de la combustión de mezclas de gases .....	37
Figura 6. Esquema general de la metodología diseñada.....	38
Figura 7. Etapa Planear.....	41
Figura 8. Modelo de gestión.....	42
Figura 9. Estructura del sistema de gestión.....	42
Figura 10. Estructura etapa Hacer.....	45
Figura 11. Estructura etapa verificación.....	46
Figura 12. Estructura de la etapa Actuar.....	47
Figura 13. Evolución de patentes en el tiempo en el área de combustión.....	53
Figura 14. Mapa SOM.....	56
Figura 15. Evolución en el tiempo de publicaciones .....	58
Figura 16. Mapa SOM.....	60
Figura 17. Metodología para la caracterización del proceso de combustión.....	69
Figura 18. Localización de la unidad de Viscosreducción.....	71
Figura 19. Hornos de Viscosreducción.....	72
Figura 20. Porcentaje de contribución de las áreas de una refinería a la red de combustible.....	73
Figura 21. Gases aportantes identificados a partir de la revisión del diagrama general de proceso.....	74
Figura 22. Esquema simplificado del mecanismo de oxidación de alcanos.....	87
Figura 23. Esquema de la metodología para la evaluación de la eficiencia energética y las emisiones ambientales.....	89
Figura 24. Esquema del equipo de reacción.....	94
Figura 25. Emisiones de CO y CO <sub>2</sub> en función de la relación de equivalencia.....	98
Figura 26: Porcentaje de H <sub>2</sub> en función de relación de equivalencia.....	99
Figura 27. Resultados mezcla CH <sub>4</sub> – H <sub>2</sub> en función de relación de equivalencia	100
Figura 28. Poder calorífico de las mezclas representativas .....	102
Figura 29. CO <sub>2</sub> y CO en función de la composición de la mezcla.....	102
Figura 30. Temperatura en función de la relación de equivalencia ( $\phi$ ).....	104
Figura 31. Termogramas de un horno de refinería.....	105
Figura 32. Temperatura de combustión y Temperatura adiabática en función de la relación de equivalencia.....	106
Figura 33. Temperatura en función de la composición de la mezcla.....	107
Figura 34. Velocidad de frente de llama en función de la relación de equivalencia.....	108
Figura 35. Esquema del sistema difuso .....	116

Figura 36. Etapas para la elaboración del indicador .....	117
Figura 37. Estructura del modelo de lógica difusa utilizado. ....	119
Figura 38. Reglas de conocimiento.....	122
Figura 39. Modelo difuso .....	123
Figura 40. Superficie de respuesta Temperatura –Eficiencia energética. (CO <sub>2</sub> Bajo) .....	124
Figura 41. Superficie de respuesta Eficiencia energética-CO <sub>2</sub> (Temperatura óptima).....	125
Figura 42 Cálculo del indicador de eco-eficiencia.....	127
Figura 43. Diagrama general para el diseño de la red de combustible. ....	131

## Lista de Anexos

Anexo A. Análisis de variación de la composición de las corrientes de gases aportantes a la red de combustible. ....	162
Anexo B. Herramienta de cálculo para el poder calorífico.....	171
Anexo C. Condiciones de operación y entrada de datos para la simulación en Premix. ....	175
Anexo D. Parámetros y ecuaciones cinéticas utilizadas para la simulación en Premix. ....	186
Anexo E. Análisis del modelo. ....	206
Anexo F. Reglas de conocimiento para el modelo de lógica difusa.....	209
Anexo G. Diseño de la red combustible. ....	213

# **TITULO: DISEÑO DE UNA METODOLOGÍA PARA LOGRAR UNA COMBUSTIÓN ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE MEZCLAS DE GASES<sup>1</sup>**

**AUTOR: LOURDES ISABEL MERIÑO STAND<sup>2</sup>**

**PALABRAS CLAVES: Combustión, ecoeficiencia, mezcla de gases, índice.**

## **DESCRIPCIÓN:**

La combustión ha sido un proceso clave para el desarrollo de la humanidad, aunque actualmente se encuentra ante la incertidumbre del agotamiento de los combustibles fósiles, lo que sumado al impacto ambiental por la generación de emisiones y su incidencia en el efecto invernadero, ha proporcionado el impulso para el desarrollo de investigaciones tendientes al uso eficiente de los combustibles y al desarrollo tecnológico en el área de la combustión asociado a la eco-eficiencia de los procesos [1].

La composición de las mezclas combustibles utilizadas en procesos industriales varía de acuerdo a sus características [2] y para enfrentar los problemas generados por la variabilidad de la composición de los combustibles [3,4,5,6], se diseñó una metodología para la gestión eco-eficiente de los procesos de combustión, integrando aspectos energéticos, ambientales y de seguridad operacional según los lineamientos de la norma ISO 50001, aplicando el ciclo Planificar- Hacer- Verificar - Actuar (PHVA) [7].

La aplicación de la metodología para la gestión eco-eficiente de la combustión se realizó tomando como caso de estudio la red de gas combustible de la industria de refinación del petróleo, teniendo en cuenta el impacto de esta industria en los aspectos económicos, ambientales y sociales a nivel nacional e internacional. La metodología diseñada permite caracterizar la red combustible en cuanto a la cantidad, calidad y condiciones de operación; evalúa el desempeño energético, ambiental y la seguridad de procesos mediante el modelo de combustión y establece las herramientas para el seguimiento y control del proceso de combustión. Para el desarrollo de esta investigación se contó con la colaboración de ECOPETROL S.A y la Universidad Sapienza de Roma (Italia) y Universidad Técnica Federico Santa María (Chile) para la realización de la pasantía.

---

**1 Tesis de Doctorado**

**<sup>2</sup> Facultad de Ingenierías Físico - Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Directores: Ph. D. Viatcheslav Kafarov, Ph. D. Jaqueline Saavedra.**

**TITLE: DESIGN OF A METHODOLOGY TO ACHIEVE A SAFE AND ECO-EFFICIENT BLEND OF FUEL GASES<sup>3</sup>**

**AUTHOR: LOURDES ISABEL MERIÑO STAND<sup>4</sup>**

**KEYWORDS: Combustion, eco-efficiency, gas fuel blends, index.**

**DESCRIPTION:**

Combustion has been a key process in humanity's development which actually faces the uncertainty about the depletion of fossil fuels and the environmental impacts associated with emissions and its influence in greenhouse effect, impacts that have given the impulse for the development of research oriented to reach an efficient use of fuels and the technological development in the field of combustion [1].

The composition of fuel blends used in industry, varies according with its characteristics [2] and to face the problems generated by the variability in the composition of these fuels [3,4,5,6], a methodology for the ecoefficient management of combustion process was designed, integrating energetic, environmental and safety dimensions according with the parameters of ISO 50001 and applying the cycle Plan-Do-Check-Act (PDCA) [7].

The application of this methodology for the ecoefficient management of combustion, was done in a case study in the gas fuel network in the petroleum refining industry. The selection of the industry was based on the high level of environmental, energetic and safety impacts of it. The designed methodology allowed to: characterize the fuel network according to quantity, quality and operational conditions; evaluate the energetic, environmental and safe performance of the process using the combustion model, and gives the tools for checking and controlling the combustion process. For the development of this research, the author thanks to ECOPETROL S.A and The Sapienza of Rome University (Italy) y Universidad Técnica Federico Santa María (Chile) for their help and collaboration.

---

<sup>3</sup> PhD. Thesis.

<sup>4</sup> Faculty of Physical-Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering. Directors: Ph.D. Viatcheslav Kafarov, Ph.D. Jaqueline Saavedra.

## INTRODUCCIÓN

Mediante la reacción de combustión la energía química almacenada en los combustibles se libera en forma de luz y calor, lo cual permite su utilización en diversos procesos domésticos e industriales [8].

En esta tesis se analiza el proceso de combustión integrando los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad bajo los criterios de eco-eficiencia, presentando en el capítulo 1 los aspectos generales de la investigación, tales como, el planteamiento del problema, el estado del arte, la hipótesis, los objetivos y la metodología que se siguió para el cumplimiento de los objetivos. Los resultados de la investigación se presentan en los capítulos del 2 al 6, y en la última parte se presentan las conclusiones generales y la bibliografía consultada para el desarrollo de la tesis. Cada uno de los capítulos está basado en los artículos presentados en eventos o publicados en revistas indexadas. Adicionalmente, se presentan los anexos con los datos de soporte de los capítulos. A continuación se presenta la descripción de los capítulos del 2 al 6.

El capítulo 2 presenta la metodología diseñada para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión de mezclas de gases; siguiendo los lineamientos de la norma 50001 se especifican la estructura con las fases, etapas y actividades, se identifican los recursos necesarios, los procedimientos y las herramientas de seguimiento y control. Los capítulos del 3 al 6 presentan implementación de la metodología aplicada al proceso de combustión de mezclas generadas en la industria de la refinación del petróleo.

Los capítulos 3 y 4 corresponden a la etapa de planificación de la metodología, la cual incluye la vigilancia tecnológica (capítulo 3) y la caracterización de la red combustible presentada en el capítulo 4.

El capítulo 5 presenta el modelo de combustión basado en herramientas computacionales, pruebas experimentales de laboratorio y datos reales de planta. El modelo permite realizar la evaluación energética, ambiental y los riesgos a los

que están expuestos los equipos por alta temperatura. Este capítulo corresponde a la etapa Hacer en la metodología para la gestión eco-eficiente.

Los resultados de la etapa Verificación se presentan en el capítulo 6; se determina un indicador de eco-eficiencia que integra los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad operacional utilizando lógica difusa, con el cual se puede hacer el seguimiento y control al proceso de combustión. Seguidamente se presentan los procedimientos correspondientes a la etapa Actuar de la metodología para la gestión eco-eficiente y el diseño de la red de combustible.

## **1. COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE GASES**

La combustión es el mecanismo para generar energía en equipos industriales como hornos y calderas. Los equipos están diseñados para utilizar gas natural como combustible; pero generalmente, el gas combustible es una mezcla de gas natural y diversas corrientes de gas que se generan en los diferentes procesos químicos, y deben ser usados a medida que se producen ya que se generarían altos costos para su almacenamiento.

De esta manera, las mezclas de gases combustibles constituyen una fuente de ahorro de gas natural para las empresas [2, 6, 9]; pero la mezcla que se genera no es homogénea debido a las variaciones de sus características, lo cual modifica el grado de conversión deseada y productos de combustión indeseados afectando la seguridad operacional y emisiones de contaminantes [10]. Estos equipos trabajan a alta temperatura y sufren daños progresivos hasta presentar diferentes mecanismos de daño o deterioro por contacto con ambientes agresivos que afectan la eficiencia del equipo, su confiabilidad, la seguridad operacional y aumenta los costos de mantenimiento; a la vez que son fuente de emisiones con alto impacto ambiental [4, 11, 12, 13].

### **1.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

Desde el punto de vista ambiental, la combustión de grandes cantidades de combustibles gaseosos aumenta el contenido de dióxido de carbono en la atmósfera originando un incremento de la temperatura global de la superficie del planeta conocido como efecto invernadero [14, 15]. Actualmente, el 69% de los gases de efecto invernadero corresponden principalmente a la quema de combustibles en los procesos de refinación y petroquímica.

Adicionalmente de generar un gran impacto ambiental, el desempeño ambiental de una empresa es relevante en una estrategia de diferenciación de precios porque se constituye en un indicador de la eficiencia de los procesos de

transformación utilizados; desde este punto de vista, la contaminación resulta de la incapacidad tecnológica para utilizar la totalidad de la materia y energía en los procesos productivos, y evidencia que los recursos han sido utilizados de forma incompleta, ineficiente o inefectiva.

Asociados a estas ineficiencias aparecen costos de disposición y costos de oportunidad, los cuales pueden llegar a ser determinantes para el éxito o fracaso en ambientes de alta competencia. Los costos de disposición pueden dividirse en costos de manejo (costos de almacenamiento, transporte, cargue y descargue inherentes al manejo de los residuos) y costos regulatorios: penalizaciones impuestas por los reguladores ambientales a las empresas contaminantes [16].

Estos aspectos son medidos a través del Índice de sostenibilidad del Dow Jones<sup>5</sup> que evalúa las empresas en materia económica, ambiental y social [14]. Desde el año 2010, las emisiones de CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> y N<sub>2</sub>O se han venido incrementando aproximadamente en un 5% anualmente [17]. Al respecto, empresas como Ecopetrol proponen para el 2015 reducir el 7% de sus emisiones relativas de gases efecto invernadero [18].

Por lo anteriormente expuesto, se debe procurar hacer un uso eficiente de los gases combustibles, manteniendo los parámetros establecidos para la producción de contaminantes atmosféricos y el impacto en la estructura de los equipos de combustión [5, 19, 20].

En este sentido, los principales desarrollos y procesos diseñados e implementados están orientados a incrementar la eficiencia energética, reducir emisiones de contaminantes [2, 21], aumentar la productividad de los procesos y al desarrollo de quemadores que permitan la quema de combustibles de diferente composición química [22, 23]. De igual manera recientes investigaciones se centran en la

---

<sup>5</sup> El Dow Jones Sustainability Group Index es un índice bursátil que registra el desempeño financiero (a valor de mercado) de las empresas que conforman el Dow Jones Global Index, consideradas líderes en la búsqueda de la sostenibilidad corporativa.

implementación de sistemas de control operacional para minimizar la ocurrencia de errores en operación y disminuir los riesgos de accidentes industriales [4, 24].

Adicionalmente, la búsqueda de metodologías para lograr procesos eficientes que armonicen con el cuidado del medio ambiente y garanticen la seguridad en los procesos, se constituye en un objeto de estudio constante, de lo cual se deriva la siguiente pregunta problema:

¿Cómo se deben integrar los elementos fisicoquímicos y fenomenológicos de los aspectos energéticos, ambientales y de integridad de equipos del proceso de combustión en una metodología para la combustión eco-eficiente de mezclas de gases combustibles utilizadas en hornos?

## **1.2 ESTADO DEL ARTE**

Los problemas derivados del uso de gases combustibles se han estudiado teniendo en cuenta que estos se presentan dependiendo de las condiciones del mercado, de la disponibilidad de los combustibles en las plantas industriales y la estabilidad operacional de las unidades que los generan y de las que reciben estos gases.

De manera general, la reacción de combustión estequiométrica es aquella en que todo el combustible se oxida y todo el comburente se reduce. En las condiciones reales del proceso de combustión en hornos y generadores de calor, no es posible lograr una combustión completa del combustible suministrando la cantidad de aire teóricamente necesaria. Esto obedece a la imposibilidad de lograr el mezclado perfecto del combustible con el aire en el equipo de combustión durante el breve tiempo de estancia de los gases en el mismo (1-2 seg.) [25].

Por ello, para asegurar una combustión suficientemente completa, que satisfaga los indicadores económicos del trabajo del equipo de combustión, el volumen real de aire suministrado al horno es siempre mayor que el teórico. La relación entre estos volúmenes se denomina coeficiente de exceso de aire y la relación de la

masa de combustible con la masa de aire se denomina relación de equivalencia. Hay que tener presente, al momento de seleccionar el coeficiente de exceso de aire suministrado al horno, que al reducirse este, disminuye la corrosión de las superficies de calentamiento, tanto de alta temperatura (por vanadio) como de baja temperatura (por azufre), se reducen las incrustaciones en los sobrecalentadores, así como la emisión de contaminantes (NO<sub>x</sub> y SO<sub>2</sub>) [3, 26]. De todo lo anterior se comprende la importancia de lograr una adecuada organización del proceso de combustión y que esta se realice de forma completa con el mínimo de exceso de aire.

Con el propósito de realizar los cálculos de los equilibrios químicos, las propiedades termodinámicas y predecir las condiciones de las ecuaciones de combustión para gas natural, se han utilizado Ecuaciones de Estado capaces de predecir con exactitud el comportamiento del gas natural, puesto que su determinación experimental puede ser difícil y costosa.

Las Ecuaciones de Estado cúbicas son utilizadas tradicionalmente para el modelamiento en la industria del petróleo porque ofrecen buenos resultados y son matemáticamente simple [27]. Algunas ecuaciones de estado no cúbicas se han obtenido a partir de la termodinámica estadística y están siendo cada vez más utilizadas, puesto que tienen una base teórica más sólida aunque tienen mayor complejidad y mayor esfuerzo computacional. Se han planteado numerosas investigaciones con el fin de comparar la calidad de las predicciones de las propiedades termodinámicas a partir de estas ecuaciones, siendo la ecuación de Peng and Robinson, la ecuación más ampliamente usada [28, 29].

Si se considera un flujo químicamente reaccionando, el sistema en cada punto en el espacio y tiempo está completamente descrito especificando la presión, densidad, temperatura, flujo y concentración de cada especie. Estas propiedades pueden estar cambiando, y estos cambios se describen matemáticamente con las

ecuaciones de variación que representan los fenómenos de transporte en cada una de las situaciones (transporte de masa, momentum o energía) [30].

La descripción simplificada del proceso de combustión considera flujo laminar con premezcla y un sistema continuo a presión constante, se puede usar la ley de gases ideales y la energía cinética del flujo de gas se considera despreciable comparada con los otros términos de la ecuación de conservación de energía y la llama se considera estacionaria [25].

Para determinar los perfiles de velocidad, temperatura y concentración y calcular los parámetros y propiedades del proceso de combustión se han desarrollado programas computacionales con precisión aceptable que luego deben ser validados mediante técnicas experimentales. De igual manera se ha hecho énfasis en la simulación de las características de la llama y a la predicción de los impactos ambientales causados, mediante el uso de métodos numéricos y la mecánica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) [29, 30, 31].

En el caso de mezclas de gases combustibles, se tiene como inconveniente la variabilidad de la composición, por lo que se han desarrollado índices que permitan tener parámetros de comparación entre gases de diferente origen y por lo tanto diferente composición; en este sentido, las investigaciones acerca de la intercambiabilidad de gases han determinado que la relación entre el poder calorífico del combustible y la gravedad específica proporciona información valiosa para la combustión de gases [32, 33].

La intercambiabilidad de gases es un área de estudio orientada a determinar el rango bajo el cual puede variar la composición del gas combustible en una aplicación de combustión, sin cambiar la seguridad operativa, eficiencia y desempeño del quemador [34].

El concepto idealizado de intercambiabilidad expone que dos gases son perfectamente intercambiables si al remplazar el uno por el otro, las características

de operación del aparato doméstico, comercial o industrial no se modifican. Esta definición implica que para alcanzar una intercambiabilidad perfecta, los gases deben tener composición química idéntica, argumento que en la práctica resulta imposible. A nivel industrial no se exige una intercambiabilidad perfecta, si no que los artefactos donde se lleva a cabo la combustión deben operar dentro de los límites permisibles de operación, dicho de otra manera, “un gas se dice intercambiable con otro de referencia, si él asegura, sin ajuste para los aparatos domésticos y eventualmente con simple ajuste para ciertos aparatos industriales, el funcionamiento satisfactorio de los aparatos de uso térmico que fueron ajustados para el gas de referencia” [35, 36].

En la actualidad existe una variedad de métodos para hallar la intercambiabilidad de gases combustibles, basados en el cálculo de magnitudes llamadas “índices de intercambiabilidad” que relacionan las propiedades fisicoquímicas del gas y los fenómenos de combustión, permitiendo una mejor caracterización y en consecuencia un rango más ajustado y preciso de intercambiabilidad, asimismo, determinan el comportamiento de la combustión del gas sustituto [37, 38].

Los primeros trabajos relevantes sobre la intercambiabilidad de gas combustible dieron como resultado el índice de Knoy e índice de Wobbe (poder calorífico dividido entre la raíz cuadrada de la gravedad específica), esta relación describe mejor el comportamiento de la llama de gases intercambiables que la utilización únicamente del poder calorífico; es por esto que se reconoce que el índice de Wobbe es un buen indicador de rendimiento similar para gases de una composición similar [24, 39, 40, 41]. Gilbert y Prigg desarrollaron un método que utiliza el número de Wobbe en función de la velocidad de la llama al cual denominan Factor de Weaver. Mientras que en Estados Unidos se utilizan los valores numéricos del índice de Wobbe en Europa se utilizan ampliamente los métodos gráficos para determinar la intercambiabilidad de gases [37].

Al respecto Steinmetz compara los resultados de la utilización de algunos métodos desarrollados en Europa y los Estados Unidos que relacionan el funcionamiento de los equipos con la composición del gas combustible [32, 42, 43, 44].

Siguiendo con las investigaciones acerca de la variabilidad de la composición del gas, Halchuck en 2001 publica su trabajo en el cual describe la incidencia de la calidad del gas para diferentes aplicaciones [45]. De igual manera Johnson y colaboradores en 2003, del Instituto para la investigación del gas, publican los test de evaluación de los intervalos de intercambiabilidad del gas natural y el gas licuado de petróleo vaporizado [32]. Al respecto, la Asociación Americana del Gas (AGA por sus siglas en inglés) y otros autores, han publicado estudios dedicados a la intercambiabilidad del gas natural en aplicaciones industriales y residenciales [46, 47, 48, 49, 50].

En Colombia, los estudios acerca de la intercambiabilidad de gases combustibles inicialmente se concentraron en el sector del transporte vehicular, debido a la necesidad de dar respuesta a los problemas derivados del programa de reconversión del parque automotriz en 1999 [51]. Estas investigaciones aplican los métodos de Delburg y el método de Dutton para la evaluación de la intercambiabilidad de los principales gases colombianos, obteniéndose que los gases provenientes de Cusiana y de la Guajira no son intercambiables, de acuerdo a las propiedades de combustión e índices de intercambiabilidad [52].

International Gas Union en el 2010 [6], publica la guía para la intercambiabilidad de gases, en la cual además de presentar una revisión de los aspectos teóricos de la intercambiabilidad de gases, desarrolla los planteamientos de la flexibilidad en el suministro, teniendo en cuenta las condiciones del mercado y la disponibilidad de interconexión donde se genera y donde se requiere el gas, tomando como parámetro el índice de Wobbe para determinar la adaptabilidad de los gases a las condiciones de uso final. Estos planteamientos son desarrollados tanto para uso residencial como para uso industrial.

En concordancia con lo anterior se hace referencia a trabajos acerca de la logística de los gases de proceso, atendiendo a los principios de la integración de procesos, como el trabajo presentado por Faruque y colaboradores [5], los cuales plantean una red de gas combustible basados en la conservación de energía, al tiempo que se previenen los daños ambientales.

En cuanto a la relación del impacto ambiental y los procesos de combustión se han identificado las relaciones del uso eficiente de la energía y el desarrollo sostenible, en términos de seguridad energética, precios de los combustibles, y el impacto económico; al respecto los diagramas de Sankey proporcionan de una manera gráfica una información muy valiosa sobre los flujos de energía, las emisiones de CO<sub>2</sub> y los flujos económicos asociados al sector energético; de igual manera el índice de intensidad energética de Solomon con lo cual se comparan las empresas de un mismo sector en cuanto al uso de energía. En este orden de ideas, la tendencia es a proporcionar un índice que permita medir la eficiencia del sector industrial con relación al uso de los combustibles en procesos de combustión bajo los parámetros de eco-eficiencia [53, 54].

En julio de 2011 se presentaron los resultados de la investigación que identificó los problemas de intercambiabilidad de las mezclas de gas natural con otros combustibles de refinería en Ecopetrol, evidenciando que las mezclas de gases combustibles que se presentan cuando ocurren anomalías en los procesos de refinación de petróleo, no son intercambiables; otra conclusión de este estudio es que cuando las mezclas superan el 6% de composición de etano- etileno y 6% de propano - propileno, el índice de Wobbe tiene un comportamiento inestable [55].

Una de las principales motivaciones para el estudio de las mezclas de gases combustibles es la alta incidencia que el proceso de combustión tiene en la seguridad del sector industrial, por los riesgos relacionados con incendios, explosiones y sus consecuencias en el bienestar humano, daños a la infraestructura y al medio ambiente.

Un factor determinante en la seguridad del proceso es la temperatura a la que están expuestas los equipos; actualmente, las plantas industriales operan a altas temperaturas y presiones para incrementar la eficiencia de los procesos; la aplicabilidad del Fe-9Cr-1Mo modificado en equipos industriales beneficia sustancialmente esta tendencia [56].

Sin embargo, la tendencia de incrementar los parámetros de operación con el fin de disminuir las emisiones contaminantes y mejorar la eficiencia de los procesos industriales, busca con el uso de materiales y aleaciones como la 9Cr-1 Mo modificada, ASTM A-335, aumentar las condiciones actuales de temperatura y presión, con el correspondiente incremento en la eficiencia de los generadores de vapor industrial desde 5 al 10% según lo reportado por Serna [57].

Las investigaciones acerca de los equipos de combustión se han centrado en la selección e implementación de un material para los equipos, que tenga buen desempeño a alta temperatura, para lo cual se deben tener en cuenta las siguientes propiedades y consideraciones técnicas, relacionadas específicamente con el proceso de combustión [56, 58]:

Coeficiente de expansión y conductividad térmica.

Resistencia a la termofluencia y a la fatiga térmica y mecánica.

Consideraciones de resistencia/ peso de acuerdo con las dimensiones.

Resistencia a la oxidación y a la tensión a alta temperatura

Soldabilidad y eliminación de juntas disímiles

Facilidad de fabricación, fácil reparación y mantenimiento

Disponibilidad y experiencia en el manejo de materiales

Alta relación beneficio/costo.

En consecuencia la búsqueda de modelos que describan la complejidad de los procesos de combustión y la determinación de índices que permitan medir la eficiencia energética, a la vez que cuantifiquen los impactos ambientales y su incidencia directa en la estructura de los equipos, es un tema de investigación de

los institutos y centros de investigación especializados en combustión y gas [59, 60, 61].

Al respecto, la eco-eficiencia integra estos aspectos desarrollando indicadores y herramientas de gestión que buscan garantizar el buen desempeño de las plantas industriales minimizando los impactos negativos. El concepto de eco-eficiencia nace de la concepción global de los impactos ambientales de las diferentes fases del ciclo de vida de un producto, y de la voluntad de reducir los diferentes efectos ambientales negativos [62].

Según World Business Council for Sustainable Development (WBCSD) una definición de eco-eficiencia es: "Proporcionar bienes y servicios a un precio competitivo, que satisfaga las necesidades humanas y la calidad de vida, al tiempo que reduzca progresivamente el impacto ambiental y la intensidad de la utilización de recursos a lo largo del ciclo de vida, hasta un nivel compatible con la capacidad de carga estimada del planeta" [63].

La eco-eficiencia se halla estrechamente ligada al desarrollo sostenible ya que equivale a optimizar tres objetivos: crecimiento económico, equidad social y valor ecológico. Es el principal medio a través del cual las empresas contribuyen al desarrollo sostenible y al mismo tiempo consiguen incrementar su competitividad. Este concepto significa añadir cada vez más valor a los productos y servicios, consumiendo menos materias primas, generando cada vez menos contaminación a través de procedimientos ecológica y económicamente eficientes y previniendo los riesgos [64].

Del análisis precedente se desprende, que la investigación e innovación en combustibles y combustión es de gran pertinencia, con un potencial de grandes impactos económicos, sociales, ambientales y científicos, con lo cual se puede preparar el país para seguir el cambio tecnológico, que garantice procesos eficientes adaptación y creación de tecnología, con impacto en la competitividad de la economía nacional y aporte a la generación de conocimiento.

Lo anteriormente expuesto demuestra la necesidad de diseñar metodologías para la implementación de procesos de combustión eco-eficientes, por lo que se plantea la siguiente hipótesis.

### **1.3 HIPÓTESIS**

Integrando los aspectos energéticos, ambientales, la integridad de equipos y la seguridad de procesos, con base en las propiedades fisicoquímicas, termodinámicas, las ecuaciones del transporte de masa, energía y momentum, y cinética de combustión y corrosión, para las mezclas de gases de refinería, es posible elaborar una metodología para lograr un proceso de combustión eco-eficiente y seguro.

### **1.4 OBJETIVOS**

#### **1.4.1 Objetivo General**

Diseñar una metodología para la gestión eco-eficiente de procesos de combustión de mezclas de gases en la industria de la refinación del petróleo, que integre la eficiencia energética, la temperatura adiabática de llama y las emisiones de CO<sub>2</sub> equivalente.

#### **1.4.2 Objetivos específicos**

- Realizar la caracterización de las mezclas de gases que integran la red de combustible en una refinería, teniendo en cuenta la procedencia, poder calorífico, la temperatura adiabática y las emisiones de CO<sub>2</sub> equivalente, a partir de la información sobre la composición química de las corrientes de gases de proceso.
- Evaluar experimentalmente la eficiencia energética y la composición química de las emisiones ambientales de los procesos de combustión, mediante el análisis del comportamiento de las mezclas combustibles, en

una cámara de combustión instrumentada de laboratorio, realizando un diseño experimental y teniendo como variables la composición de las mezclas combustibles y el exceso de oxígeno, y como parámetro de operación el flujo de combustible.

- Selección del modelo de combustión mediante la comparación de los datos experimentales obtenidos y la simulación computacional de las mezclas combustibles.
- Determinar el índice que integre la eficiencia energética, la temperatura adiabática de llama y las emisiones de CO<sub>2</sub> equivalente, los cuales constituyen los factores para la gestión eco-eficiente del proceso de combustión en hornos en una refinería.
- Validar la metodología diseñada aplicando cada una de las fases, etapas y actividades para el diseño de la red de combustible de un proceso de refinación de petróleo.

## **1.5 ASPECTOS METODOLÓGICOS**

Para el cumplimiento de los objetivos propuestos en la investigación se tiene como punto de partida la revisión de bibliografía especializada de los aspectos relevantes de la combustión de gases, normas y legislaciones vigentes que se aplican al proceso de combustión y basado en la norma ISO 50001 se desarrolló la metodología que integra los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad. Para la aplicación de la metodología para la gestión eco-eficiente se tomó como objeto de estudio un horno característico de la industria del petróleo.

Se realizó la caracterización de la red de gas combustible, para luego seguir con la simulación computacional, el diseño experimental y la realización de pruebas experimentales con las cuales se valida y ajusta el modelo que representa la combustión de mezclas de gases; seguidamente se desarrollaron herramientas para el seguimiento y control de la combustión. A continuación se describen las

etapas de la metodología que se siguió para el cumplimiento de los objetivos propuestos:

#### 1.5.1 Revisión bibliográfica.

La revisión bibliográfica se basó en literatura especializada del proceso de combustión y eco-eficiencia.

#### 1.5.2 Planteamiento de la metodología para la gestión eco-eficiente de gases.

Se establecen procedimientos que indican la estructura, los recursos, las actividades, los registros y los documentos que se deben llevar basados en la norma ISO 50001.

#### 1.5.3 Implementación de la metodología para la gestión eco-eficiente

##### a) Caracterización del proceso de combustión.

La caracterización del proceso inicia con la selección de una industria intensiva en el uso de combustibles en donde la combustión tenga un alto impacto; por este motivo se seleccionó la industria de refinación del petróleo y un horno representativo de este tipo de industria como objeto de estudio.

Para la caracterización se recolectó información general de la empresa, los portadores energéticos y el uso de la energía dentro de la empresa. La caracterización incluye el estudio de los diagramas de proceso, el análisis estadístico de los datos de consumo de combustible y su composición, para lo cual se utiliza el software estadístico Statgraphics y para el procesamiento de datos se utiliza Excel y Matlab. Las actividades realizadas fueron:

- ✓ Inventario de gases combustibles.
- ✓ Revisión de diagramas de procesos y de la red de gas.
- ✓ Revisión de condiciones de proceso.

- ✓ Identificación de las fuentes de mezclas, características, históricos de calidades y cantidades.

- ✓ Revisión de normas para operación de equipos y condiciones de proceso.

b) Evaluación del proceso de combustión y definición del modelo de combustión.

El proceso de combustión se evalúa con el fin de conocer el desempeño y las propiedades del proceso, haciendo uso de la termodinámica, la cinética y las propiedades de transporte, con lo cual se pueden conocer los impactos en la eficiencia energética, ambientales y en la seguridad operacional.

La evaluación se hace experimentalmente y mediante simulación computacional del proceso de combustión teniendo como variables la composición del combustible y la relación de equivalencia. Las actividades realizadas en esta etapa de la investigación fueron:

- ✓ Definición de variables dependientes e independientes.

- ✓ Realización del diseño de experimentos.

- ✓ Puesta a punto de la equipo de combustión para pruebas experimentales en el laboratorio.

- ✓ Verificación de las emisiones generadas en las pruebas de laboratorio.

- ✓ Simulación de mezclas de gases.

- ✓ Revisión de modelos existentes para el proceso de combustión.

- ✓ Selección de un modelo de combustión para mezclas de gases.

- ✓ Confrontar resultados experimentales con el modelo seleccionado.

- ✓ Implementación del modelo seleccionado para evaluar métodos y/o procedimientos que favorezcan la eficiencia energética y la reducción de emisiones, considerando parámetros de operación y diseño.

- ✓ Determinación de los intervalos óptimos de mezcla que favorezcan la eficiencia energética.

#### 1.5.4 Definición de herramientas de seguimiento y control del proceso de combustión

Las herramientas para el seguimiento y control del proceso de combustión se basan en índices que pueden ser monitoreados y medidos con lo cual se tiene información oportuna para la toma de decisiones. Se determinó un índice basado en los criterios de eco-eficiencia utilizando lógica difusa. Las actividades que se realizaron en esta etapa de la metodología fueron:

- ✓ Identificación de las condiciones de operación para cumplimiento de requerimientos energéticos y normas de seguridad de procesos.
- ✓ Determinación de las condiciones que favorezcan la seguridad operacional del proceso de combustión.
- ✓ Cálculo de indicadores energéticos de la línea base y análisis comparativo.

#### 1.5.5 Establecimiento de procedimientos que garanticen la combustión eco-eficiente y segura. Las actividades realizadas en esta etapa fueron:

- ✓ Identificación de los criterios de eco-eficiencia para el diseño de la red de combustible.
- ✓ Determinación de las restricciones y parámetros de medición de los aspectos ambientales.
- ✓ Identificación de criterios de seguridad de procesos para el aprovechamiento de gases de refinería.

## **2. METODOLOGÍA PARA LA GESTIÓN ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE LA COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE GASES**

### **2.1 INTRODUCCIÓN**

Un proceso de combustión eco-eficiente y seguro involucra a personal calificado que gestiona de manera eficiente recursos energéticos, equipos y herramientas de control para garantizar el cumplimiento de los requerimientos operacionales, ambientales y de seguridad en un proceso.

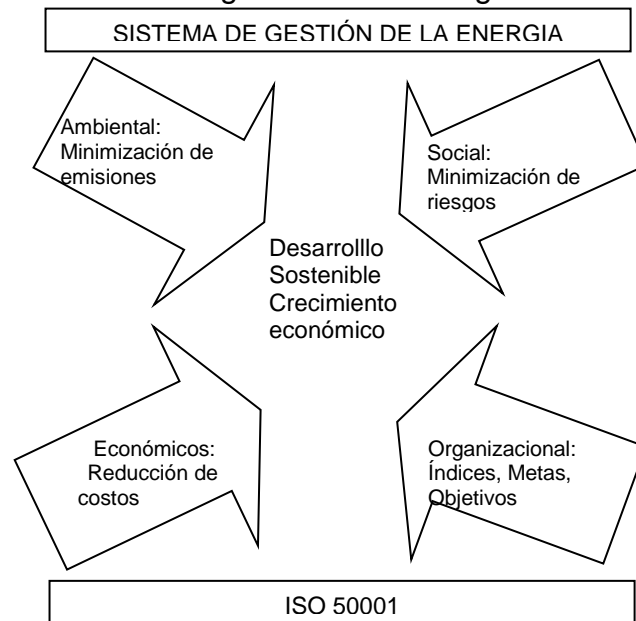
La metodología diseñada en este trabajo proporciona la estructura, el modelo, los procedimientos y herramientas necesarios para el desarrollo de un proceso de combustión eco-eficiente, teniendo en cuenta la variabilidad de la composición de las mezclas combustibles, por lo que se especifican las etapas y los recursos necesarios enmarcados en los referentes internacionales para los sistemas de gestión.

En este sentido, la gestión energética busca garantizar el desempeño energético, la reducción de costos y los impactos ambientales, pero su efectividad depende de las herramientas y procedimientos que las organizaciones apliquen; la norma ISO 50001 ofrece la orientación para garantizar administrativamente la sostenibilidad de la cultura de la eficiencia energética [65]; todo lo anterior, en concordancia con los planteamientos de los procesos eco-eficientes [66]. Sin embargo la norma no proporciona aspectos técnicos, procedimientos y recursos para procesos específicos de la industria, como en el caso de la combustión.

De acuerdo a lo anterior, la metodología diseñada para lograr una combustión eco-eficiente y segura de mezclas de gases sigue la estructura de las normas internacionales, basadas en un ciclo de mejoramiento continuo Planificar, hacer, verificar y actuar (PHVA) [67], presentando la fundamentación y los requerimientos de cada etapa y las herramientas para el seguimiento y control del proceso de combustión.

Al tomar como referencia los principios de un modelo de gestión, se facilita que la metodología desarrollada en este trabajo sea aplicable a la industria de la refinación del petróleo que requiera en su proceso productivo la combustión de gas natural o mezclas de gases livianos, debido a que está basada en los principios de las normas internacionales. La figura 1 presenta los beneficios del sistema de gestión de la energía.

Figura 1. Beneficios del sistema de gestión de la energía.



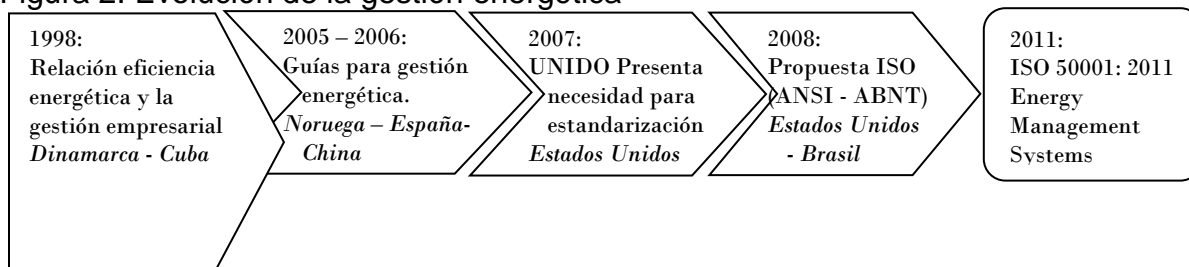
Fuente: Guía de implementación sistema de gestión de la energía [68].

La metodología incluye los elementos necesarios para la caracterización del proceso de combustión, las actividades para la evaluación de la eficiencia de la combustión y los impactos que se generan en el ambiente y la seguridad del proceso (incluyendo el modelo de combustión aplicable a mezclas de gases), el índice de eco-eficiencia y los procedimientos y herramientas para el mejoramiento continuo. En este capítulo se muestra el esquema general de la metodología, las etapas con sus recursos y la interrelación de cada uno de los elementos siguiendo el ciclo PHVA.

## 2.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

La gestión energética parte de la preocupación por el uso de la energía y sus impactos al ambiente; es así como actualmente son temas de interés los combustibles fósiles, la aplicación de fuentes no convencionales de energía y como tema transversal el uso eficiente y racional de la energía; esto ha llevado al desarrollo de sistemas de gestión dedicados a la gestión de la energía en las organizaciones, lo que ha dado como resultado un conjunto de normas internacionales que permiten a las organizaciones mejorar su desempeño energético alineadas con las normas ISO 9001: 2008, ISO 14001: 2004 y la ISO 22000: 200; en la figura 2, se muestran los principales hitos históricos de la evolución de la gestión energética en el mundo [65, 69, 70].

Figura 2. Evolución de la gestión energética



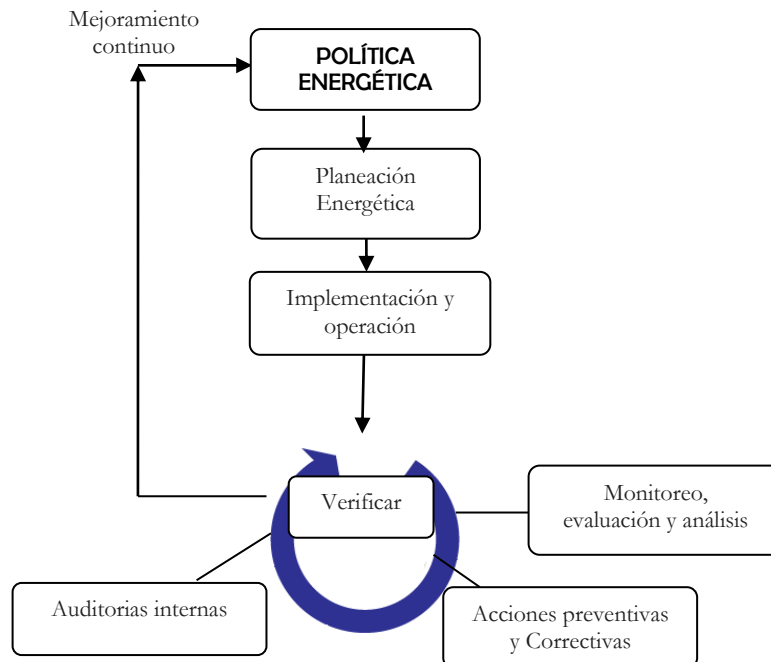
### 2.2.1 Norma ISO 50001

ISO 50001 especifica los requerimientos de un sistema de gestión de la energía a partir del cual una organización puede desarrollar e implementar una política energética y establecer objetivos, metas y planes de acción que tengan en cuenta los requisitos legales y la información relacionada con el uso significativo de la energía.

El propósito de esta norma es facilitar a las organizaciones el establecimiento de los sistemas y procesos necesarios para mejorar su desempeño energético, incluyendo eficiencia energética y el uso y el consumo de la energía, lo cual conduce a la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero y otros impactos ambientales, así como a la reducción de costos derivados del uso de la energía a través de una gestión sistemática [67].

La norma internacional ISO 50001 se basa en el ciclo de mejora continua Planificar – Hacer – Verificar - Actuar como se muestra en la figura 3, cada una de las etapas del ciclo se describen a continuación:

Figura 3. Ciclo Planifica- Hacer- Verificar – Actuar (PHVA)



Fuente: Guía de implementación sistema de gestión de la energía [68].

**Planificar:** Se fundamenta en el compromiso de los dirigentes de la organización quienes establecen las políticas, metas y objetivos que se quieren alcanzar. Esta etapa inicia con la revisión energética general para establecer la línea de base, los indicadores energéticos y los planes de acción necesarios para lograr mejorar el desempeño de acuerdo con la política energética de la organización.

**Hacer:** consiste en implementar los planes de acción declarados en la política energética de la organización con el fin de cumplir las metas propuestas.

**Verificar:** esta etapa permite realizar el seguimiento y la medición de los procesos y de las características clave de las operaciones que determinan el desempeño energético en relación a las políticas y objetivos energéticos e informar sobre los resultados.

Actuar: Una vez se tengas los resultados de la implementación de acciones, se deben tomar decisiones para mejorar en forma continua el desempeño energético y el sistema de gestión de la energía.

### 2.2.2 Sistema de gestión

El sistema de gestión integral de la energía es el conjunto de procedimientos y actividades estructuradas que integra los componentes del sistema administrativo y organizacional de la empresa, para alcanzar el consumo mínimo de energía. El modelo de gestión integral se desarrolla en el ámbito de tres etapas fundamentales:

- Decisión estratégica
- Instalación del sistema de gestión de la energía
- Operación del sistema

La implementación del modelo de gestión en forma sistemática tiene como propósito el aprovechamiento integral de todos los recursos disponibles en la organización y el análisis estratégico en función de la eficiencia con impacto en la productividad y en la consolidación de una cultura eco-eficiente. La figura 4 muestra el esquema del sistema de gestión

Figura 4. Esquema del sistema de gestión.



Fuente: Guía para la implementación de sistemas de gestión integral de la energía [66].

### 2.3 ETAPAS PARA EL DISEÑO DE LA METODOLOGÍA PARA LA GESTIÓN ECO-EFICIENTE Y SEGURA DE LA COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE GASES

Para la elaboración de una metodología eco-eficiente y segura para el proceso de combustión se realizaron las etapas descritas a continuación:

### 2.3.1 Revisión bibliográfica.

La revisión bibliográfica se basan en los antecedentes de la aplicación e implementación de la norma ISO 50001 en la industria y la articulación con la eco-eficiencia. Se consultaron reportes de aplicación de la norma 50001 y manuales para la implementación y se identificaron los criterios de eco-eficiencia para organizaciones y los indicadores o índices aplicables al proceso de combustión.

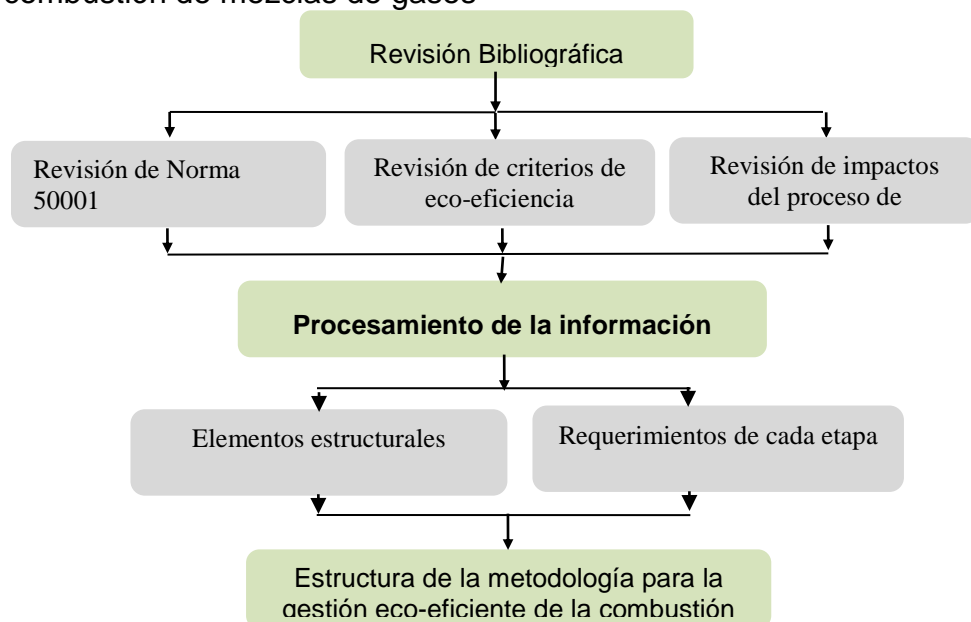
### 2.3.2 Procesamiento de la información

Se establecieron las relaciones entre eco-eficiencia y los modelos de gestión para incorporar estos elementos a la metodología que integra los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad de procesos.

### 2.3.3. Estructuración de la metodología.

Se basó en la identificación de elementos estructurales de la metodología y en la definición de los requerimientos en cada una de las etapas de la metodología. La figura 5, muestra las etapas para el diseño de la metodología.

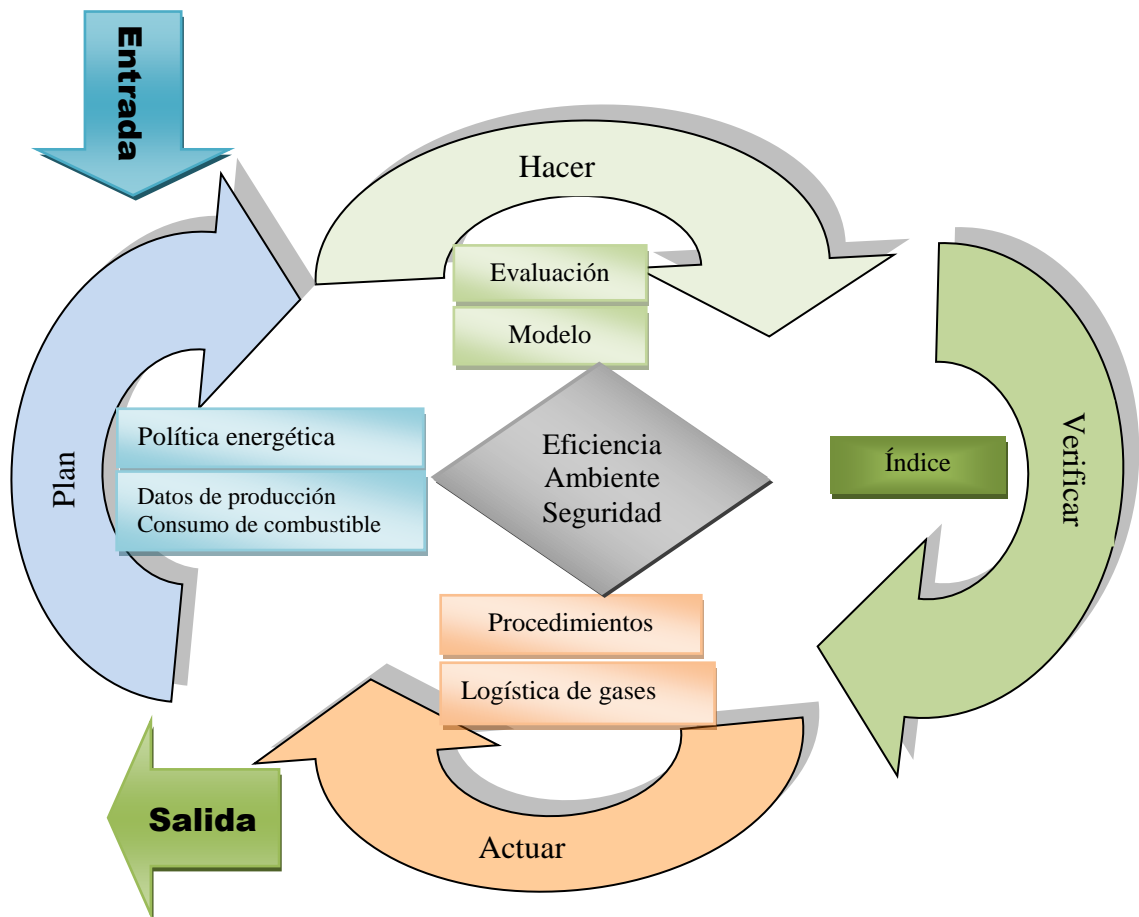
Figura 5. Etapas para el diseño de la metodología para la gestión eco-eficiente de la combustión de mezclas de gases



## 2.4 RESULTADOS

La metodología desarrollada integra los aspectos energéticos, ambientales y seguridad bajo los criterios de eco-eficiencia, siguiendo el ciclo de mejora continua PHVA; partiendo de la política energética que tiene una organización se plantean compromisos acordes con los requerimientos y recursos existentes y se identifican los proyectos a corto, mediano y largo plazo de acuerdo al nivel de inversión. Inicialmente se implementan proyectos de baja inversión que proporcionan la base y los recursos económicos para las etapas posteriores; en este sentido la fase inicial permite disminuir los consumos de energía y esto representa ahorros en los gastos generales de la empresa [68]. El esquema general de la metodología se presenta en la figura 6.

Figura 6. Esquema general de la metodología diseñada.



En la parte central se encuentran los aspectos que se han integrado para cumplir con los criterios de eco-eficiencia y se sigue el ciclo Plan- Hacer – Verificar – Actuar. La entrada al ciclo se hace con los datos de la organización y la caracterización de las fuentes energéticas, luego en la etapa posterior se procesa los datos de acuerdo al modelo de combustión y se evalúan los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad; los cuales son verificados con el índice de eco-eficiencia; en la última etapa del ciclo se toman decisiones de acuerdo a los resultados que se obtienen y se aplican los procedimientos de mejora continua.

La metodología para la gestión eco-eficiente de la combustión, integra los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad de acuerdo al seguimiento de las fases, etapas, actividades y requerimientos que se presentan en la tabla 1.

Tabla 1. Fases, etapas, actividades y recursos de la metodología diseñada

FASE	ETAPA	ACTIVIDADES	RECURSOS
ENTRADA	Planear	1. Caracterización de la red de gases combustibles.	- Diagramas de proceso - Datos de consumo de combustible - Datos de composición de gases combustibles
		2. Revisión de normas implementada	- Estructura organizacional - Documentos de normas implementadas - Registro de indicadores de seguimiento y control.
		3. Vigilancia tecnológica	- Datos de equipos de combustión - Parámetros de proceso - Bases de datos de patentes - Bases de datos de publicaciones científicas
PROCESO	Hacer	1. Desarrollo o selección del modelo de combustión	- Balances de materia y energía - Mecanismo de reacción - Perfiles de temperatura, velocidad y composición.
		2. Evaluación de la eficiencia energética del proceso de combustión.	- Datos de requerimiento energético del proceso. - Datos de exceso de oxígeno - Datos de poder calorífico del combustible - Condiciones de proceso.
		3. Evaluación de los impactos ambientales generados en el proceso de	- Datos de monitoreo de gases de combustión - Normas y legislación ambiental - Modelos predictivos para emisiones ambientales.

		combustión. 4. Evaluación de la seguridad del proceso	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Normas de seguridad</li> <li>- Datos de monitoreo de materiales de equipos de combustión.</li> <li>- Datos de mantenimiento y vida útil de equipos.</li> <li>- Métodos de evaluación de riesgos.</li> </ul>
	Verificar	1. Determinación de herramienta de seguimiento y control de los procesos de combustión, integrando aspectos ambientales y de seguridad de procesos.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Criterios de eco-eficiencia para el proceso de combustión.</li> <li>- Herramientas computacionales para el cálculo de índices.</li> <li>- Datos de las variables del proceso de combustión para los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad.</li> </ul>
<b>SALIDAS</b>	Actuar	1. Determinación de las restricciones logísticas de la red de combustible.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Características de las corrientes de gases combustibles.</li> <li>- Recursos de la organización para la gestión integral de la red de combustibles.</li> </ul>
		2. Diseño de los procedimientos de mejoramiento continuo basados en el índice de eco-eficiencia	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Datos de seguimiento del proceso de combustión con el fin de plantear acciones preventivas y correctivas.</li> <li>- Datos históricos de los índices de gestión.</li> </ul>

Cada una de las actividades anteriormente expuestas se articula con la siguiente etapa hasta completar el ciclo de la metodología; a continuación se presenta la descripción de cada etapa.

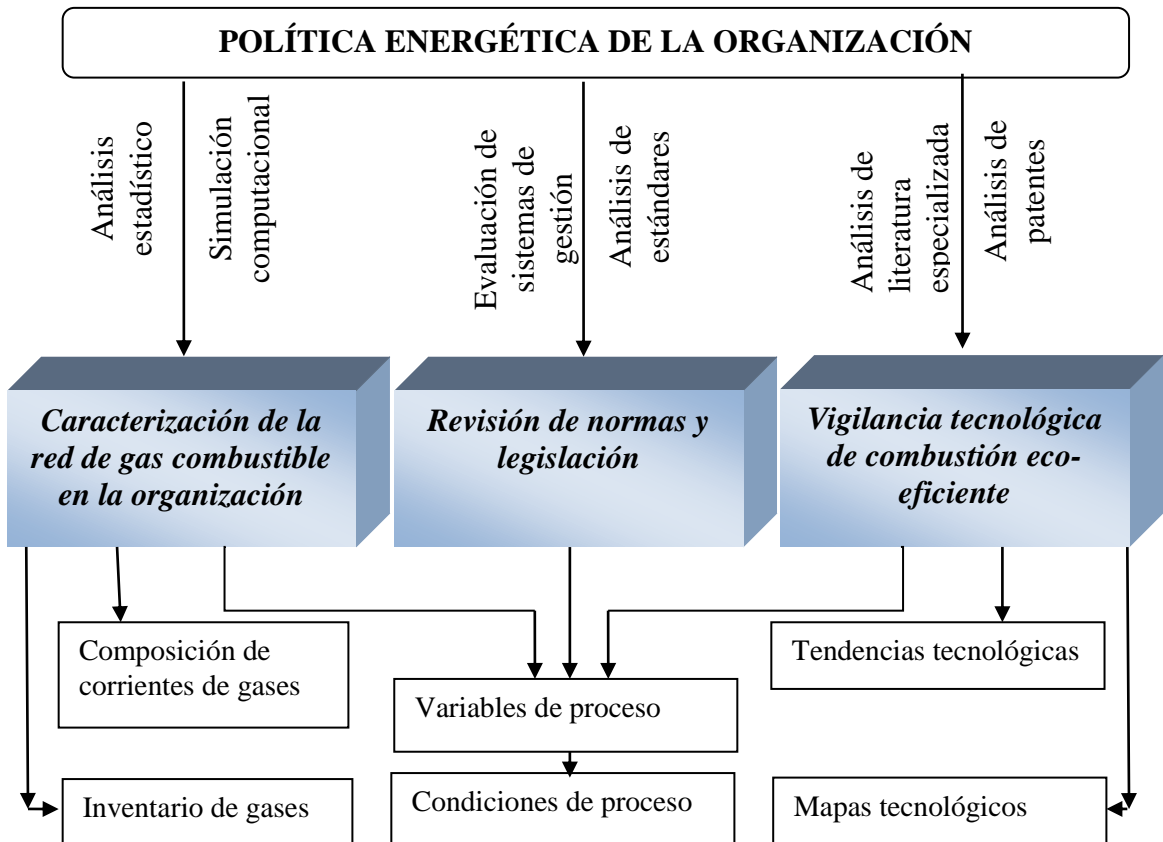
#### 2.4.1 Etapa Planear

Esta etapa parte de la política energética de la organización y desarrollando un ejercicio de planificación se establece el inventario de la red de gas combustible, las condiciones de operación y los mapas tecnológicos para la identificación de líderes tecnológicos y tendencias en eco-eficiencia. Se utilizan herramientas estadística, simulación computacional y técnicas de vigilancia tecnológica.

La integración de la eficiencia energética con las políticas y estrategias de la empresa y los modelos de gestión permiten la definición clara de metas, impactos e indicadores. En la etapa de planificación se implementa el sistema de gestión

definido en la figura 4 con cada una de sus tres etapas fundamentales: decisión estratégica, instalación y operación. La figura 7 muestra la estructura para la etapa de planeación y seguidamente se definen las características y herramientas de las etapas del sistema de gestión.

Figura 7. Etapa Planear.

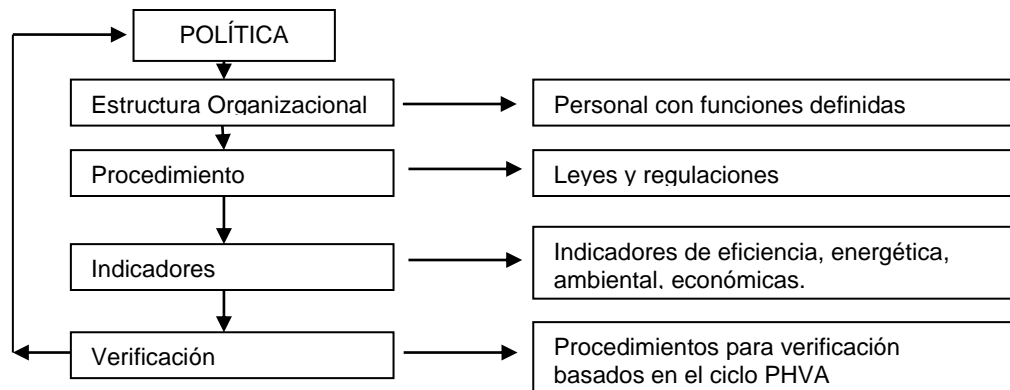


➤ Decisión estratégica:

La gerencia o la dependencia asignada por la gerencia para el manejo de la energía, debe presentar a todas las áreas de la compañía los objetivos, plazos, resultados esperados y métodos de trabajo que se utilizarán. Se hace énfasis en la participación, responsabilidades y los compromisos del personal de la empresa para el exitoso desempeño del sistema.

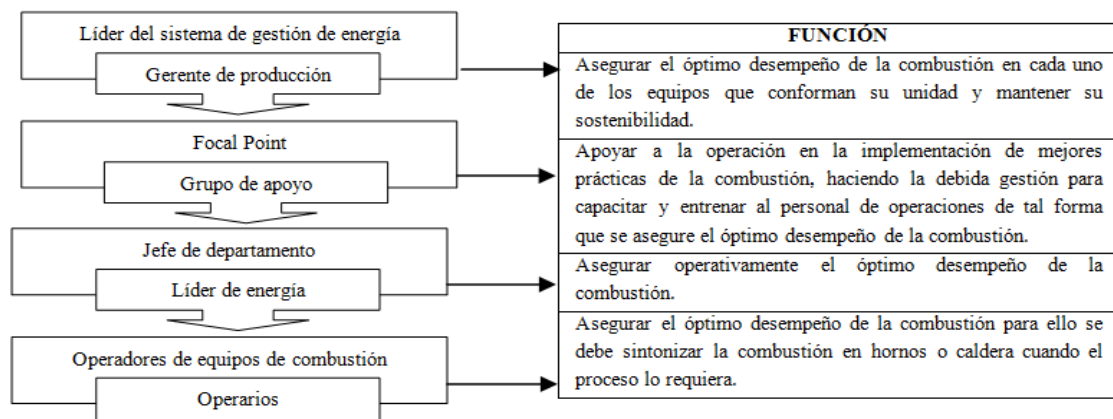
El Modelo de Gestión define los roles y los recursos dentro de la estructura de la organización, además de proporcionar los procedimientos, normas, estándares y mejores prácticas para realizar dichas acciones; el control del sistema se da con las auditorías periódicas y el aseguramiento de la información obtenida en este proceso, el cual incluye la transferencia del conocimiento [66]. En la figura 8 se muestra el esquema del modelo de gestión.

Figura 8. Modelo de gestión.



La estructura del sistema de gestión está basada en el organigrama de la empresa y establece el orden jerárquico, los roles y las responsabilidades de cada uno de los participantes en el sistema. En la figura 9 se presenta la estructura de la organización y sus respectivos recursos.

Figura 9. Estructura del sistema de gestión



➤ Instalación del Sistema de Gestión de la energía:

Las actividades para la instalación del sistema de gestión son:

- a) Definición y Conformación de la Estructura Técnica y Organizacional
- b) Análisis de la estructura orgánica de la empresa.
- c) Análisis de la red de combustible.
- d) Análisis o elaboración de los inventarios de gases combustibles.
- e) Diagrama de Pareto de consumo de la empresa por energéticos, basado en el análisis estadístico de datos de consumos y producción.

Las herramientas de gestión son: diagrama de flujo térmico de la empresa, datos de producción, organigrama de la empresa, censo de carga térmica, diagrama de medición de energía térmica, manual de gestión organizacional de la empresa.

➤ Operación del Sistema de Gestión de la Energía:

La operación del sistema de gestión inicia con la caracterización del uso del combustible, registrando los datos y monitoreando los consumos, con el fin de determinar la producción crítica del proceso y seleccionar los gráficos de tendencia y herramientas para el monitoreo del uso de la energía.

Herramientas: encuesta cualitativa, filtrado de datos, gráfico de tendencia, línea base, gráfico base 100, diagnóstico de recorrido a áreas y procesos. Hojas de cálculo y software especializados.

El análisis estadístico se debe aplicar para conocer la variabilidad en la composición del gas combustible y fijar los valores máximos y mínimos de los porcentajes de cada compuesto en la mezcla. El software Statgraphics presenta la

información en gráficas de caja y bigotes que facilita el análisis de los resultados estadísticos.

La simulación de la combustión de mezclas gaseosas se puede realizar en el software Aspen Hysys para clasificar las mezclas de acuerdo a su poder calorífico y verificar si se encuentran en el intervalo de estudio. Este software también suministra información acerca de los productos de combustión y la temperatura que puede ser útil para determinar tendencias en el comportamiento de los gases combustibles.

La solución de las ecuaciones para el cálculo de características se puede hacer por programación computacional, de manera general se utiliza la ecuación de Peng and Robinson para el cálculo de las propiedades termodinámicas [27, 28]. Para la vigilancia tecnológica se aplica la norma UNE 166000 y se utiliza Matlab para el procesamiento de los datos.

Los resultados de esta etapa permiten obtener el inventario de los gases combustión, las condiciones de proceso y los mapas tecnológicos.

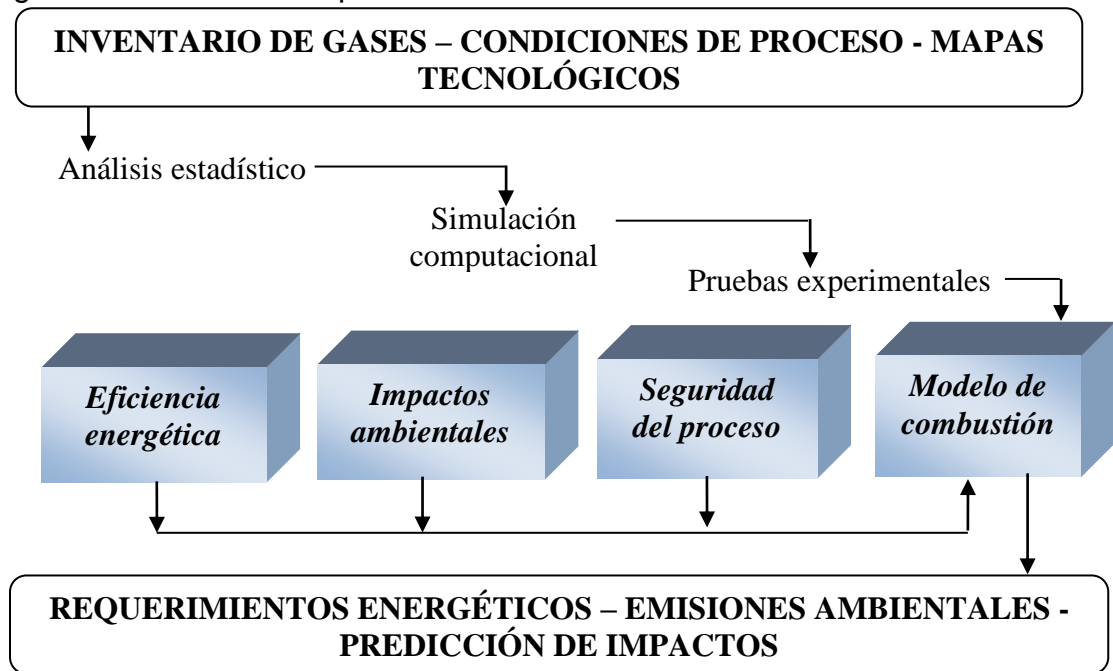
#### 2.4.2 Etapa Hacer

La etapa hacer consiste en evaluar la eficiencia, los impactos ambientales y la seguridad del proceso de combustión de las mezclas que se encuentran en el intervalo de estudio definido en la etapa de planificación, por lo que las entradas a esta etapa son los resultados del inventario de gases, las condiciones de proceso y los mapas tecnológicos. La figura 10 muestra la estructura de la etapa Hacer.

Los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad del proceso deben ser articulados y representados por el modelo de combustión, el cual está basado en las propiedades termodinámicas y de transporte y mecanismo cinético de la reacción. El modelo presenta las ecuaciones variación de masa, energía y cantidad de movimiento; las restricciones y consideraciones deben estar

identificadas con el fin de resolver las ecuaciones para hallar los perfiles correspondientes.

Figura 10. Estructura etapa Hacer.

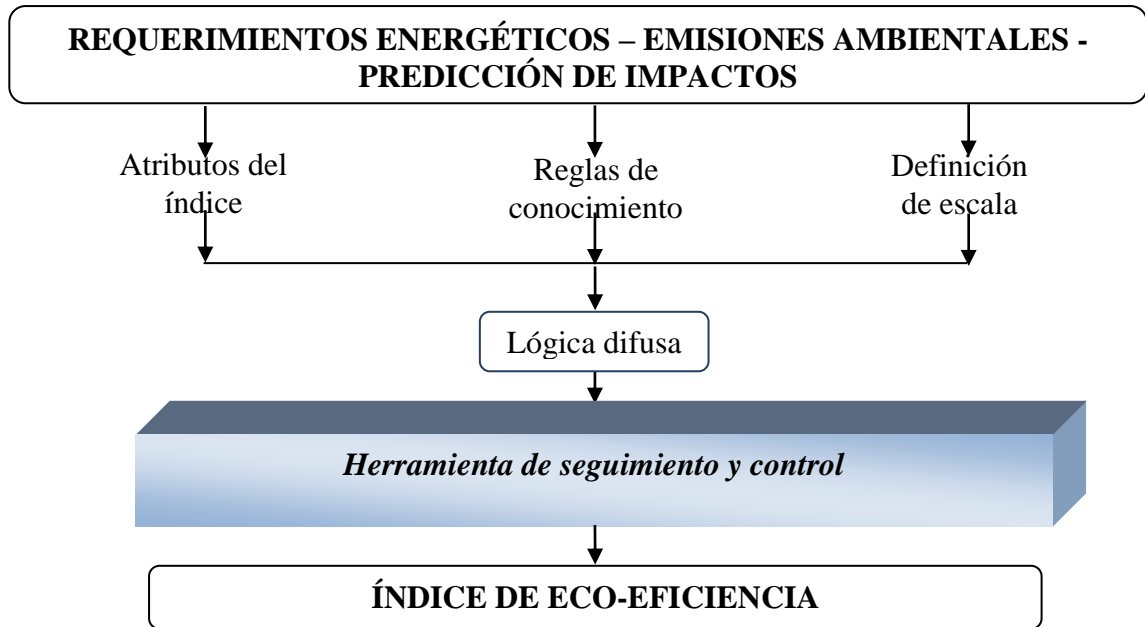


### 2.4.3. Etapa Verificar

El objetivo principal de la etapa de verificación es obtener una herramienta de seguimiento y control para el proceso de combustión. Esta etapa tiene en cuenta los requerimientos energéticos, las emisiones ambientales y la predicción de impactos y riesgos para establecer el indicador con el cual medir el desempeño del proceso de manera integral y permitir la toma de decisiones disminuyendo el grado de incertidumbre que se manifiesta al considerar separadamente los factores y variables del proceso de combustión.

La figura 11 muestra la estructura de la etapa de verificación.

Figura 11. Estructura etapa verificación.



Mediante el uso de la lógica difusa se puede obtener un indicador que integra los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad de procesos en una medida de fácil interpretación. El indicador proporciona una medida del grado de eco-eficiencia del proceso teniendo como información de entrada la composición de la mezcla combustible y el porcentaje de oxígeno utilizado en la combustión.

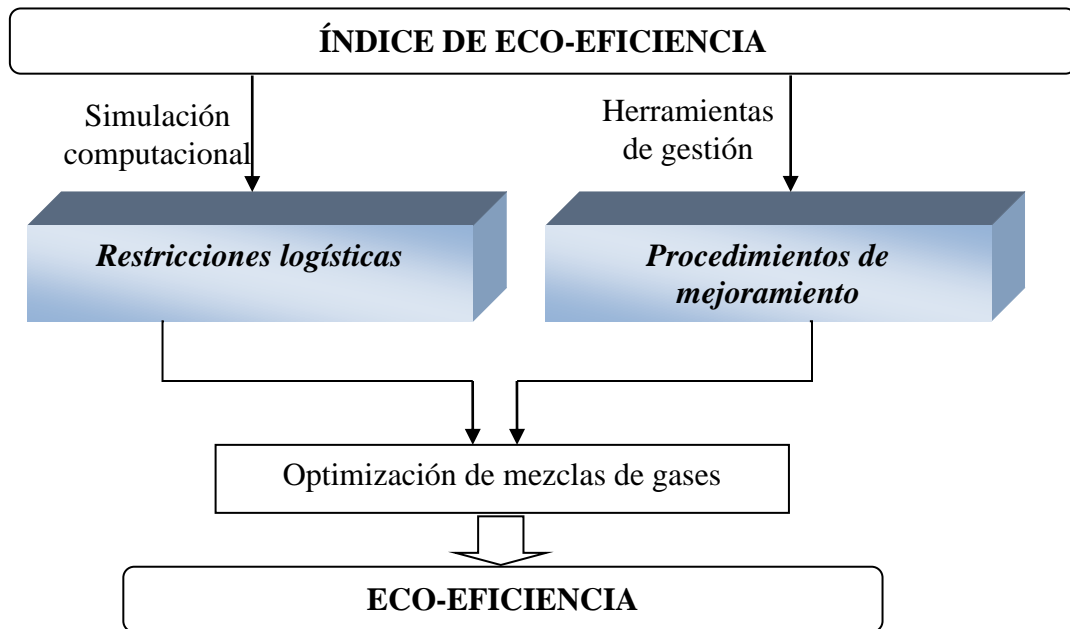
#### 2.4.4 Etapa Actuar

La etapa Actuar se encarga de realizar acciones tendientes a la mejora continua; en este sentido, se debe contar con procedimientos para realizar los correctivos necesarios para garantizar la combustión eco-eficiente y segura en la organización. La figura 12 muestra la estructura de la etapa Actuar.

Los procedimientos se basan en técnicas de optimización teniendo en cuenta las restricciones logísticas y el mejoramiento continuo. Se deben definir las estrategias de optimización y utilizar las herramientas adecuadas para valorar los

impactos en la red de combustibles. De igual manera se definen procedimientos de documentación y registro de las principales variables.

Figura 12. Estructura de la etapa Actuar.



En los capítulos posteriores se presentaran los resultados de la aplicación de la metodología para la gestión eco-eficiente diseñada, tomando como caso de estudio la industria de refinación del petróleo.

## 2.5 CONCLUSIONES

Se diseñó la metodología para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión de mezclas de gases siguiendo el ciclo de mejoramiento continuo PHVA; lo cual permitió tener los lineamientos específicos para la implementación de sistemas de gestión para procesos de combustión teniendo en cuenta los criterios de eco-eficiencia.

Se establecieron las bases generales de la metodología con las correspondientes fases, etapas, actividades y recursos necesarios para su implementación. Para cada una de las cuatro etapas (Planear – Hacer – Verificar - Actuar) se estableció la estructura, los requerimientos de información y las herramientas para su implementación.

La articulación de cada una de las etapas permite establecer un sistema de gestión en la organización basado en una estructura que asigna responsabilidades a todos los niveles de la empresa y proporciona procedimientos para el seguimiento y control del proceso a todos los participantes del sistema de gestión eco-eficiente.

### **3. VIGILANCIA TECNOLÓGICA DE PROCESOS DE COMBUSTIÓN ECOEICIENTES**

#### **3.1 INTRODUCCIÓN**

El presente capítulo presenta los resultados de la aplicación de la tercera actividad de la etapa planear de la metodología para la gestión eco-eficiente y segura del proceso de combustión diseñada, presentada en la tabla 1, la cual corresponde a la vigilancia tecnológica de patentes y la producción científica, teniendo como base un proceso de análisis cuantitativo y de conceptos claves en el área de combustión de gases y eco-eficiencia.

El propósito principal de este trabajo es abordar el análisis de patentes y la producción científica relacionada con el estudio de la combustión y los problemas relacionados con la misma, buscando con esto identificar características y tendencias que favorezcan posteriormente la formulación de acciones para el desarrollo de modelos investigativos acordes a los requerimientos y condiciones del problema específico que aborda esta investigación. Con la aplicación de un estudio cuantitativo fue posible identificar tendencias, patrones, líderes científicos y establecer las dimensiones vinculadas con la combustión y sus problemas a nivel mundial.

Para el desarrollo de la investigación se tomó la población total de patentes publicadas en las bases de datos Espacenet y bases de datos de artículos científicos de los últimos 10 años; se aplicó un proceso metodológico de preparación y depuración de la información basado en la implementación de una macro en Microsoft Excel y posteriormente, mediante una aplicación de redes neuronales con MATLAB y análisis estadístico con el programa NTSYS se obtuvieron los mapas de tecnológicos y la descripción de las tecnologías que han sido patentadas.

En la primera parte de este trabajo se describe el proceso de manejo de la información para dar paso, en la segunda parte, al análisis de los resultados estadísticos; luego, se muestra la representación gráfica de los resultados, por medio de mapas tecnológicos y en la última parte, se presentan las principales conclusiones obtenidas del estudio.

Los resultados del ejercicio de vigilancia tecnológica han sido publicados parcialmente en las memorias del XXVI Congreso Colombiano de Ingeniería Química “Energía y Desarrollo Sostenible”, 21 al 23 de septiembre de 2011. Barrancabermeja - Colombia. Título: Vigilancia tecnológica de procesos de combustión eco-eficientes mediante mapas tecnológicos de patentes. Autores: J. Saavedra, L. Meriño, V. Kafarov.

### **3.2 REVISIÓN LITERARIA**

El uso de la cienciometría en este proceso se basa en la necesidad de establecer tendencias y conocimiento específico sobre la dinámica de investigación en el campo de eco-eficiencia; la existencia de estudios precedentes como los de Novo y Papadimitrou confirma la utilidad de esta herramienta de análisis en este campo particular [71, 72].

De acuerdo a Jakobiak [73], la vigilancia tecnológica es un proceso que busca la identificación de amenazas y oportunidades de desarrollo para el entorno empresarial a partir de la observación sistemática y el análisis de los adelantos existentes en los entornos científicos y tecnológicos, además de los impactos presentes y futuros, que dichos adelantos pueden traer sobre las organizaciones [74].

Por su parte, la norma UNE 166000 (2006) como resultado de un proceso por estandarizar y normalizar las actividades de vigilancia tecnológica a nivel empresarial, define esta como un “Proceso organizado, selectivo y sistemático, para captar información del exterior y de la propia organización sobre ciencia y tecnología, seleccionarla, analizarla, difundirla y comunicarla, para convertirla en

conocimiento, con el fin de tomar decisiones con menor riesgo y poder anticiparse a los cambios” [75].

El número de publicaciones es considerado como un indicador de actividad científica [76] y en este sentido, la productividad diacrónica es entendida como el número de artículos por cada año del periodo estudiado [77] y su estudio permite establecer la evolución de la productividad de un campo científico en el tiempo, además del grado de madurez del mismo, medido a partir de la ley de crecimiento exponencial de Price [78].

### **3.3 METODOLOGÍA**

Este trabajo se enfoca en el análisis de las principales tendencias tecnológicas en torno al tema de “Procesos de combustión ecoeficientes” mediante la aplicación de técnicas estadísticas que permiten identificar, en primer lugar, a los líderes en elaboración de patentes de innovaciones, tanto a nivel de países, como a nivel de empresas; de igual forma, el análisis permite explorar la evolución en el tiempo de la aparición de publicaciones científicas, nuevas aplicaciones y usos de la tecnología referenciada.

En segundo lugar, se elaboran clusters, mediante el análisis basado en técnicas de inteligencia artificial, específicamente, mediante un algoritmo de Mapas autoorganizados (SOM), todo esto, para identificar tendencias dominantes en torno al tema de interés.

Las variables medidas corresponden con aquellas que permiten establecer el perfil y las características del campo científico estudiado [71]. Igualmente, aplicando un proceso de análisis temático basado en el modelo elaborado por Angulo y colaboradores [79, 80], se obtuvieron los mapas de correspondencias temáticos que permiten establecer la estructura y analizar las principales tendencias conceptuales involucradas en la totalidad de la producción. Las etapas se explican a continuación.

### **3.3.1. Selección de información.**

Para esta etapa, se tuvo en cuenta, en primer lugar, que las patentes seleccionadas permitieran un análisis representativo de la tecnología estudiada, ante esto, se seleccionó la base de datos de ESPACENET.

La búsqueda se realizó con base en el código de clasificación, que permite buscar a todos los individuos dentro de un mismo campo tecnológico, el criterio utilizado en esta etapa fue el código europeo: **F23** (Aparatos y procesos de combustión). Se delimitó el estudio a aplicaciones de patentes en el periodo 2005-2013 para involucrar en el estudio de tendencias solo los últimos desarrollos y se integró un delimitador a patentes que dentro de su título o resumen incluyeran el concepto de eficiencia. Como resultado de estas consultas se obtuvieron 783 patentes a partir de las cuales se desarrolló el proceso de análisis de la información.

Para el caso de la producción científica se analizaron los artículos del periodo comprendido entre 2005 y 2014, bajo el criterio de búsqueda de combustión, eco-eficiencia, emisiones, equipos de combustión. Se seleccionaron 1901 artículos de investigación reseñados mediante una búsqueda delimitada.

### **3.3.2 Etapas de pre y procesamiento de datos**

Se definió en primer lugar la necesidad de establecer análisis en torno a las siguientes líneas:

- Evolución en el tiempo.
- Identificación de líderes tecnológicos.
- Construcción de mapas tecnológicos.

De esta manera, se dejaron dentro de la base de datos, los siguientes campos (en su orden de aparición):

Título, Número de publicación, Fecha de publicación, Applicants.

Para la construcción de mapas tecnológicos se utilizaron los siguientes programas:

- Microsoft Excel: para el desarrollo del procesamiento de datos, construcción de macros de análisis y obtención de matriz de concurrencias.
- NTSYS: Paquete estadístico utilizado para la construcción del mapa de correspondencias.
- MATLAB: Software de programación utilizado para la construcción de mapas SOM.

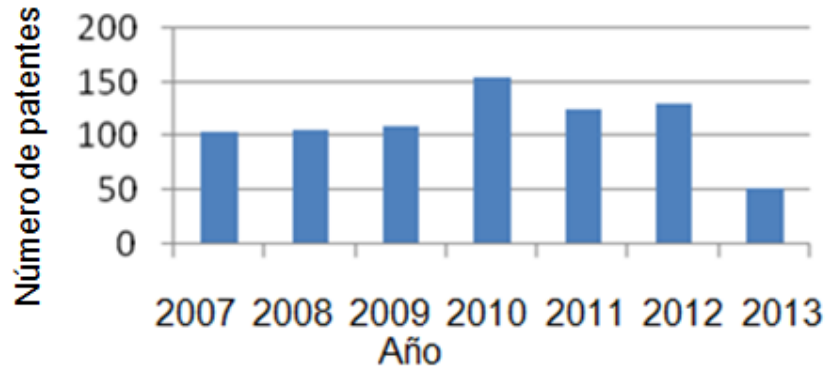
### 3.4 RESULTADOS

#### 3.4.1 Análisis cuantitativo de patentes

##### Evolución del número de patentes por año

Para el caso específico de tecnologías relacionadas con los procesos de combustión y eficiencia de los mismos, es importante apreciar, tal como lo muestra la figura 13, que existe una tendencia positiva en la evolución, tomando en cuenta que los datos para los años de 2013 y 2014 aún son preliminares por la dinámica de actualización de la base de datos de ESPACENET. Es posible apreciar, en promedio, que en los últimos 6 años, la dinámica de solicitudes de protección de inventos relacionados, se ha comportado con un relativo nivel de estabilidad, presentando su más alto punto en el año 2010, con cerca de 150 solicitudes de patentes resueltas.

Figura 13. Evolución de patentes en el tiempo en el área de combustión.



### Patentes por categoría

Con cifras preliminares para el año 2013, cabe destacar que las principales categorías de patentes involucradas en el desarrollo de inventos se relacionan con la aplicación de nuevos métodos, diseños, aplicaciones y aparatos relacionados con el aprovechamiento de los desechos como combustible, representado por la categoría F23G5. En la tabla 2, se muestran las principales 5 categorías de clasificación de patentes, y el significado de las mismas, de acuerdo al Modelo Europeo de Clasificación de patentes, disponible en la web de ESPACENET.

Tabla 2. Principales categorías de patentes en el área de combustión + eficiencia.

F23G5	Incineration of waste (of specific waste F23G7/00); Incinerator constructions; Details, accessories or control therefor
F23R3	Continuous combustion chambers using liquid or gaseous fuel
F23D14	Burners for combustion of a gas, e.g. of a gas stored under pressure as a liquid
B01D53	Separation of gases or vapours; Recovering vapours of volatile solvents from gases; Chemical or biological purification of waste gases
F23J15	Arrangement of devices for treating smoke or fumes

Cabe destacar dentro del análisis de las principales categorías, que el fenómeno de la eficiencia en el diseño, se involucra con el desarrollo o la búsqueda de nuevas aplicaciones utilizando como base, nuevos combustibles (F23G5) o procesos de explotación más eficientes con los combustibles tradicionales, principalmente líquidos y gaseosos (F23R3, F23D14) y procesos de tratamiento, optimización previa y preparación de residuos, con miras a lograr menores impactos sobre el medio ambiente (B01D53, F23J15).

### Líderes tecnológicos

Es importante apreciar que no se muestran sorpresas en torno a los países líderes (Estados Unidos (US), Japon (JP), Korea (KR), Rusia (RU), y China(CN)) ya que estos presentan los más altos niveles de desarrollo a nivel industrial, con grandes problemas ambientales derivados de su carrera industrial, por lo que, representan

un excelente mercado potencial para la introducción de nuevos productos relacionados con los campos y sub-campos analizados como áreas principales de estudio e investigación en el apartado de categorías. La tabla 3 muestra los principales líderes en cuanto en aplicaciones de patentes en el periodo 2007-2013.

Tabla 3. Líderes en solicitudes de patentes en el área de Combustión y Eficiencia energética.

País	US	JP	KR	RU	CN
Cuenta	277	58	52	49	32

Fuente: ESPACENET.

### **Tendencias tecnológicas identificadas**

Las 3 principales tendencias identificadas en el estudio de patentes relacionadas con procesos de combustión son:

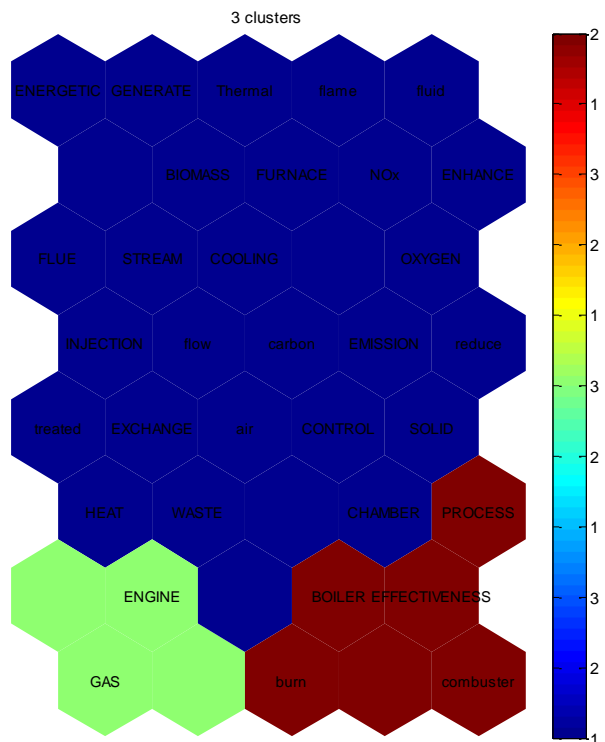
**Grupo 1:** Compuesto por conceptos como incinerating, organic, material, enhance, waste, wáter, trated, plant, comprise, equipment, recoverable, catalyst, termal, entre otras, este grupo permite establecer que la implantación, de nuevos diseños que incluyan la utilización de residuos y desechos como combustible, se ha convertido en sí misma como una tendencia de alto grado de importancia en el proceso de diseño eco-eficiente en el área de combustión.

**Grupo 2:** Compuesto por conceptos como Exhaust, Mixed, Turbine, Engine, Nozzle, Oil, Pulverized, NOx, Gasiffication, Electric, Apliance, Liquid, Boiler, Coal, Fluent, Power, entre otras, permite encontrar que existe un grupo de tendencia muy cercano a las condiciones tradicionales de diseño y operación de hornos y aparatos de combustión, que empieza a involucrar elementos de aprovechamiento de combustibles tradicionales, vía incremento de la eficiencia en combustión, pre-tratamiento de combustibles y la inclusión de elementos ambientales de manejo de residuos y emisiones, en la utilización de los procesos de combustión.

**Grupo 3:** Compuesto por conceptos como Bed, circulated, Exchange, fluid, temperature, ash, heavy, cooling, furnace y meltable, muestran una tendencia en torno a diseños que involucran la fluidodinámica en equipos de combustión que incluyen combustibles y productos de la combustión.

La figura 14 muestra el mapa tecnológico SOM, la utilidad del mapa SOM consiste en su utilización como un mecanismo de contraste, buscando con su desarrollo, el análisis y comparación de los resultados. En el nivel específico del estudio realizado, el mapa SOM, tal como se puede apreciar muestra 3 clusters de tendencia, que confirman las tendencias identificadas como los principales elementos en los cuales se orientan el futuro de los diseños eco-eficientes en el área de combustión.

Figura 14. Mapa SOM



### 3.4.2 Análisis cuantitativo de producción científica

El perfil del campo de conocimiento se realizó con la totalidad de la producción científica referente a los procesos de combustión, las condiciones de operación de los equipos y la eco-eficiencia. Entre 1928 y 2014 se han generado 7519 trabajos en torno al campo de la combustión y de acuerdo con los criterios de búsqueda definidos.

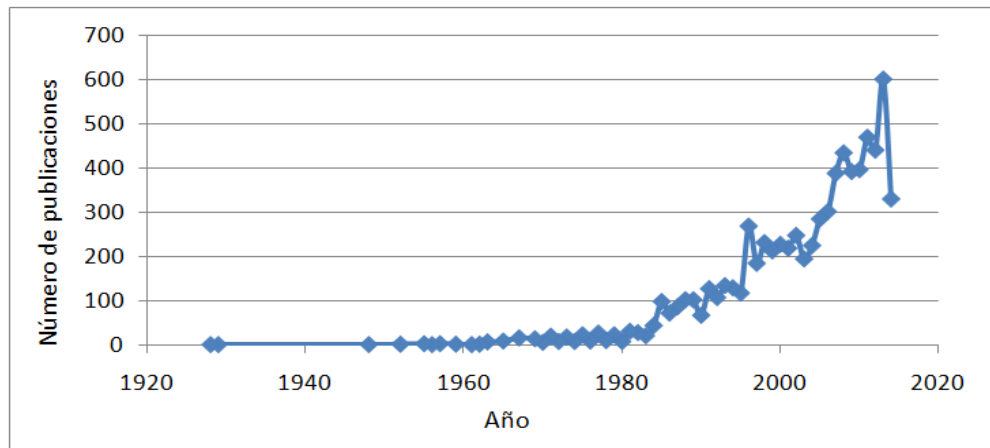
En este punto, el análisis de la productividad diacrónica permite identificar los siguientes elementos:

- En los últimos 10 años se ha generado aproximadamente el 30% de la producción científica en este campo, lo que confirma su vigencia y el nivel de importancia que actualmente reviste su aplicabilidad dentro de la dinámica productiva, de procesos y científica.
- De acuerdo al modelo de Price, la combustión, como campo científico se encuentra en una fase de crecimiento exponencial. En este punto, se ha pasado de una etapa inicial de precursores y aún no se inicia el estado de crecimiento lineal que indica la madurez del campo.
- Aunque la fase de crecimiento exponencial parece haber iniciado en la segunda mitad de la década de los 80, es posible apreciar que el desarrollo científico del campo no presenta sin embargo un crecimiento exponencial marcado dentro de su gráfica de tendencia, se observan más bien periodos de oscilación, cuya estructura ya fue igualmente analizada por Price y corresponde con una dinámica de **oscilación convergente** la cual es un indicador de saturación, o de madurez del campo científico analizado.

Las variables institucional, geográfica y de autores, dentro de este estudio, tienen la intención de vincular la evolución del campo con los centros de investigación, las instituciones y los autores dominantes, y con ello, no solo la formulación de estados del arte teóricos, sino también, para la utilización de estos datos en

acciones posteriores de investigación, extensión y colaboración con el fin de profundizar y vincular a la institución con los principales referentes del mismo [80, 81]. La figura 15 muestra el comportamiento de las publicaciones desde el año 1928, en el cual se encontró la primera referencia de acuerdo a los criterios de búsqueda utilizados.

Figura 15. Evolución en el tiempo de publicaciones



La tabla 4 muestra la productividad y la participación de los 10 países líderes en producción científica sobre combustión y eco-eficiencia.

Tabla 4. Líderes en producción científica

País	Número de artículos	Porcentaje
China	550	21,02%
Estados Unidos	268	10,24%
India	231	8,83%
Corea del sur	130	4,97%
Alemania	112	4,28%
Reino Unido	87	3,33%
Polonia	83	3,17%
Italia	76	2,91%
España	72	2,75%
Canadá	65	2,48%

Dentro de la producción analizada, se encontró que 87 países hacen parte del universo de trabajos producidos en el periodo de estudio. Los 10 primeros países representan el 63,99% del total de la producción, dentro de este grupo, Colombia con 9 artículos (0,34% del total) ocupa el puesto 37.

El estudio de las áreas de interés permite apreciar el interés particular de las acciones de investigación que reciben mayor atención por parte de la comunidad científica [71]. El análisis de las áreas de interés muestra un total de 9 campos cubiertos, siendo esto evidencia de lo delimitado que se encuentra el abordaje de la investigación frente a problemas relacionados con la combustión. La tabla 5 muestra la frecuencia acumulada de áreas declaradas en los trabajos analizados.

Tabla 5. Frecuencia acumulada de áreas declaradas en los trabajos.

Engineering	934	0,24630802
Energy	764	0,20147679
Chemical Engineering	553	0,14583333
Environmental Science	547	0,14425105
Chemistry	510	0,13449367
Materials Science	296	0,07805907
Multidisciplinary	71	0,01872363
Mathematics	62	0,01635021
Computer Science	54	0,01424051
Undefined	1	0,00026371

Fuente: Scopus.

Las áreas de ingeniería y energía ocupan aproximadamente el 44% de la producción, esto demuestra un alto componente técnico en el estudio de los procesos de combustión.

En este sentido cabe resaltar la participación de las ciencias ambientales con el 14% del total de artículos, una proporción baja tomando en cuenta que en parte, el análisis de este trabajo se enfoca no solo en la combustión, sino también en la relación de esta con las emisiones. Sin embargo, en este punto del análisis, no es posible establecer en qué sentido, la participación de esta área tiene en cuenta de la interrelación entre las investigaciones de combustión y su enfoque ambiental.

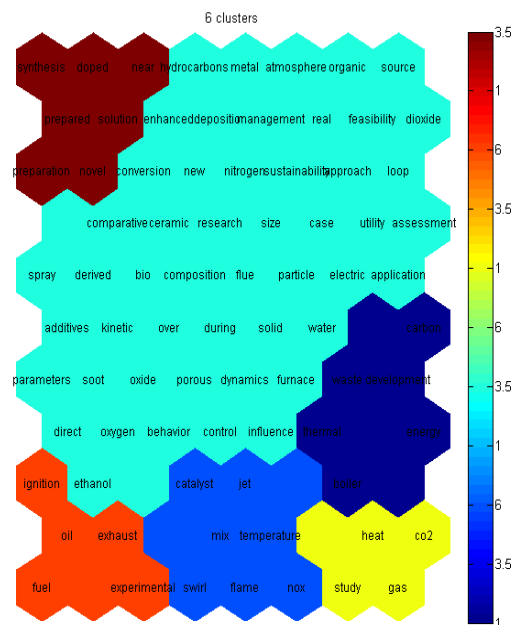
Otro punto importante para resaltar es la existencia del área de ciencias computacionales, que analizado en detalle evidencia un enfoque de aplicación de herramientas de simulación, modelación y análisis computacional al problema, el cual es compartido dentro de los objetivos de esta investigación.

### Mapa de correspondencias temáticas

El análisis de la producción científica identificó las interrelaciones propias de los trabajos analizados. Se ha aplicado un análisis de correspondencias basado en redes neuronales autoorganizadas [82].

La figura 16 muestra el mapa obtenido luego de la aplicación de la herramienta “somtoolbox” en Matlab, a la matriz de correspondencias entre los principales descriptores temáticos en el universo de artículos publicados y evaluados de acuerdo a los criterios de búsqueda [83].

Figura 16. Mapa SOM



SOM 24-Oct-2014

A partir de la figura 16, es posible apreciar los siguientes clusters:

**Cluster 1:** Compuesto por un conjunto de palabras claves que dan cuenta en primer lugar, del problema del cambio climático y el reto que este representa (Change y climate conforman la primera unión de conceptos en la totalidad del mapa), siendo entonces necesaria la acción legislativa para garantizar la regulación de emisiones producto de la combustión; las palabras vinculadas a este cluster son: sustainable, atmosphere, hydrocarbon, conversion, carbon, dioxide, control, composition, management, nitrogen, particule, spray.

**Cluster 2:** Enfocado en el valor de la investigación como soporte a la práctica industrial, en este cluster los conceptos se vincular alrededor de un perfil que integra la metodología, la práctica y los enfoques de la investigación científica. Las palabras vinculadas a este cluster son: syntesis, prepared, novel, solution.

**Clusters 3, 4 y 5:** Estos clusters están relacionados directamente con medidas operacionales y el control de los parámetros de operación; se evidencia la preocupación por las condiciones para las que fueron diseñados los equipos y los aspectos vinculados a la eficiencia energética, estos aspectos son vinculados con el cluster 2 en la medida en que se hace necesario investigar sobre los efectos de las condiciones a las que son sometidos los equipos y los efectos en el medio ambiente y la integridad de los equipos de combustión, ya sean hornos o generadores de vapor. Las palabras características de estos clusters son: energy, termal, heat, gas, flame, boiler, catalyst, CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, development.

**Cluster 6:** presenta un panorama acerca de los combustibles y los efectos de la composición de los combustibles en el proceso de combustión; las palabras que caracterizan este cluster son: fuel, oil, ignition, exhaust, experimental.

El análisis de los clusters anteriormente descritos muestra de manera integral el proceso de combustión; las tendencias básicas se refieren a los combustibles y los equipos de combustión; de igual manera se identifican como tendencias dominantes los aspectos relacionados con el control de las emisiones y la eficiencia energética. Las tendencias emergentes identificadas buscan evaluar de

manera integral la eficiencia energética ligada a la composición de los combustibles y los impactos en la integridad de equipos y el ambiente.

### **3.5 CONCLUSIONES**

La investigación en combustión y sus problemas es un campo en crecimiento, con un alto grado de madurez y diversidad de enfoques que facilita la aplicación de nuevas técnicas y visiones para el análisis de sus problemas y la formulación de alternativas de solución.

El fenómeno de la eficiencia en el diseño, se involucra con el desarrollo o la búsqueda de nuevas aplicaciones utilizando como base, nuevos combustibles, procesos de explotación más eficientes con los combustibles tradicionales, principalmente líquidos y gaseosos y procesos de tratamiento, optimización previa y preparación de residuos, con miras a lograr menores impactos sobre el medio ambiente.

Los países líderes representan los más altos niveles de industrialización y desarrollo, con grandes problemas ambientales derivados de su carrera industrial, por lo que, representan un excelente mercado potencial para la introducción de nuevos productos relacionados con los campos y sub-campos de los procesos de combustión, siendo ingeniería y energía los campos dominantes.

El análisis y desarrollo de herramientas computacionales se vislumbra como un área emergente con posibilidad y potencial de contribuir a la solución de los problemas de combustión, al mismo nivel que las soluciones técnicas.

Las 3 principales tendencias identificadas en el estudio cuantitativo relacionadas con procesos de combustión son:

- La implantación, de nuevos diseños que incluyan la utilización de residuos y desechos como combustible.

- Condiciones tradicionales de diseño y operación de hornos y aparatos de combustión, que empieza a involucrar elementos de aprovechamiento de combustibles tradicionales.
- Diseños que involucran la fluidodinámica en equipos de combustión, que incluyen combustibles y productos de la combustión.

A partir del estudio cuantitativo se determinó la necesidad de analizar de manera integral el proceso de combustión debido a su impacto a nivel global; es así como se establecen los referentes para diseñar la metodología para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión de mezclas de gases.

Los resultados de la vigilancia tecnológica expuestos en este capítulo permiten establecer que el aprovechamiento de los gases derivados de los procesos químicos y los sistemas de gestión para la combustión de gases son una de las tendencias para desarrollar sistemas eco-eficientes. Estas tendencias identificadas son el punto de partida para la caracterización y evaluación de los procesos de combustión, los cuales se estudian en los capítulos posteriores.

## 4. CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN

### 4.1. INTRODUCCIÓN

Actualmente el mundo se está enfrentado a grandes retos causados por el desarrollo económico global, que se refleja en un incremento en la demanda de energía mundial [1] y el aumento de las emisiones de dióxido de carbono [2,3]. Las industrias, a la vez que proporcionan bienes y servicios, consumen en sus procesos productivos grandes cantidades de energía y emiten gases de efecto de invernadero; uno de los ejemplos de industrias intensivas en el uso de la energía es la petroquímica y la refinación del petróleo, en la cual el 40 % del costo total de operación es la energía [84].

Los procesos de refinación y petroquímica utilizan como fuente principal de energía el gas natural (GN), pero también se utilizan mezclas de gas natural y gas de proceso, el cual es recuperado de las distintas plantas de procesamiento (Unidad de cracking catalítico, unidad de desulfurización y unidad de reformado catalítico), en el caso de una refinería, este gas es llamado gas de refinería y puede llegar a sustituir el gas natural dependiendo de la disponibilidad y la calidad necesaria para cumplir con los requerimientos energéticos de la industria [4, 85].

El gas de proceso se ha tenido en cuenta en estudios que consideran como variables el porcentaje de hidrógeno en el gas combustible, debido a que el hidrógeno permite la reducción de las emisiones de CO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub>; tal como lo reportado por Hsieh, quien encontró que utilizando entre 50 y 80% mol de hidrógeno en las mezclas combustibles, las emisiones se reducían del 16,4 y 8,2%, respectivamente [26].

Otro factor importante en el estudio de mezclas combustibles es el exceso de oxígeno, puesto que afecta directamente la eficiencia energética y las emisiones ambientales [86]; Rogaume y coautores, reportan que cuando aumenta el exceso

de oxígeno se eleva la temperatura de llama y se disminuye la eficiencia en hornos [87]; pero de igual manera si se emplean niveles bajos de oxígeno se ocasiona combustión incompleta [88, 89]. Los resultados de estos estudios llevan a concluir que el exceso de oxígeno es una variable importante en el proceso de combustión y que el valor óptimo depende directamente de la composición del combustible.

La caracterización de la red combustible, la revisión de norma y la vigilancia tecnológica son las actividades de la etapa de planeación de la metodología para la gestión eco-eficiente de la combustión; en este capítulo se presentan los resultados de la caracterización de la red combustible, articulado con los estándares nacionales e internacionales y los resultados de la aplicación de la metodología de vigilancia tecnológica presentados en el capítulo 3.

Para el cumplimiento del objetivo de este capítulo se utilizaron datos históricos industriales de corrientes de gases combustibles que aportan a la red combustible y son utilizadas en hornos de una refinería; estos datos son sometidos a un análisis estadístico y luego a las corrientes de gases que se encuentren el rango de estudio se les calculan sus propiedades fisicoquímicas (composición química, temperatura adiabática de llama, densidad, poder calorífico), a partir de esta información se realiza el inventario de las corrientes de gases, se establecen condiciones de proceso y el impacto de la composición de mezclas representativas. Los resultados parciales correspondientes a este capítulo han sido publicados en la revista y en los eventos siguientes:

Saavedra J., Merino L., Kafarov V., Determination of the gas composition effect in carbon dioxide emission at refinery furnaces, *Chemical Engineering Transactions*, 35, 1357-1362 2013, DOI:10.3303/CET1335226. Indexada A2 en publindeX.

Lourdes Meriño, Jaqueline Saavedra, Viatcheslav Kafarov, Daniel Montaña Herrera. Characterization of fuel mixtures produced and used in the petroleum

refining process. 12th Mediterranean Congress of Chemical Engineering. Barcelona – España. November 15-18, 2011.

Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov, Jaqueline Saavedra, Oscar Cala. Efecto del uso del gas de refinería sobre la eficiencia energética y las emisiones de dióxido de carbono en el proceso de combustión. SIMADS 2013. Bucaramanga – Colombia. Noviembre 6 – 8, 2013.

O. M. Cala - L. Meriño - V. Kafarov - J. Saavedra, Efecto de la composición del gas de refinería sobre las características del proceso de combustión, Revista Ingenierías Universidad de Medellín, vol. 12, No. 23 pp. 101 - 112 Julio 2013, Medellín, Colombia.

## **4.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS**

El proceso de combustión se basa en una reacción exotérmica que produce luz y calor; para analizarlo se conjugan la termodinámica, la cinética y los fenómenos de transporte [30]; este carácter multidisciplinario tiene como punto de partida las propiedades fisicoquímicas de los combustibles, los cuales se utilizaron para hacer la caracterización de una red combustible en la que se presentan mezclas de gas natural y gas proveniente de los diferentes procesos que se desarrollan en la industria del petróleo.

Las propiedades de los gases y mezclas combustibles que se estudian en este capítulo son el peso molecular, densidad, poder calorífico, temperatura adiabática; estas propiedades son el punto de partida para estudiar los aspectos termodinámicos, cinéticos y de transporte para definir el modelo de combustión adecuado para describir el comportamiento de las mezclas de gases [30, 90].

### **4.2.1 Poder calorífico**

El poder calorífico evalúa el calor desprendido por la reacción de combustión a presión o volumen constante, en un reactor isobárico e isotérmico a condiciones

estándar (T= 298 K y P=100 kPa); se considera poder calorífico superior (PCS) si se contabiliza el calor desprendido cuando el agua en los productos se considera condensada, y el poder calorífico inferior (PCI) considera el agua en los productos como vapor. El poder calorífico es una propiedad sensible a los cambios en el combustible y para mezclas gaseosas se define como [10]:

$$PCI = \sum y_i PCI_i \quad (1)$$

Ecuación 1

Donde,  $y_i$  es la fracción molar de cada componente de la mezcla y  $PCI_i$  es el poder calorífico de cada componente de la mezcla.

El poder calorífico de un combustible afecta el rendimiento del horno, incluyendo las características de la combustión (longitud de la llama, estabilidad de la llama y temperatura), eficiencia térmica y las emisiones, Por lo tanto es un parámetro de vital importancia en el estudio de la combustión [91, 92].

#### 4.2.2 Temperatura adiabática de llama

La temperatura adiabática de llama es la máxima temperatura que pueden alcanzar los productos de combustión en un sistema aislado térmicamente a presión constante, en ausencia de trabajo y sin considerar cambios apreciables en la energía cinética de la corriente de flujo [25, 93]. La expresión para el cálculo de la temperatura adiabática de llama es:

$$T_{ad} = T^{\oplus} + \frac{PCI}{c_p \sum v_i}$$

Ecuación 2

Donde,  $T^{\oplus}$ , es la temperatura a condición estándar,  $C_p$  capacidad calórica y  $v_i$  los coeficientes de mezcla.

#### 4.2.3 Eficiencia del proceso.

La eficiencia de combustión en hornos es la medida del calor liberado en la llama que es absorbido por el fluido a calentar o calor recibido por el proceso, se calcula

a partir de las pérdidas de calor en la chimenea y la energía que libera el combustible utilizado. Para su evaluación se utilizó el modelo de entradas y salidas (indirecto) descrito en la norma ASME PTC 4.1 [94], validados por Hsieh [26]. Se define como:

$$\eta = \frac{PCI - Q_{chimenea}}{PCI} * 100 \quad (3) \quad \text{Ecuación 3}$$

Donde PCI es el poder calorífico inferior del combustible y el  $Q_{chimenea}$  es el calor perdido en chimenea.

#### 4.2.4 Dióxido de carbono equivalente (CO<sub>2</sub> equivalente)

La cuantificación de las emisiones al medio ambiente se hace a nivel mundial teniendo en cuenta las actividades desarrolladas por el hombre que generan gases de efecto de invernadero. Con el fin de estandarizar una medida internacional, se emplea una medida del impacto que tiene una mezcla de gases expresada en términos de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub> equivalente - CO<sub>2</sub> e) [95].

En el proceso de combustión se emite además del CO<sub>2</sub>, monóxido de carbono, metano, óxidos de nitrógeno y compuestos volátiles, para cada uno de esos gases se han establecido factores de emisión con los que se cuantifica el dióxido de carbono equivalente; según la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA), un factor de emisión es un valor representativo que relaciona la cantidad de un contaminante liberado a la atmósfera en una determinada actividad que produce la emisión de contaminantes. [96, 97]. La lista de los factores de emisiones para las diferentes fuentes de combustión de combustible fósiles, se muestra en la tabla 6.

Tabla 6. Factores de emisión.

Descripción de equipo y mecanismo de control	FACTORES DE EMISIÓN		
	CO <sub>2</sub> (lb/scf)	N <sub>2</sub> O (lb/scf)	CH <sub>4</sub> (lb/scf)
Caldera, horno o calentador	0,12	0,0000022	0,0000023

Fuente: EPA [96]

La ecuación para el cálculo de la estimación de emisiones es la siguiente:

$$E = (A) \cdot (FE)$$

Ecuación 4

Donde E = emisión, A = tasa de actividad, FE =Factor de emisión,

Para un horno, que es considerado un equipo de baja capacidad (< 100 MMBtu/h), la tasa de actividad A en Ton/h se encuentra dada por:

$$A = \text{Potencia Calorífica HHV} \times \text{Consumo de gas} \times \frac{0,00045}{1020}$$

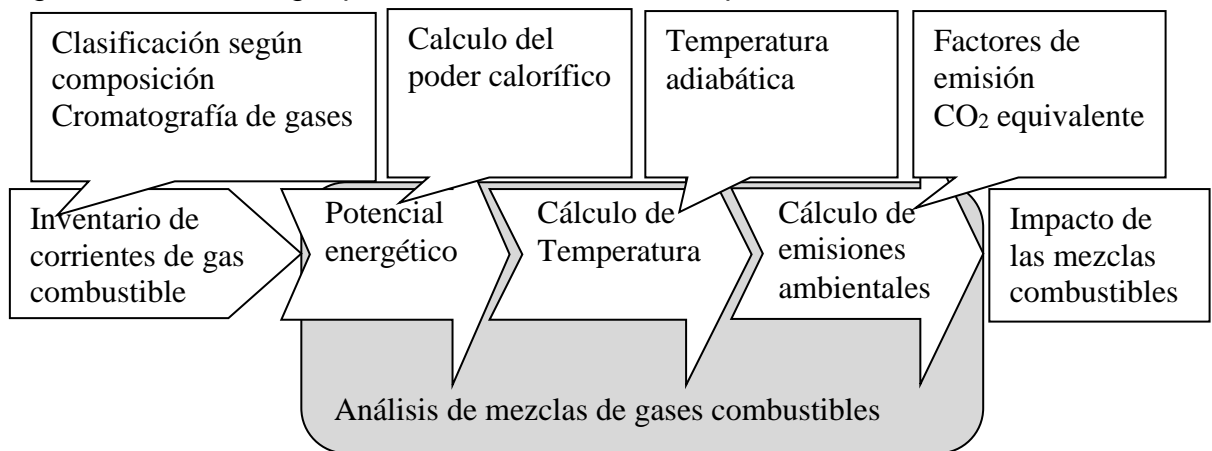
Ecuación 5

Donde HHV (Higher Heating Value) es el poder calorífico superior, la constante 0,00045 corresponde al factor de conversión de Libras a Toneladas y la constante 1020 corresponde al factor de conversión de Ft<sup>3</sup> a Btu.

### 4.3 METODOLOGÍA PARA LA CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN

Para analizar las corrientes de gases que conforman la red de gas combustible se tomó como caso de estudio un horno representativo de una refinería; el análisis se inicia con la revisión del diagrama general del proceso, identificando las corrientes que contribuyen al gas combustibles para los hornos y finalizando con el reporte de las características de mezclas de gas combustible. Los pasos desarrollados en esta etapa se muestran en la figura 17.

Figura 17. Metodología para la caracterización del proceso de combustión.



La revisión de los datos históricos de producción incluye la medición del flujo o carga, registro de presión de entrada y salida, temperatura de entrada, salida y

pared y la medición del poder calorífico. Se tomaron dos años como periodo de análisis de datos históricos, con los datos obtenidos se establecieron mezclas representativas a las que se les evaluó el potencial energético, la temperatura y las emisiones ambientales.

Como criterio de aproximación para establecer las mezclas representativas, se tomó el intervalo de poder calorífico alto de las mezclas entre gas natural y gas de proceso.

Las variables que se tuvieron en cuenta son: Flujos, Temperatura, Presión, Composición Molar y Poder Calorífico para cada una de estas corrientes. Se tomaron los resultados de las cromatografías; los componentes a utilizar son: metano, etano, etileno, propano, propileno, n-butano, i-butano, n-pentano, i-pentano, monóxido de carbono, dióxido de carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, y sulfuro de hidrógeno y se descartaron compuestos que están presentes en las mezclas en un porcentaje menor al 2%.

Se tomaron como punto de partida los reportes del análisis estadístico presentado por Cala y Carreño en sus tesis de maestría en Ingeniería Química y Química Ambiental respectivamente [98, 99], codirigidas durante el periodo de ejecución de esta tesis.

## **4.4 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS**

### **4.4.1. Inventario de corriente de gases aportantes a la red de combustible.**

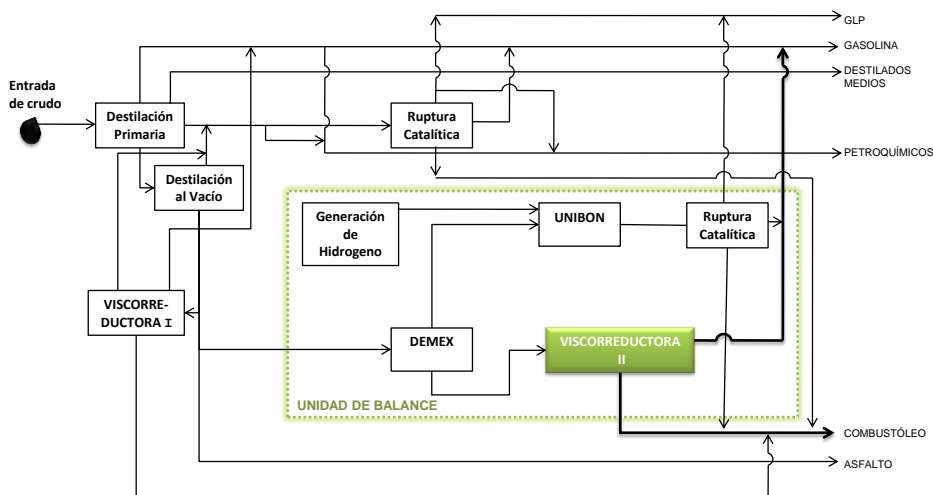
El análisis de las características de las mezclas combustibles considera las cantidades y la calidad de las corrientes que conforman la red de gas combustible, las cuales provienen de los diferentes procesos de la refinería y se mezclan con el gas natural, a continuación se presentan los resultados de la revisión de diagramas de procesos y de la red de gas combustible.

Descripción de la unidad de proceso en donde se realizó el inventario de corrientes aportantes.

La unidad de proceso seleccionada fue la viscorreductora, como parte del proceso de refinación del petróleo en la Gerencia Refinería Barrancabermeja (GRB), puesto que es una operación importante y relativamente económica para reducir el volumen de producción de aceites pesados con el fin de utilizarlos como combustible, disminuyendo la viscosidad y el punto de fluidez de los mismos. En el esquema de flujo general de la GRB, la planta de viscorreducción se encuentra ubicada en la Unidad de Balance.

La planta viscorreductora, basa su operación en el craqueo térmico de un solo paso en dos hornos. Esta fase de operación toma los fondos provenientes de la planta DEMEX y los craquea térmicamente, sin presencia de catalizadores, la figura 18 muestra el esquema del proceso de refinación y la localización de la planta de viscorreducción [55].

Figura 18. Localización de la unidad de Viscorreducción.



Fuente: Ecopetrol S.A

El proceso de Viscorreducción tiene en dos hornos que se caracterizan por ser similares en su configuración y estar conectados en paralelo, los cuales se

muestran en la figura 19; cada horno tiene dos chimeneas con dos serpentines; el proceso de calentamiento se lleva a cabo quemando gas de refinería proveniente de la red de gas.

Figura 19. Hornos de Viscosreducción

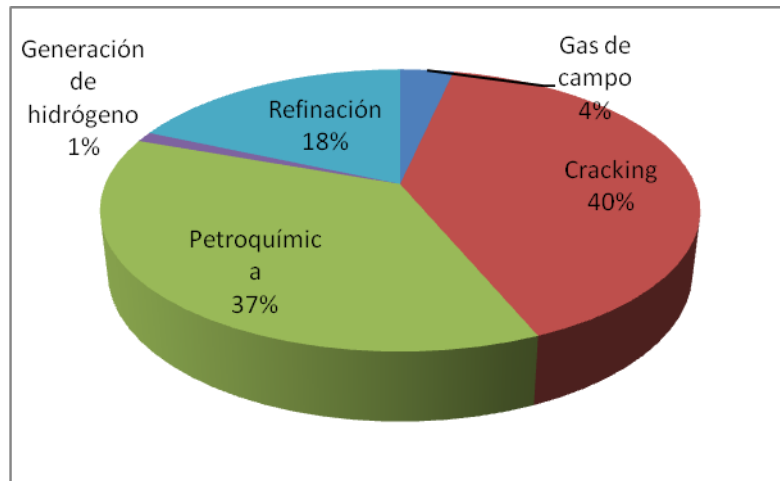


Fuente. Ecopetrol S.A.

Las corrientes de gases que intervienen en los procesos de combustión se encuentran clasificadas según su procedencia en áreas de proceso, por lo que es necesario realizar un inventario con el fin de identificar las corrientes aportantes a la red de gas.

Se identificaron 5 áreas de proceso y un total de 87 corrientes en toda la refinería; se analizaron los flujos de las corrientes que aportan a red de combustibles para determinar su incidencia en el combustible utilizado en hornos; la figura 20, muestra el porcentaje de contribución de las corrientes en cada una de las áreas de proceso. Las áreas que presentan mayor contribución a la red combustible son: cracking y petroquímica, con 40 y 37 % respectivamente.

Figura 20. Porcentaje de contribución de las áreas de una refinería a la red de combustible.



Fuente: ECOPETROL (2011).

Luego de identificar la contribución de las áreas de proceso a la red combustible, se revisaron los datos de cromatografía de gases y se realizó un análisis de la variabilidad de la composición de los gases, comprobándose que la variación no representaba una desviación mayor al 5%, por lo que se consideraron composiciones constantes de las corrientes que aportan a la red de gas combustible utilizado en hornos representativos de la industria del petróleo. El anexo A muestra los datos de variación de la composición de las corrientes.

Los resultados muestran que existen corrientes con componentes de muy alto poder calorífico (Etanos, Propanos y Butanos), o muy bajo poder calorífico, (Hidrógeno, metano) que pueden intervenir en la red de gas combustible. La participación de estas últimas corrientes depende de varios factores:

- De la disponibilidad de gas natural.
- De la estabilidad operacional de las unidades de proceso que generan las corrientes.
- De la estabilidad operacional de las unidades de proceso que reciben las corrientes.

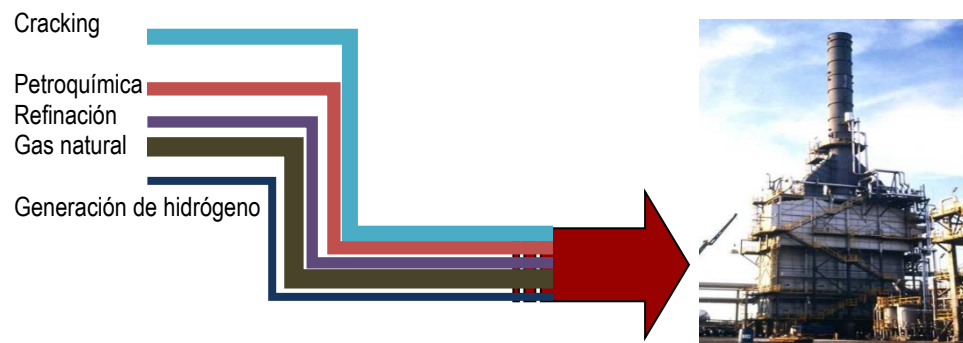
La tabla 7 presenta la composición de las corrientes combustibles típicas provenientes de las distintas áreas de proceso, y la figura 21, el esquema de la red de combustible, según la información obtenida de los diagramas de proceso.

Tabla 7. Composición de las corrientes aportantes a la red de combustible

Componentes	Gas Natural	Gas de Refinación	Gas de petroquímica	Gas de Cracking	Generación de hidrógeno
	Mol %				
Hidrógeno	0,0	0,0	31,80	19,07	78,77
Monóxido de Carbono	0,0	0,0	1,77	1,22	0,00
Metano	98,3	86,17	56,15	30,92	0,32
Etano	0,4	8,70	0,48	10,88	0,0
Propano	0,15	1,15	0,0	7,49	0,0
n-Butano	0,0	0,26	0,0	0,59	0,0
i-Butano	0,03	0,16	0,0	1,62	0,0
n-Pentano	0,0	0,0	0,0	2,04	0,0
i-Pentano	0,018	0,27	0,0	1,20	0,0
Etileno	0,0	2,26	4,57	8,72	0,0
Propileno	0,022	0,0	0,0	12,80	0,0
Dióxido de Carbono	0,0	0,53	0,0	0,0	0,0
Nitrógeno	1,08	0,50	5,23	3,45	20,91
Poder calorífico bajo (kCal/m <sup>3</sup> )	8554,18	9483,30	6396,37	12081,05	2056,39

Fuente: ECOPELROL (2011).

Figura 21. Gases aportantes identificados a partir de la revisión del diagrama general de proceso.



Fuente: ECOPELROL.

Las condiciones del proceso bajo las cuales deberían operar los equipos, de acuerdo al fabricante se muestra en la tabla 8. Estas condiciones se toman como parámetros para la identificar impactos y estabilidad del proceso. Sin embargo, la variación en la composición del gas provoca cambios en el % de exceso de oxígeno, que es considerado una variable sensible en la combustión.

Tabla 8. Condiciones de proceso

Parámetro	Valor
% exceso de O <sub>2</sub>	2 %
Flujo de gas combustible	98,33 kg/h
Calor requerido por proceso	1035825,048 kCal
Presión máxima por quemador	135,137 kPa

Fuente: ECOPETROL

#### 4.4.2. Evaluación de mezclas de gases combustibles

La evaluación de las mezclas combustibles que se generan en la red de gas se basa en las características de cada una de las corrientes provenientes de las diferentes áreas de la planta, para lo cual se hace necesario conocer los porcentajes mínimos y máximos de cada componente que pueden estar presentes en las mezclas.

Según los datos cromatográficos en las corrientes combustibles pueden estar presentes aproximadamente 28 compuestos, pero algunos de esos compuestos se encuentran en porcentajes muy bajos (por debajo del 1%) o se presentan de manera intermitente cuando existen problemas operativos; mediante análisis estadístico con el software Statgraphics Centurion XV.II. se determinaron 8 compuestos representativos de mezclas en la red combustible; las características de estos gases se encuentran en la tabla 9 [101], la cual además incluye los límites de las concentraciones de los 8 compuestos representativos reportados por Cala [100].

Tabla 9. Características de los compuestos representativos de las mezclas

Compuesto	Densidad* @ 25°C	Peso Molecular* [g/gmol]	Poder calorífico inferior* [kCal/m <sup>3</sup> ]	Concentración en las corrientes (mol)**	
				Inferior	Superior
<b>Metano</b>	0,657	16,043	8298,67	0,003	0,9331
<b>Etano</b>	1,240	30,070	14861,35	0,009	0,146
<b>Propano</b>	1,834	44,097	21454,51	0,000	0,43
<b>n-Butano</b>	2,445	58,124	28230,85	0,001	0,1159
<b>Etileno</b>	1,155	28,054	13743,29	0,000	0,1627
<b>Propileno</b>	1,746	42,081	20181,24	0,000	0,151
<b>Sulfuros de Hidrógeno</b>	1,404	34,076	5385,91	0,000	0,043
<b>Hidrógeno</b>	0,082	2,016	2494,83	0,000	0,4402

Fuente: \*H. S. Bell [101]. \*\*Cala [98]

De los compuestos anteriormente mencionados, se debe tener en cuenta que el H<sub>2</sub>S tiene incidencia directa en la corrosión del material por alta temperatura [102, 103]; a pesar de que su concentración es baja y no afecta directamente la eficiencia energética por tener un poder calorífico inferior de 5385,91 kCal/m<sup>3</sup>, la cantidad de H<sub>2</sub>S determina la cantidad de SO<sub>2</sub> emitida al ambiente [104].

El propano y el propileno se encuentran en las mezclas provenientes del área de cracking principalmente y tienen un efecto similar en la eficiencia energética. Las mezclas provenientes del área de petroquímica tienen contenidos de etano y etileno; el hidrógeno proviene principalmente de las corrientes del área de generación de hidrógeno (44 %) y refinación. El butano puede tener hasta 11,59%, pero se encuentra en solo el 15% de las corrientes de todas las áreas.

Los compuestos representativos de las mezclas de gas combustible están de acuerdo a los establecidos por Klimstra y colaboradores, quienes encontraron que en mezclas de gases los compuestos más representativos son el metano, etano y propano, por encontrarse en mayor proporción y en aproximadamente 100 % de los gases intercambiados con el gas natural [105].

Los datos que se utilizaron para el inventario de gases se encuentran en el anexo A. La información anterior permite hacer una clasificación de las corrientes y los compuestos con mayor impacto energético y ambiental en la red combustible.

El análisis estadístico también permitió identificar el intervalo de poder calorífico que tenían las mezclas combustibles entre 7520 kCal/m<sup>3</sup> y 23500,50 kCal/m<sup>3</sup> [98], este intervalo fue el criterio para la selección de los porcentajes de participación de las corrientes aportantes y las combinaciones probables. Se utilizó una herramienta en Excel para calcular el poder calorífico de las mezclas variando la composición de los 8 compuestos seleccionados (ver anexo B). La temperatura adiabática se cálculo de acuerdo a la ecuación 2 y el porcentaje de CO<sub>2</sub> equivalente con la ecuación 4; con los resultados obtenidos se establecieron mezclas representativas que se encuentran en el intervalo de poder calorífico. La tabla 10 muestra las mezclas representativas seleccionadas en el análisis preliminar y el cálculo de las propiedades.

Tabla 10. Mezclas representativas.

Componentes	Gas Natural	Corriente 1 (G1)	Corriente 2 (G2)	Corriente 3 (G3)	Corriente 4 (G4)
	Mol %				
Hidrógeno	0,00	20,00	0,00	10,57	0,00
Metano	98,30	56,25	70,32	36,52	35,32
Etano	1,20	10,64	20,32	17,50	30,00
Propano	0,40	1,65	4,86	12,49	18,67
n-Butano	0,00	3,20	0,00	0,50	0,00
Etileno	0,00	8,26	4,50	9,62	10,34
Propileno	0,10	0,00	0,00	12,80	5,67
Poder Calorífico Inferior (kCal/m <sup>3</sup> )	8704,02	9385,73	10808,63	12917,10	14289,25
Densidad promedio (kg/m <sup>3</sup> )	0,6664	0,714	0,80	1,027	1,15
Peso molecular	16,35	17,53	20,80	25,22	28,21
CO <sub>2</sub> equivalente	6,95	7,49	8,63	10,30	11,40
Eficiencia Térmica (%)	87,26	87,53	87,41	87,66	87,58
Temperatura adiabática (K)	1385,92	1405	1402	1413	1424

Los resultados de poder calorífico y temperatura adiabática concuerdan con los obtenidos por Cala utilizando Aspen Hysys para la simulación de mezclas con

similar composición y poder calorífico [98, 106]. Los efectos de la composición de los combustibles han sido reportados por Montaña [55] en función del índice de Wobbe y los problemas debido a la intercambiabilidad de los gases que conforman la red combustible [9, 10, 13]; en general las variaciones de las propiedades de las mezclas combustibles causan distribución no uniforme en la transferencia de calor y turbulencia en la llama que producen choque directo en los serpentines y éstas son unas de las causas de la producción de coque y el deterioro de los equipos [107, 108].

El impacto en los equipos puede ser significativo, excediendo los límites especificados por en los estándares de diseño de los equipos [89, 109, 110], cuando se trata de mezclas con alto contenido de etano y propano, como la corriente 4 que tiene 30 % de etano y 18,67 % de propano; estas mezclas corresponden a desvios del proceso de cracking y petroquímica a la red de gas combustible, cuando existe poca disponibilidad de gas natural.

Las mezclas con alto poder calorífico presentan temperaturas de llama que favorecen la corrosión a alta temperatura; a temperaturas superiores de 900 °C se presentan el fenómeno de carburización y fenómenos asociados a la sulfidación dependiendo de la atmósfera de gases a la que se encuentre expuesta el material [92, 102]. La máxima temperatura adiabática se registra para mezclas estequiométricas de los gases, por lo que es necesario tener en cuenta el exceso de oxígeno como variable del proceso y una condición operacional que puede ser manipulada cuando se presentan mezclas con alto poder calorífico. En el capítulo 5 se estudia con más detalle la influencia del exceso de oxígeno en la combustión de mezclas.

La presencia de altas temperaturas también favorece la formación de NO<sub>x</sub> térmico, el cual es iniciado por la formación de los radicales libres de Nitrógeno, Oxígeno y CH y aumenta exponencialmente con la temperatura [111, 112]. Al respecto, Rokke y colaboradores, demostraron que la pérdida de energía radiante

durante la combustión disminuye la temperatura de combustión y esto reduce la velocidad de formación de NO [104, 113]; en contraste con lo anterior, para la formación de NO<sub>2</sub>, la reacción ocurre a temperaturas menores, debido a que la reacción ocurre principalmente por la oxidación de NO en presencia del radical HO<sub>2</sub> [104].

El poder calorífico se ve afectado por el porcentaje de hidrógeno en la mezcla, disminuyéndolo, cuando se presentan otros compuestos con alto poder calorífico, como el caso de la mezcla 3 que tienen propano y propileno; a pesar de que se considera favorable para el medio ambiente las mezclas que contienen hidrógeno, por considerarse un combustible limpio, este puede contribuir a fallos de seguridad debido a que el hidrógeno aumenta la velocidad de combustión y se reduce el tiempo de retención del combustible [114, 115], incrementándose los riesgos de explosión e incendios.

Los resultados muestran un incremento del CO<sub>2</sub> equivalente en función del peso molecular y el poder calorífico de la mezcla combustible, por lo que se deben favorecer las mezclas afines al gas natural o con contenidos de hidrógeno que favorezcan la disminución de las emisiones ambientales sin afectar la seguridad del proceso [26, 116, 117].

#### **4.5 CONCLUSIONES**

Las mezclas de gas natural con gases de refinería generalmente no son intercambiables, estas mezclas generan ineficiencias en la combustión, e impacto negativo en la integridad de los equipos. El gas de referencia para el funcionamiento de los equipos es el gas natural por eso la evaluación de las características de las mezclas que conforman la red combustible permite encontrar intervalos de composición para las mezclas y predecir los impactos que se generan.

La red combustible está conformada por los gases de proceso que se mezclan con el gas natural y son utilizados en hornos y calderas para calentamiento, procesamiento de materiales y la energía del proceso.

Para el caso analizado se identificaron 8 áreas, con una mayor contribución de flujo procedente de cracking y petroquímica con 40% y 37% respectivamente y aunque en las corrientes combustibles existen en promedio 28 compuestos, se descartaron los compuestos que se encuentran en porcentajes muy bajos (frecuencia por debajo del 1%) o se presentan de manera intermitente cuando existen problemas operativos; de esta manera, al analizar la variación promedio de los compuestos presentes en los gases combustibles en las áreas estudiadas se identificaron composiciones constantes de las corrientes aportantes a la red combustible, debido a que no presentan variación mayor al 5% de desviación.

Las corrientes provenientes de cracking y petroquímica aportan compuestos ricos en etano (30 %mol), propano (18,67 %mol), etileno (8,72 %mol) y propileno (12,80 %mol); las corrientes de refinación aportan mezclas con alto nivel etano (8,70 %mol) y el hidrógeno está presente principalmente en corrientes del área de generación de hidrógeno y petroquímica (78,77 %mol). Igualmente de los compuestos analizados en las corrientes, se identificó presencia de H<sub>2</sub>S con bajas concentraciones (entre 0,000 y 0,043 %mol) y un bajo aporte a la eficiencia energética (PCI = 5385,91 kCal/m<sup>3</sup>), por lo que no se considera este compuesto en posteriores análisis de las mezclas combustibles.

## 5. MODELO PARA EL PROCESO DE COMBUSTIÓN

### 5.1 INTRODUCCIÓN

Para estudiar el proceso de combustión las propiedades termoquímicas incluyen la energía interna, la entalpía y los cambios de entropía; la Primera Ley de la Termodinámica, en la forma de la ecuación de flujo constante de energía (en ausencia de trabajo, energía cinética, y términos de energía potencial) puede aplicarse al quemador con el fin de determinar la magnitud de la transferencia de calor.

Complementando los aspectos energéticos, el estudio de la reacción de combustión incluye la cinética química y la teoría de los gases, en ese sentido, en la zona inmediatamente después de la llama, los productos de combustión están en equilibrio químico o muy cercanos al equilibrio, por lo que se pueden desarrollar métodos de cálculo para la temperatura adiabática de llama y la composición de los productos de combustión. De acuerdo a la segunda ley de la termodinámica, para temperatura y presión constante, el equilibrio se refiere al valor mínimo de la Función de Gibbs ( $G_F$ ) para la mezcla [30].

Adicionalmente, se deben considerar las restricciones del proceso en cuanto a la selección del coeficiente de exceso de aire suministrado al horno, ya que al reducirse este, disminuye la corrosión de las superficies de calentamiento, tanto de alta temperatura (por vanadio) como de baja temperatura (por azufre), se reducen las incrustaciones en los sobrecalentadores, así como la emisión de contaminantes ( $\text{NO}_x$  y  $\text{SO}_2$ ) de acuerdo a la composición de combustible y los materiales de los equipos de combustión [3, 26].

De acuerdo a lo expuesto anteriormente, se evaluó la eficiencia energética de la combustión de mezclas de composición variable utilizando simulación computacional y validando el modelo mediante pruebas experimentales a escala de laboratorio y confrontando los datos con los reportados en monitoreos

industriales de una refinería de petróleo. Las pruebas experimentales fueron desarrolladas en el Centro de Innovación Energética de la Universidad Técnica Federico Santa María (Chile) con el apoyo del grupo de Combustión en Medios Porosos durante la pasantía doctoral supervisada por el Doctor Mario Toledo.

Los resultados fueron publicados en: J. Saavedra, O. Cala, V. Kafarov, L. Meriño, Evaluation of combustion models for efficiency of refinery furnaces, Revista Ingenierías Universidad de Medellín. Vol. 12. Número 23, 2014. A2 en Publindex.

## **5.2 FUNDAMENTO TEÓRICO**

Si se considera la combustión como un flujo químicamente reaccionando, el sistema en cada punto en el espacio y tiempo está completamente descrito especificando la presión, densidad, temperatura, flujo y concentración de cada especie. Estas propiedades pueden estar cambiando en el espacio y tiempo, estos cambios se describen matemáticamente con las ecuaciones de cambio que representan los fenómenos de transporte en cada una de las situaciones (transporte de masa, momentum o energía) [30].

La evaluación de la eficiencia y las emisiones ambientales incluye el estudio de parámetros termodinámicos, cinéticos de transporte, estos aspectos han sido estudiados de manera teórico, computacional y experimentalmente por autores como Miller, Kee, Poinot entre otros [93, 118, 119].

Debido a que el 95 % de los gases utilizados para combustión en plantas químicas y petroquímicas son hidrocarburos ligeros, tales como el gas natural, propano, etano, butano, se han desarrollado numerosos estudios que describen el comportamiento de estos gases, verificando la química de combustión y la formación de contaminantes ambientales [120].

Los mecanismos de reacción y los parámetros termodinámicos pueden presentar aspectos complejos de acuerdo a las características de los combustibles estudiados, por lo que se han planteado mecanismos de reacción reducidos para

explicar la formación de especies intermedias de la reacción de combustión y para determinar los perfiles de velocidad, temperatura y concentración y calcular los parámetros y propiedades del proceso de combustión se han desarrollado programas computacionales con precisión aceptable que luego deben ser validados mediante técnicas experimentales [93, 121].

De igual manera se ha hecho énfasis en la simulación de las características de la llama y en la predicción de los impactos ambientales causados [30, 122, 123]. Para combustibles gaseosos la composición se especifica normalmente, en porcentaje volumétrico de los diferentes gases que lo componen, y el poder calorífico está en función de esa composición y del poder calorífico de cada componente.

Los estudios desarrollados para hidrocarburos ligeros en régimen laminar y premezcla analizan la temperatura adiabática de llama, la velocidad de llama y los mecanismos cinéticos como parte esencial para describir la combustión. En este sentido, la velocidad de llama es una propiedad fundamental de la mezcla combustible – aire, que tiene en cuenta la difusividad, exotermicidad y reactividad de los componentes de la mezcla [120].

En las llamas de premezcla, los reactantes se encuentran mezclados antes del comienzo de la combustión. La cantidad de combustible disponible en la mezcla se define con la relación de equivalencia definida en la ecuación 6

$$\phi = \frac{\left( \frac{m_f}{m_{O_2}} \right)}{\left( \frac{m_f}{m_{O_2}} \right)_{est}}$$

Ecuación 6

Donde  $m_f$  es la masa de combustible y  $m_{O_2}$  es la masa de oxígeno que interviene en la reacción y la cantidad estequiométrica de oxidante necesaria para la combustión completa de todo el combustible disponible viene dada por:

$$\left( \frac{m_f}{m_{O_2}} \right)_{est}$$

Ecuación 7

Si la razón de equivalencia es igual a uno, entonces la reacción es estequiométrica [124].

Las llamas de premezcla sólo tienen lugar para unas relaciones combustible-oxidante determinadas. Los límites inferior y superior de inflamabilidad marcan los valores de relación de equivalencia válidos para que se produzca la combustión. Por debajo del límite inferior de inflamabilidad y por encima del límite superior no se produce combustión. La velocidad laminar de las llamas de premezcla se define como la velocidad de avance de los gases frescos hacia la llama [125].

El modelo para describir la combustión de hidrocarburos es presentado por Miller y coautores [25, 120] y las ecuaciones de su modelo son la base de programas ampliamente usados para simulación de procesos de combustión, como CHEMKIN, con el que se puede modelar la llama, la velocidad del frente de llama y predecir la concentración de los gases de combustión.

El modelo de temperatura de llama consiste en calcular el equilibrio químico utilizando el modelo de reactor en equilibrio y el estado químico de la mezcla es determinado bajo condiciones de equilibrio, por lo que el modelo requiere datos para cada especie en cada fase.

El modelo en equilibrio asume que la fase gaseosa es una mezcla de gas ideal y que la fase condensada es una solución ideal, para mayor precisión de los cálculos es importante incluir todas las especies radicales e intermedias que puedan intervenir en las reacciones.

La ecuación de estado del modelo presentado por Kee [118] es:

$$\rho = \frac{P\bar{W}}{RT}$$

Ecuación 8

La ecuación de continuidad está dada por:

$$\frac{\partial(\dot{M})}{\partial x} = \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0$$

Ecuación 9

La ecuación 10 muestra la ecuación de energía para el modelo presentado por Kee:

$$\dot{M} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left( \lambda A \frac{dT}{dx} \right) + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^k \rho Y_k V_k c_{pk} \frac{dT}{dx} + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^k \dot{\omega}_k h_k W_k = 0$$

Ecuación 10

La ecuación 11 representa la ecuación de la conservación de las especies dada por Kee:

$$\rho v \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) = \dot{\omega}_k W_k$$

Ecuación 11

Donde en las ecuaciones de la (8) a la (11):

x es la coordenada espacial

$\dot{M}$  representa el flujo másico, el cual depende de x

T es la temperatura

$Y_k$  la fracción másica de kth especie,

P es la presión

v es la velocidad de la mezcla de fluido

$\rho$  es la densidad

$W_k$  es el peso molecular de las kth especies

$\bar{W}$  peso molecular promedio de la mezcla

R es la constante universal de los gases

$\lambda$  conductividad térmica de la mezcla

$C_p$  la capacidad calorífica a presión constante de la mezcla,  $C_{pk}$  capacidad calorífica de las kth especies,

$\dot{\omega}_k$  velocidad molar de producción por reacción química de las kth especies por unidad de volumen,

$h_k$  entalpía específica de las kth especies,

$V_k$  la velocidad de difusión de las kth especies

A es el área transversal del tubo de corriente que abarca la llama.

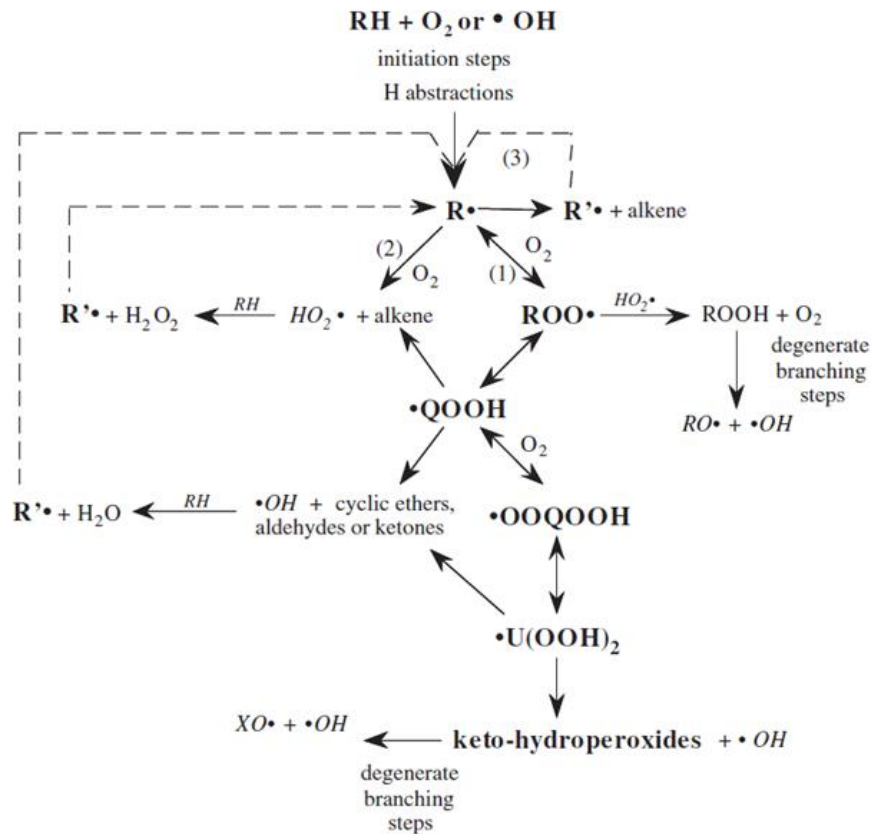
Adicionalmente se deben considerar la velocidad de reacción química y las propiedades de transporte [120]. Con respecto a la reducción de los mecanismos cinéticos, el objetivo es desarrollar un conjunto ideal de datos termodinámicos y un mecanismo cinético de reacción que describa todos los detalles de la combustión; Simmie en 2003 [126], propone una breve explicación de los pasos que siguen estos estudios:

1. Definir un modelo de reacción consistente en un conjunto completo de reacciones elementales.
2. Asignar valores a las constantes de velocidad para cada reacción a partir de datos de literatura o por estimaciones. Evaluar los parámetros termodinámicos requeridos para calcular las constantes de velocidad de equilibrio directa e inversa.
3. Llevar a cabo y/o encontrar en la literatura experimentos fiables para la evaluación de parámetros de velocidad y de transporte en el modelo.
4. Usar aplicaciones computacionales para resolver las reacciones del mecanismo cinético y ecuaciones de transporte, bajo condiciones comparables con datos experimentales. También aplicar un análisis de sensibilidad.
5. Comparar con datos experimentales y determinar los mayores impactos y plantear optimización para el modelo.

Los pasos descritos anteriormente se han basado en estudios que datan desde 1967, cuando investigadores como Knox en 1967 [127], Fish en 1968 [128] y posteriormente Pollard, Cox y Walker [129, 130, 131], plantean esquemas para el

entendimiento de los mecanismos de reacción que suceden en la oxidación de alcanos; Battin- Leclercen en 2007 [132], presenta un esquema simplificado para los mecanismos primarios de oxidación de alcanos, partiendo del alcano denominado RH (figura 22).

Figura 22. Esquema simplificado del mecanismo de oxidación de alcanos.



Fuente: Battin- Leclercen en 2007 [132]

De acuerdo a lo expuesto anteriormente, Lou en 2012 presentó un mecanismo de cinética química reducida para la combustión de hidrocarburos livianos basado en el análisis de sensibilidad [120], combinando el mecanismo GRI-3.0 presentado por Smith [133] (basado en el GRI- MECH de Warnatz [30]) y el USC presentado por Wang and Laskin [134]; la tabla 11 muestra las especies para el mecanismo completo y el mecanismo reducido de Lou [120], demostrando de esta manera la

importancia de considerar un mecanismo adecuado para la simulación del proceso de combustión.

Tabla 11. Lista de especies para mecanismos de cinética química.

Mechanism	No. of species	Species list
Full mechanism	93	H <sub>2</sub> , H, O, O <sub>2</sub> , OH, H <sub>2</sub> O, HO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , C, CH, CH <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub> <sup>*</sup> , CH <sub>3</sub> , CH <sub>4</sub> , CO, CO <sub>2</sub> , HCO, CH <sub>2</sub> O, CH <sub>2</sub> OH, CH <sub>3</sub> O, CH <sub>3</sub> OH, C <sub>2</sub> H, C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> CC, C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , HCCO, CH <sub>2</sub> CO, HCCOH, C <sub>2</sub> O, CH <sub>2</sub> CHO, CH <sub>3</sub> CHO, CH <sub>3</sub> CO, C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> , pC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , aC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , cC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , aC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> , CH <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> CHCH, C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> CHO, C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , nC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , iC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , C <sub>4</sub> H, C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> C <sub>4</sub> O, n-C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> , i-C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> , n-C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> , i-C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> 12, C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> 1, C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> , l-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> , c-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> , A <sub>1</sub> , A <sub>1</sub> <sup>-</sup> , C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O, C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH, C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O, C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> OH, C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O, N, NH, NH <sub>2</sub> , NH <sub>3</sub> , NNH, NO, NO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> O, HNO, CN, HCN, H <sub>2</sub> CN, HCNN, HCNO, HOCN, HNCO, NCO, AR, N <sub>2</sub>
Reduced mechanism	50	H <sub>2</sub> , H, O, O <sub>2</sub> , OH, H <sub>2</sub> O, HO <sub>2</sub> , CH, CH <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub> <sup>*</sup> , CH <sub>3</sub> , CH <sub>4</sub> , CO, CO <sub>2</sub> , HCO, CH <sub>2</sub> O, CH <sub>2</sub> OH, CH <sub>3</sub> O, C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> CC, C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , HCCO, CH <sub>2</sub> CO, CH <sub>2</sub> CHO, CH <sub>3</sub> CHO, C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> , pC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , aC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , aC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> , n-C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> , i-C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> , N, NH, NH <sub>2</sub> , NO, N <sub>2</sub> O, HNO, CN, HCN, HNCO, NCO, AR, N <sub>2</sub>

Fuente: Lou H. [120]

Las cinética de las reacciones elementales proporciona información acerca de la distribución de los productos de reacción y los parámetros termodinámicos de los radicales libres [118], por lo que la literatura reporta numerosas herramientas computacionales basados en los mecanismos de reacción cinética descritos anteriormente, Chemkin es formato de entrada de datos, probablemente el más utilizado para describir las reacciones, los parámetros de velocidad y propiedades de transporte de las especies [132]; tal es el caso de PREMIX, que fue desarrollado para combustión en llama libre, premezclado en estado estable y en equilibrio, el programa se ejecuta conjuntamente con Chemkin en fase gaseosa y

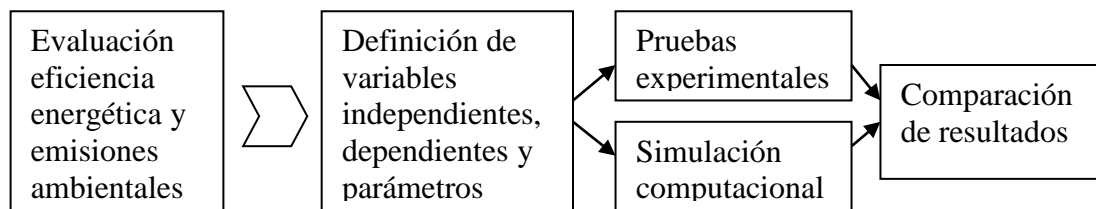
los paquetes termodinámicos y de cálculo de las propiedades de transporte [135, 136].

En 2009, Toledo y colaboradores publican una modificación al PREMIX para la combustión en medios porosos, estudiando numérica y experimentalmente los procesos de oxidación parcial de metano, etano y propano, en un intervalo de relación de equivalencia entre el estequiométrico ( $\varphi = 1.0$ ) hasta ( $\varphi=2.5$ ); los resultados obtenidos numérica y experimentalmente muestra el mismo comportamiento por lo que se considera que el modelo utilizado describe la combustión en medios porosos [137].

### 5.3 METODOLOGÍA

La evaluación de la eficiencia energética y las emisiones ambientales de las mezclas combustibles se realizó mediante el análisis de datos obtenidos de pruebas experimentales y simulación computacional, para lo cual se analizaron las variables del proceso y los resultados obtenidos en los equipos experimentales y herramientas computacionales. La figura 23 muestra el esquema de la metodología seguida para la evaluación de la eficiencia energética y las emisiones ambientales.

Figura 23. Esquema de la metodología para la evaluación de la eficiencia energética y las emisiones ambientales.



#### 5.3.1 Definición de variables dependientes e independientes.

Las pruebas experimentales y la simulación computacional consideran la interacción de las variables que describen el comportamiento de las mezclas de

gases combustibles que tienen composición variable, por lo que se estudió el efecto de la composición de la mezcla sobre los productos de la reacción de combustión.

La evaluación de la eficiencia energética se realiza mediante el análisis de los datos de la temperatura y la velocidad del frente de llama producto de la variación de la composición de la mezcla combustible; las emisiones ambientales se evalúan analizando el porcentaje de CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>O. La tabla 12 muestra las variables y los parámetros definidos para este estudio, las mezclas analizadas tienen poder calorífico entre 7990 kCal/m<sup>3</sup> y 16920 kCal/m<sup>3</sup> de acuerdo a datos de la evaluación preliminar realizada en el capítulo 4.

Tabla 12. Variables identificadas para el estudio

Variables independientes	Variables dependientes	Parámetros
Composición de la mezcla de gas Metano= 55, 70, 92,5 % mol Relación de equivalencia Phi = 0,8, 1.0, 1,4, 1,8	Temperatura Velocidad del frente de llama Composición de productos de combustión (CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> y H <sub>2</sub> O)	Flujo Presión Tipo de reactor

### 5.3.2 Diseño de experimentos.

Los modelos de diseño de experimentos tienen por objetivo determinar la influencia que tienen los factores en una variable de interés así como cuantificar dicha influencia; es así como la aplicación de esta técnica permite estudiar la variación de las condiciones habituales de realización de un proceso empírico para aumentar la probabilidad de detectar cambios significativos en la respuesta [138]; en este caso, la variabilidad y los cambios que se producen cuando se cambia la composición de las mezclas combustibles en función de la cantidad de aire empleada.

Siendo los factores: **Tipos de mezcla y Relación de equivalencia** con tres y cuatro niveles respectivamente, se aplicó un diseño factorial de experimentos, en el cual se investigan todas las combinaciones posibles de estos y donde los efectos (o resultados experimentales) representan el cambio en la respuesta producido por la variación en el nivel del factor en cada ensayo del experimento [139].

Con el objeto de evaluar los efectos de estos dos factores en el análisis del proceso de combustión, se obtuvo un diseño experimental con 12 pruebas, resultado de la combinación de tres (3) niveles en el tipo de mezcla y cuatro (4) niveles en la relación de equivalencia. La tabla 13 muestra el resumen de las pruebas realizadas.

Con base en las restricciones del laboratorio para la realización de las pruebas, el diseño experimental se realizó sin replicas para los factores analizados. Para la evaluación de resultados se realizó un análisis de varianza (ANOVA) de dos factores con  $k_{ij} = 1$  utilizando la caja de herramientas del programa MATLAB.

Tabla 13. Número de experimentos.

VARIABLES		RELACIÓN DE EQUIVALENCIA ( $\Phi$ ) Niveles				Número de experimentos
MEZCLAS (Porcentaje de metano en el combustible)	Niveles	0,8	1,0	1,4	1,8	
	55	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	4
	70	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>	4
	92,5	<b>9</b>	<b>10</b>	<b>11</b>	<b>12</b>	4
Total	12					12

### 5.3.3 Equipo para evaluación experimental

Experimentalmente se requieren condiciones controladas bajo las cuales se puedan estudiar de manera confiable la interacción de las variables, lo cual no es posible a escala industrial. El reactor de medio poroso fue seleccionado como sistema de reacción para la realización de las pruebas experimentales debido a que ofrece ventajas en el control del frente de llama, estabilidad y estandarización

en su funcionamiento y manejo de variables para representar sistemas de combustión con premezcla de combustible y aire.

El reactor para combustión en medios porosos permite obtener información de las temperaturas, el avance del frente de llama y los productos de la combustión en función de los cambios que se producen modificando el exceso de oxígeno, mediante una cinética intrínseca en la que la reacción química controla la velocidad global del proceso. En los reactores de medio poroso se puede simular una aproximación de un sistema en régimen transitorio que implica un frente llama que representa una llama libre de combustión inestable propagándose (*downstream or upstream*) en el medio poroso, lo cual permite analizar el efecto del exceso de oxígeno [134].

Las pruebas experimentales se realizaron en un reactor de cuarzo de 36,2 cm de longitud y 4,6 cm de diámetro externo, el cual en la parte inferior presenta un sistema de inyección de combustible - aire, tiene acoplado un sistema de registro de temperatura y toma de muestras de los gases de combustión.

Procedimiento experimental:

El reactor fue empacado con esferas de alúmina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) de 5,5 mm de diámetro obteniendo una porosidad de 40%; las pérdidas de calor al exterior fueron minimizadas con un recubrimiento de fibra de vidrio de 2 mm de espesor y en la parte central se coloca un soporte cerámico a través del cual se hacen pasar 6 termopares tipo S (Platinum-Rhodium, Omega) a lo largo del reactor.

Para la realización de las pruebas experimentales se utilizó el flujo de 8 l/min y velocidad de filtración de 22 cm/s con porosidad del 40 %. Basado en los estudios de la cinética de la combustión del gas natural sobre CaOMgO realizados por Gómez y colaboradores, que determinaron que para garantizar la eliminación de las limitaciones difusionales la velocidad de flujo mínimo es 2 l/min para partículas de diámetros menores de 2.18 mm, con el fin de cumplir con el criterio del

coeficiente de Weisz-Prater mucho menor que la unidad ( $C_{WP} < 0,3$ ) [140, 141]. De igual manera para combustión de gas natural sobre partículas de alúmina ( $Al_2O_3$ ) con la configuración y condiciones operacionales utilizadas en el presente estudio, Araya y colaboradores estudiaron la combustión de gas natural para un intervalo de relación de equivalencia entre 1,4 y 3,0, para velocidades de flujo a través del medio poroso (velocidad de filtración) entre 16 25 cm/s; los investigadores determinaron que los efectos difusionales son insignificantes para flujos de 8 l/min que corresponde a valores de velocidad de filtración cercanos a 23 cm/s [142].

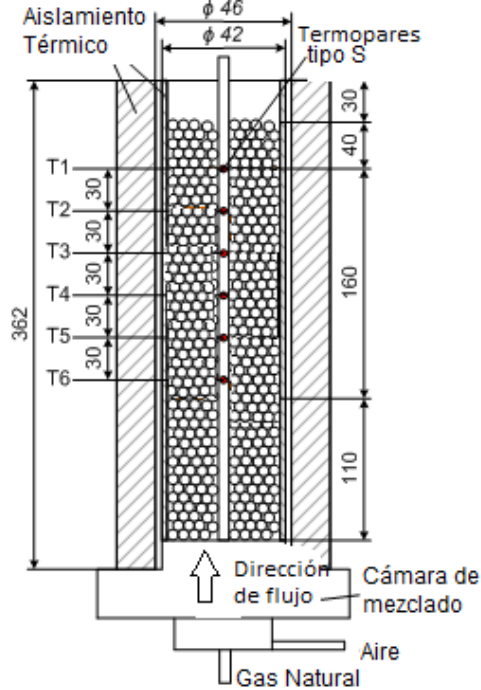
El primer termopar se coloca a 70 mm de la parte superior del reactor y los cinco termopares restantes se colocan a una distancia de 30 mm entre cada termopar, quedando el último a 110 mm del fondo del reactor. Los termopares fueron conectados a un sistema de adquisición de datos DAQ 54 y con la aplicación de DaqView se realizó el seguimiento a la reacción de combustión y registrando las temperaturas se obtuvo el perfil.

El aire fue suministrado por un compresor de aire (Qualitas) y regulado con un controlador de flujo (Aalborg), al igual que el flujo de combustible utilizado, los cuales se mezclan en la cámara de mezclado en la parte inferior del reactor. El esquema del sistema de reacción se muestra en la figura 24, todas las medidas se encuentran en milímetros.

Los productos de combustión se obtuvieron a través de un tubo colocado dentro del reactor a 13 cm de la parte superior del reactor, coincidiendo con la posición del segundo termopar.

Las concentraciones de  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $CH_4$  fueron cuantificadas por cromatografía de gases en un equipo Perkin Elmer GC, Model Clarus 580 (detector TCD, equipado con una columna empacada: Molecular Sieve S.A, 1m x 1/8 pulgadas de diámetro externo - Supelco), utilizando Helio como gas de arrastre.

Figura 24. Esquema del equipo de reacción.



Los valores de la temperatura de combustión corresponden a los promedios de las temperaturas máximas indicadas en cada punto de medición (ver figura 24: T1, T2, T3, T4, T5 y T6), y las velocidades de propagación de llama se calculan a través del tiempo ( $t$ ) que toma en avanzar la temperatura máxima entre termocuplas, que se encuentran a 3 cm de distancia ( $d$ ), es decir,  $v = d/t$ .

#### 5.3.4 Evaluación computacional de la combustión de mezclas de gases.

La evaluación computacional de las mezclas fue realizada utilizando el software PREMIX según el modelo matemático reportado por Toledo [137] para combustión en medios porosos, el cual describe un sistema isobárico, estacionario y unidireccional, en el que la fase gas y el sólido interactúan por la dinámica de fluidos y la transferencia de calor, limitado a un régimen de bajas velocidades de propagación de llama, el anexo C muestra las condiciones de operación y entrada de datos para la simulación.

El modelo muestra las ecuaciones de continuidad, energía y conservación de las especies y utiliza GRI-MECH3.0 para el mecanismo de reacción [132], el anexo D muestra los parámetros y ecuaciones cinéticas utilizadas para la simulación.

Para los cálculos de la composición de las mezclas a simular se calcula primero el aire estequiométrico según la ecuación 12.

$$A_0 = \frac{1}{0,21} (2CH_4 + 3,5C_2H_6 + 5C_3H_8 + 6,5C_4H_{10} + 3C_2H_4 + 4,5C_3H_6 + 0,5H_2) \text{ Ecuación 12}$$

Donde, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> y H<sub>2</sub>, son la fracción molar de cada compuesto en el gas combustible [98]. Una vez calculado el aire estequiométrico, se calcula la masa total de la mezcla y se determinan las fracciones de cada componente, incluyendo el nitrógeno; estos valores y los valores aproximados para los productos de combustión, son la entrada al programa.

## 5.4 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

### 5.4.1 Emisiones generadas en la combustión de las mezclas representativas.

Con el fin de evaluar la combustión del gas natural de manera experimental y mediante simulación, se estableció la composición del gas natural de Chile y se comparó con la composición de un gas natural de composición similar de Colombia (gas de pozo). La tabla 14 muestra la composición de los gases comparados y su respectivo poder calorífico, encontrándose similitud en sus características.

Tabla 14: Composición Gas natural

Componentes(% mol)	Gas Natural Chile	Gas Natural Colombia
Hidrógeno	0	0
Monóxido de Carbono	0	0
Metano	92,569	92,7
Etano	3,551	5,15
Propano	1,3	0,74
n-Butano	0	0
i-Butano	0	0

Sulfuros de Hidrógeno	0,0000	0,0000
Dióxido de Carbono	0,97	1,41
Nitrógeno	1,61	0
Oxígeno	0	0
Dióxido de Azufre	0	0
Vapor de agua	0	0
Total	100	100
LHV kCal/m <sup>3</sup>	8963,47	8879,99
HHV kCal/m <sup>3</sup>	9891,07	9799,93

Fuente: Composición suministrada por Ecopetrol en Colombia y Gas Valpo en Chile.

Se analizaron los productos de la combustión, la temperatura y las velocidades de propagación de llama en un intervalo de relación de equivalencia de 0,8 a 1,8. Los datos obtenidos de la simulación en PREMIX para los productos de combustión del gas natural de Chile en porcentaje en volumen se muestran en la tabla 15.

Tabla 15. Resultados de la simulación en PREMIX de Gas Natural Chile

$\Phi$	% CO <sub>2</sub>	% H <sub>2</sub> O	% H <sub>2</sub>	% CO
0,8	7,73	14,9	0,629	2,04
1	9,48	18,2	1,13E-02	2,53
1,4	5,51	17,5	5,96	7,23
1,8	3,48	16,6	1,08	9,5

Los resultados de las pruebas experimentales para el porcentaje de CO<sub>2</sub> generado fueron cuantificados por cromatografía de gases y se muestran en la tabla 16 para los valores de relación de equivalencia (0,8, 1,0, 1,4 y 1,8).

Tabla 16. Valores de CO<sub>2</sub> generado en las pruebas experimentales

Mezcla % Metano	Relación de Equivalencia ( $\phi$ )			
	0,8	1	1,4	1,8
92,5	6,9274	6,345	3,05	1,17
70	8,304	6,98	3,3898	3,4307
55	7,8209	6,55	9,766	12,35

Se aplicó el método factorial de diseño de experimentos para el análisis de los datos de la tabla 17 utilizando la función ANOVA2 de Matlab. La tabla 17 muestra los valores P y F para los datos experimentales.

Tabla 17. Tabla ANOVA para porcentaje de CO<sub>2</sub>.

ANOVA Table					
Source	SS	df	MS	F	Prob>F
Columns	9.731	3	3.2436	0.38	0.7684
Rows	49.076	2	24.5382	2.91	0.1309
Error	50.62	6	8.4367		
Total	109.427	11			

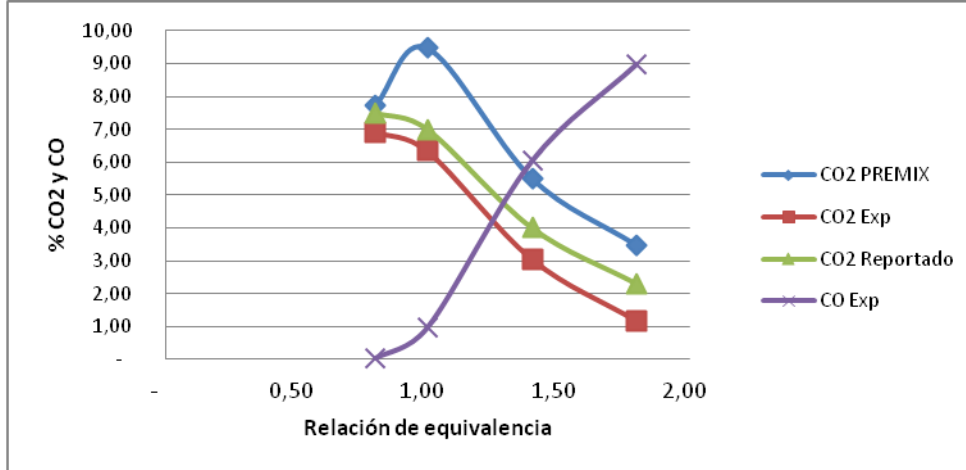
Fuente: Resultados de Matlab.

Para un nivel de significancia  $\alpha=0,05$  los valores mostrados en la tabla 17 indican que para las 3 mezclas y las 4 relaciones de equivalencia ( $\phi$ ), no hay evidencia de que las emisiones de CO<sub>2</sub> están directamente afectadas por el exceso de oxígeno (P-value =0,7684), las emisiones presentan una relación mínima con la mezcla a un valor crítico de  $0,1309 < 2,91$ .

Las figuras 24 y 25 muestran la composición de los productos de combustión obtenidas para la mezcla gas natural – aire en función de la relación de equivalencia; en las mezclas con valores de  $\phi < 1.0$  se puede obtener combustión completa debido a la presencia de exceso de aire y en las mezclas con valores de  $\phi > 1.0$  se presenta mayor porcentaje de CO debido a la oxidación parcial.

En la figura 25 se observa que el porcentaje de CO<sub>2</sub> generado muestra la tendencia a disminuir a medida que aumenta la relación de equivalencia y la mezcla se hace rica en combustible, lo cual está de acuerdo con los datos reportados por Toledo y colaboradores en 2014 [142, 143] para la combustión de metano en medios porosos. El porcentaje de CO en los productos de combustión muestra un comportamiento contrario, aumentando en función de la relación de equivalencia, en concordancia con las reacciones de oxidación parcial que ocurren.

Figura 25. Emisiones de CO y CO<sub>2</sub> en función de la relación de equivalencia.



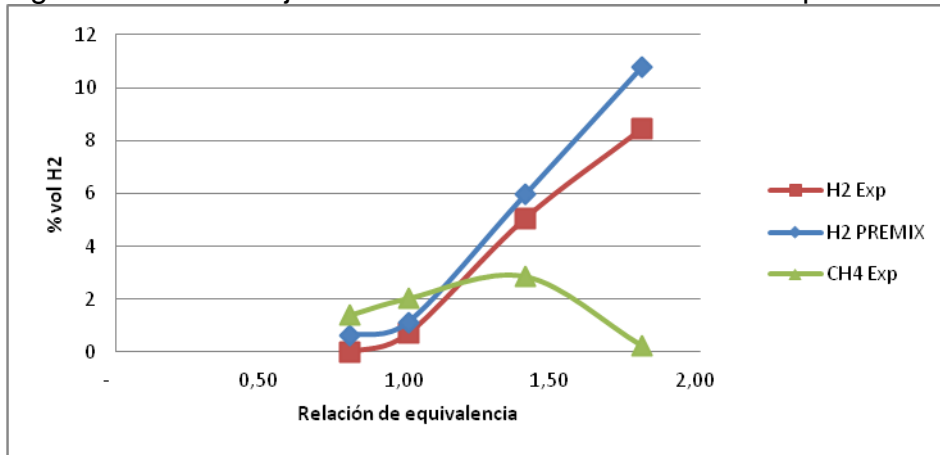
Los valores reportados en la literatura para el porcentaje de CO<sub>2</sub> en medios porosos, para un intervalo de relación de equivalencia entre 0,8 y 1,8 están entre 7,5 y 2,3 % en volumen, mostrando una tendencia similar a la encontrada en las pruebas experimentales realizadas. La figura 25 también muestra que los porcentaje de CO<sub>2</sub> obtenidos en la simulación con PREMIX siguen la misma tendencia que los obtenidos experimentalmente, en función de la relación de equivalencia.

Para establecer la variación del porcentaje de CO<sub>2</sub> experimental con respecto a los valores obtenidos por la simulación se realizó la prueba t, de acuerdo a lo planteado por Levin y Rubin [144]; el análisis estadístico de los resultados muestra una correlación de 96,8% en la comparación de los datos experimentales frente a la simulación y la prueba t, a un nivel de significancia de 0,05 ( $t=-7,79$ ), lo cual permite concluir que hay evidencia estadística suficiente para concluir que hay una relación importante entre las variables por lo que el modelo resulta adecuado al problema de estudio. El análisis estadístico se presenta en el anexo E.

En los estudios de combustión en medios porosos uno de los objetivos principales es la producción de hidrógeno, por lo que se reporta el porcentaje de hidrógeno en

función de la relación de equivalencia; los resultados del porcentaje de hidrógeno en función de la relación de equivalencia se muestran en la figura 26.

Figura 26: Porcentaje de H<sub>2</sub> en función de relación de equivalencia.



En la figura se observa que para valores de relación de equivalencia menores de 1 ( $\phi < 1.0$ , estequiométrico) no hay producción de hidrógeno, pero para  $\phi > 1.0$  aumenta considerablemente el porcentaje de hidrógeno presente en los productos de la combustión; existen valores reportados para la combustión en medios porosos que superan el 14 % mol de hidrógeno para  $\phi = 1.8$  para la combustión del gas natural y vapor de agua, con lo cual se demuestra la importancia de la producción de hidrógeno en sistemas con medios porosos híbridos [145].

Los valores experimentales para el porcentaje de hidrógeno se muestran en la figura 26 y concuerdan con los valores obtenidos por simulación en PREMIX, con un coeficiente de correlación de 98,8%, a un nivel de significancia de 0,05%, como se muestra en el anexo E.

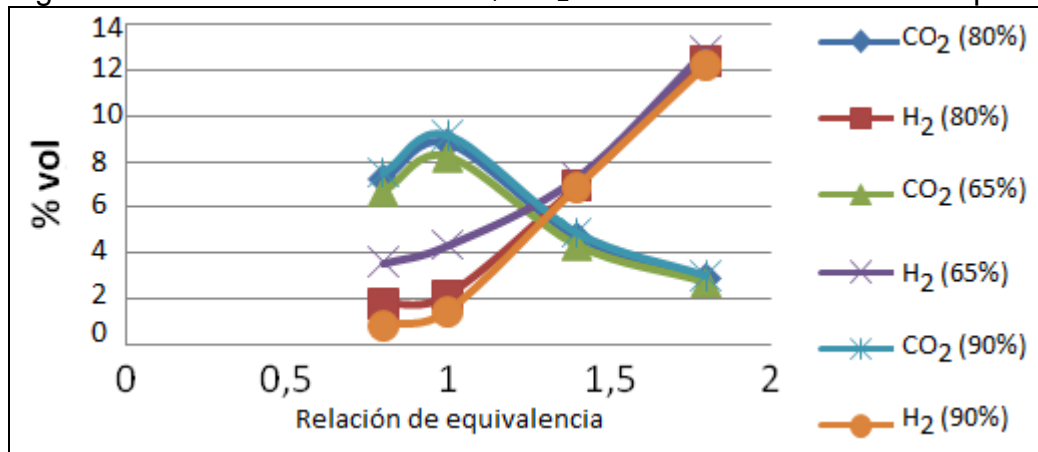
➤ Efecto del hidrógeno en la mezcla combustible.

Para analizar el efecto del hidrógeno en la mezcla de gas combustible con el gas natural, se realizó la simulación en PREMIX variando la relación de equivalencia, ( $\phi = 0.8, 1.0, 1.4, 1.8$ ) para mezclas metano – hidrógeno con porcentajes de metano de 65%, 80%, 90% mol.

Los productos de combustión muestran una tendencia similar a la encontrada para mezclas gas natural – aire, pero incrementándose la producción de hidrógeno, presentando los mayores valores para mezclas con alto contenido de metano (80 y 90%) y para relaciones de equivalencia superiores a 1,5 (mezclas ricas en combustible).

La figura 27 muestra los resultados de los porcentajes de H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> obtenidos mediante la simulación en PREMIX para las mezclas metano - hidrógeno (con porcentajes de metano de 65%, 80%, 90%) en función de la relación de equivalencia.

Figura 27. Resultados mezcla CH<sub>4</sub> – H<sub>2</sub> en función de relación de equivalencia



Las observaciones anteriores están en concordancia con la tendencia a utilizar el hidrógeno en mezclas combustibles, por ser considerado un combustible limpio; aunque, debido a la rápida velocidad de reacción, alta inflamabilidad y baja densidad de energía volumétrica presenta la dificultad para su uso y almacenamiento, por lo que es necesario definir el intervalo de uso en las mezclas combustibles [116, 146].

➤ Análisis de mezclas representativas

El análisis de la variación de la composición para mezclas representativas de la industria de refinación de petróleo permitió determinar que el hidrógeno, etano y propano son los compuestos que más afectan la combustión en hornos [100], por lo que se seleccionaron 10 muestras representativas variando los porcentajes de estos compuestos; la composición de las 10 mezclas analizadas se presenta en la tabla 18.

Tabla 18. Composición de mezclas representativas

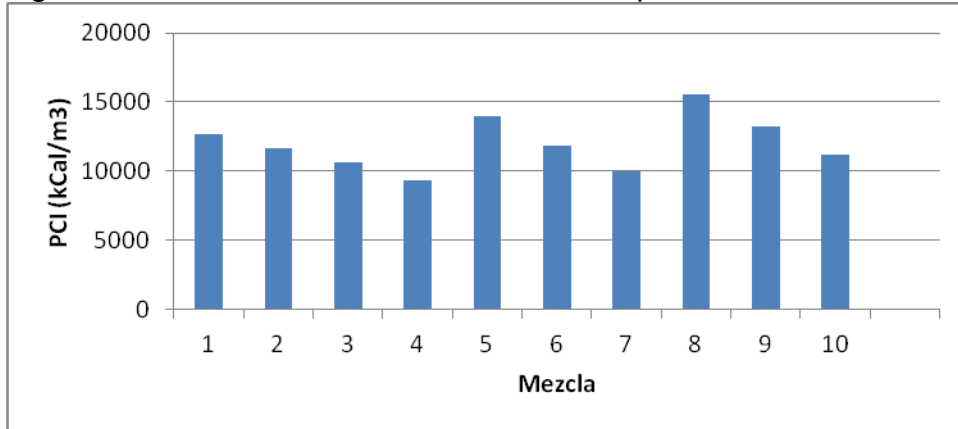
Compuestos	Mezclas									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	% mol									
CH <sub>4</sub>	35	55	35	50	30	50	70	30	70	70
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	10	20	25	10	30	20	10	35	20	10
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	35	5	20	20	30	20	10	35	10	20
H <sub>2</sub>	20	20	20	20	10	10	10	0	0	0

Se realizó la simulación de las mezclas representativas y los resultados del poder calorífico de las mezclas se muestra en la figura 28.

Las mezclas 5 y 8 se caracterizan por presentar los mayores valores de poder calorífico, debido a su alto contenido de propano.

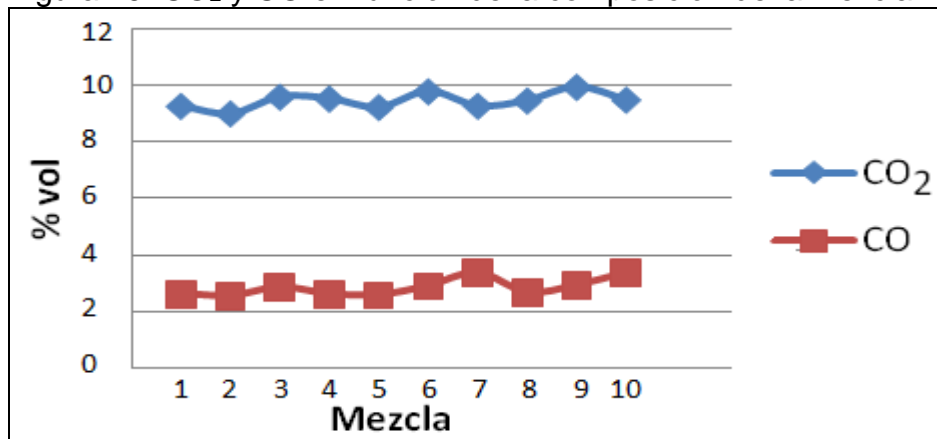
Se destaca la mezcla 4 que presentó el menor poder calorífico, a pesar de tener 20 % de propano, pero el efecto del propano es compensado por el efecto del 20 % de hidrógeno; este tipo de mezcla muestra un buen desempeño energético por tener un poder calorífico similar al gas natural, ambientalmente puede considerarse un combustible limpio, aunque presenta riesgos para la integridad de los equipos.

Figura 28. Poder calorífico de las mezclas representativas



La figura 29 muestra que los mayores valores para la producción de CO<sub>2</sub> se obtienen para las mezclas que tienen 50 % de metano y 20 % de propano, sin que estos valores se vean afectado por el porcentaje de hidrógeno de la mezcla, siendo estos valores consistentes con los registrados experimentalmente para mezclas con diferentes porcentajes de metano presentadas en la figura 25.

Figura 29. CO<sub>2</sub> y CO en función de la composición de la mezcla.



### 5.4.2 Temperatura de combustión.

El análisis de la combustión debe incluir además de la evaluación de la composición de los gases de combustión, la determinación del comportamiento de la temperatura y la velocidad del frente de llama con el fin de comprobar efectos de la incertidumbre de los datos obtenidos tanto por simulación computacional como experimentalmente, debido a la formación de especies intermedias que participan en las reacciones de oxidación [147].

Los valores de temperatura de combustión obtenidos experimentalmente fueron registrados variando la relación de equivalencia (0,8, 1,0, 1,4 y 1,8) para las mezcla combustible con diferente porcentaje de metano. La tabla 19 muestra los valores obtenidos.

Tabla 19. Temperatura de combustión (K) obtenida en las pruebas experimentales

Mezcla % Metano	Relación de Equivalencia ( $\phi$ )			
	0,8	1	1,4	1,8
92,5	1348	1383	1383	1521
70	1252	1263	1396	1531
55	1302	1315	1336	1489

La tabla 20 muestra los valores P y F para los datos experimentales de temperatura de combustión obtenidos utilizando la función ANOVA2 de Matlab.

Tabla 20. Tabla ANOVA para valores de temperatura de combustión.

ANOVA Table					
Source	SS	df	MS	F	Prob>F
Columns	83230.3	3	27743.4	19.35	0.0017
Rows	6208.2	2	3104.1	2.17	0.1959
Error	8600.5	6	1433.4		
Total	98038.9	11			

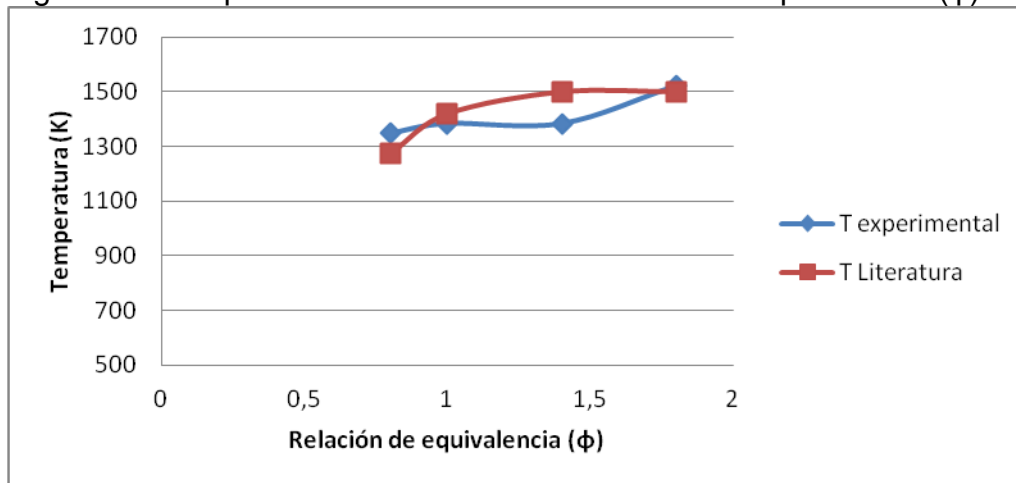
Fuente: Resultados de Matlab.

Para un nivel de significancia  $\alpha=0,05$  los p-values de las 4 relaciones de equivalencia y las 3 mezclas indican, que hay evidencia para afirmar que la Temperatura presenta una fuerte interacción por la relación de equivalencia (Prob-value < F= 0,0017) aunque no existe evidencia para este valor crítico de influencia de la mezcla (Prob>F= 0,1959).

El análisis de los datos experimentales muestra que la temperatura de combustión permanece entre los 1343 K y 1383 K, aumentando 173 K en  $\phi = 1.8$ , estos valores concuerdan con los reportados por el grupo de Toledo para la combustión del gas natural en medios poroso inertes [142, 143, 145] para el intervalo de  $0.5 < \phi < 3.0$  en medios porosos.

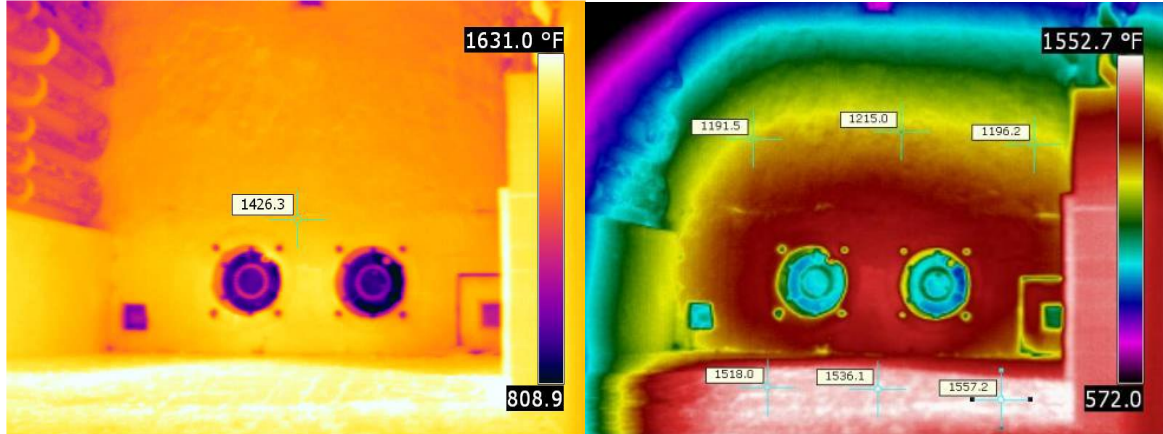
La figura 30 muestra la comparación de los valores de la temperatura obtenidos experimentalmente y los reportados por los autores antes mencionados.

Figura 30. Temperatura en función de la relación de equivalencia ( $\phi$ )



Los resultados obtenidos fueron comparados con los datos de monitoreo de un horno en una refinería en Colombia, la figura 31 muestra un reporte termográfico de un horno de la refinería de Ecopetrol para la zona de radiación y convección. Se pueden observar temperaturas entre 1093,7 °F (862,98 K) en la pared del horno y 1557,2 °F (1161,5 K) para gas natural de 96% de metano con un porcentaje de exceso de oxígeno de 5,70 [148].

Figura 31. Termogramas de un horno de refinería.



Fuente: ECOPEPETROL.

La diferencia entre los valores de las temperaturas obtenidos experimentalmente y los reportados en la termografía se presentan debido a que los valores en los termogramas consideran pérdidas de calor de hasta un 20 % en la temperatura registrada en las paredes del horno y la temperatura de combustión, estas temperaturas son afectadas por el porcentaje de exceso de oxígeno, las características de los quemadores y el estado de deterioro del equipo [149].

El trabajo de Toledo también reporta que en combustión en medios porosos a partir de  $\phi = 1.9$  la temperatura de combustión excede la temperatura adiabática marcando el punto de inicio del régimen superadiabático; al respecto, Hunters y colaboradores, describen la oxidación parcial en medios porosos como un proceso de propagación de la zona de reacción química de un gas en un sólido, por lo que existen tres zonas que caracterizan el desplazamiento del frente de llama [150].

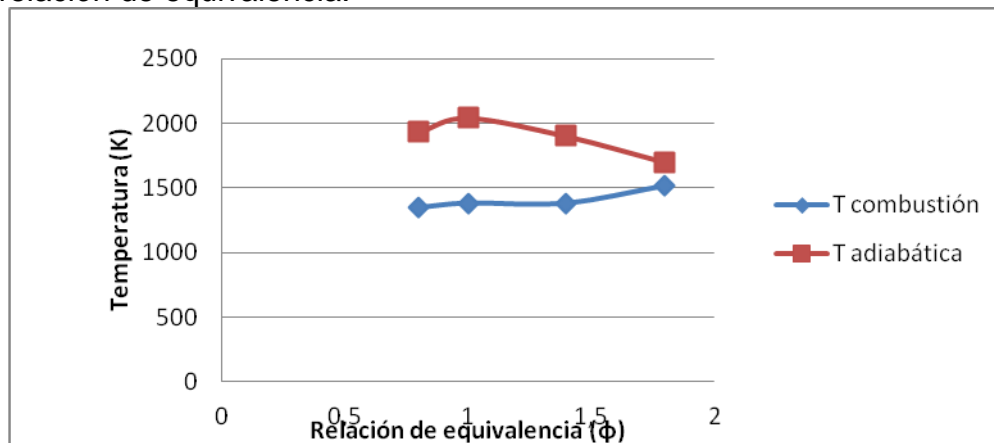
La primera zona se encuentra delante del frente de combustión y los gases se mezclan y se precalientan aprovechando el calor desprendido por el medio poroso.

En la segunda zona la reacción química se mueve en la misma dirección o en contra de la entrada de la premezcla combustible – aire, se libera una gran cantidad de calor, la que es absorbida por el medio poroso y conducida por

convección hacia la primera zona; de esta forma se realiza una regeneración del calor en el sistema lo que lleva al exceso de entalpía en la zona de reacción química y un lento aumento de la temperatura en el frente, la que puede superar a la temperatura adiabática. La tercera zona se encuentra detrás del frente, contiene los productos de combustión, los que intercambian activamente el calor por convección con el medio poroso [151].

La figura 32 compara la temperatura de combustión con la temperatura adiabática obtenida en función de la relación de equivalencia, en donde se puede verificar el comportamiento descrito para la combustión en medios porosos [152], la temperatura adiabática presenta un valor máximo de 2040 K en  $\phi = 1.0$ , contrario a lo que ocurre con la temperatura de combustión que a partir de  $\phi = 1.0$  aumenta en 300 K para luego estabilizarse a partir de  $\phi = 1.6$ , en un valor cercano a 1500K.

Figura 32. Temperatura de combustión y Temperatura adiabática en función de la relación de equivalencia.

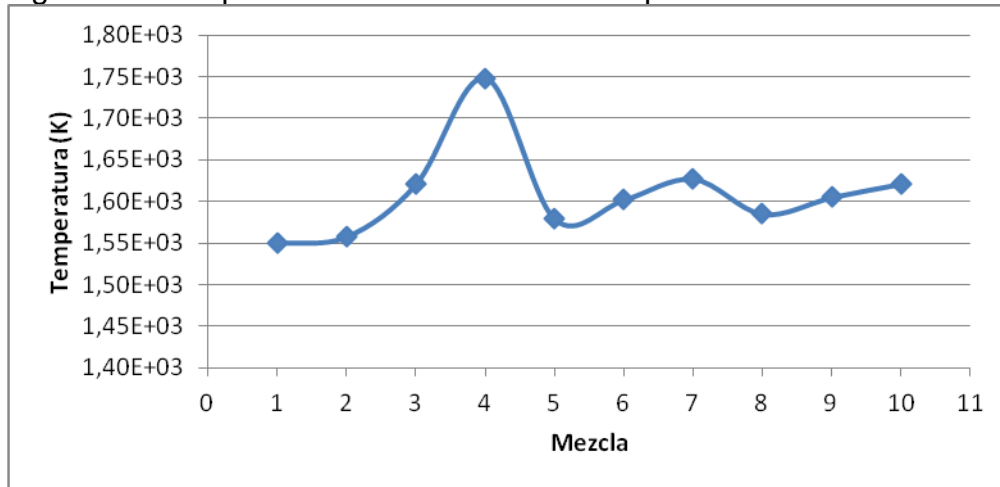


La variación de la temperatura en función de la composición de la mezcla para las mezclas de la tabla 18, muestra que la mayor temperatura (1760 K) se presenta para la mezcla representativa número 4, lo cual es consistente con el efecto del 20 % de propano.

La temperatura tiende a aumentar en función del aumento del porcentaje de metano en las mezclas; es decir, las mezclas 1, 5 y 8, presentaron los menores

valores de temperatura comparadas con las mezclas con contenidos de metano de 50 y 70%. La figura 33 muestra los resultados de la simulación en PREMIX para las mezclas representativas de la tabla 18.

Figura 33. Temperatura en función de la composición de la mezcla.



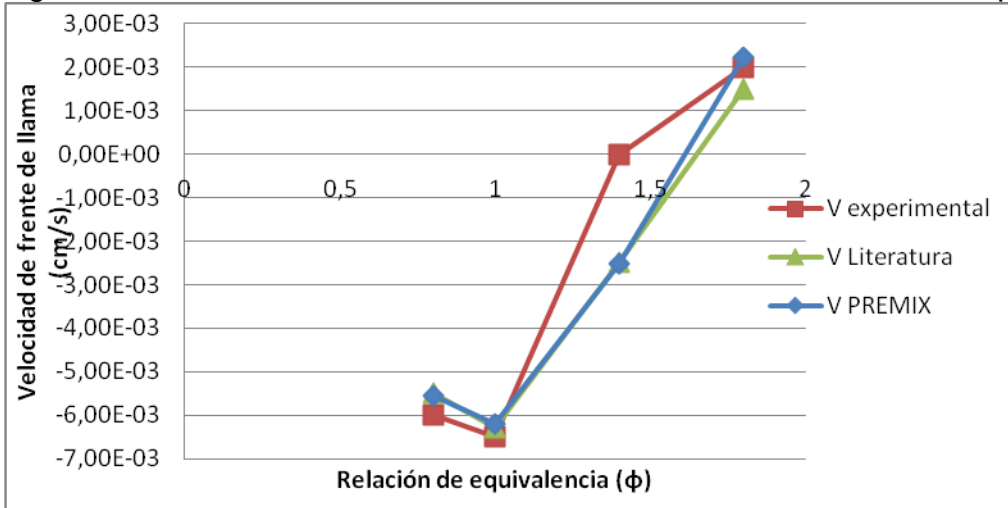
#### 5.4.3 Velocidad de frente de combustión:

Se realizó la medición de la velocidad de propagación del frente de llama experimentalmente. El frente llama presenta su valor absoluto máximo para una mezcla estequiométrica de aire – combustible ( $\phi = 1.0$ ), obteniéndose un valor de 0.007cm/s. La figura 34 muestra los valores obtenidos para gas natural por simulación en PREMIX y experimentalmente comparados con los reportados por Toledo y Araus [137, 143] para combustión de metano, encontrándose valores similares.

El frente de llama se desplaza hacia adelante para relaciones de equivalencia menores de 1.0, lo cual corresponde a mezclas pobres, con exceso de oxígeno alto. En el reactor utilizado el encendido se realiza en la parte superior y el procedimiento experimental indica que se debe iniciar con una relación de equivalencia estequiométrica, con esto se garantiza que el frente de llama se

desplace aguas arriba (hacia el fondo del reactor, es decir, en sentido contrario a la zona de encendido del reactor).

Figura 34. Velocidad de frente de llama en función de la relación de equivalencia.



Una vez el frente de llama llegue a la parte inferior del reactor se puede aumentar la relación de equivalencia y el frente de llama se desplazará aguas abajo (hacia la parte superior del reactor donde se enciende el reactor). Al desplazarse el frente de llama aguas abajo, el valor de la velocidad del frente de llama aumenta, estabilizándose para la relación de equivalencia  $\phi = 1.4$ , por lo que su valor fue aproximadamente 0 cm/s.

## 5.5 CONCLUSIONES

Los productos de combustión evaluados en el intervalo de relación de equivalencia entre 0.8 y 1.8 muestran concordancia con las reacciones de oxidación completa hasta  $\phi \leq 1.0$ , debido al exceso de aire en la mezcla y las reacciones de oxidación parcial para  $\phi \geq 1.0$ , dando lugar a la producción de hidrógeno y CO en los productos de combustión.

Para las mezclas de gases analizadas en rangos de  $0,8 < \phi < 1,8$  y mezclas con porcentaje de metano de 92,5% - 70% y 55%, a un nivel de significancia de 0,05,

se encontró evidencia de que el exceso de oxígeno no es un factor determinante en las emisiones pero presenta una fuerte incidencia en la temperatura, así como el porcentaje de metano en la mezcla no influye en la temperatura pero si en las emisiones. Los datos experimentales obtenidos no permiten el análisis de los efectos conjuntos del porcentaje de metano y exceso de oxígeno, por tanto es recomendable analizar esta interrelación en futuros trabajos.

El análisis de los datos experimentales en la variación del porcentaje de CO<sub>2</sub> a un nivel de significancia de 0,05 ( $t=-7,79$ ), muestra evidencia estadística suficiente para concluir que el modelo de simulación utilizado resulta adecuado al análisis de los datos relacionados con el problema de estudio, igualmente para la producción de hidrógeno hay concordancia con los valores obtenidos por simulación en PREMIX, con un coeficiente de correlación de 98,8%, a un nivel de significancia de 0,05%.

Los mayores valores para la producción de CO<sub>2</sub> se obtienen para las mezclas que tienen 50 % de metano y 20 % de propano, sin que estos valores se vean afectados por el porcentaje de hidrógeno de la mezcla, siendo estos valores consistentes con los registrados experimentalmente para mezclas con diferentes porcentajes de metano.

Se deben tener en cuenta las restricciones del modelo en cuanto a los rangos de relación de equivalencia, la temperatura de combustión tuvo un comportamiento estable para el rango evaluado de relación de equivalencia entre 0.8 y 1.8, encontrándose una temperatura alrededor de 1300 K para una mezcla de gas natural - aire.

## **6. HERRAMIENTA DE SEGUIMIENTO Y CONTROL Y PROCEDIMIENTOS PARA LA METODOLOGÍA DE GESTIÓN ECO-EFICIENTE**

### **6.1 INTRODUCCIÓN**

El mejoramiento continuo requiere de herramientas y procedimientos con las que se pueda hacer un monitoreo efectivo a las acciones realizadas para comprobar que están alineadas con la política y los objetivos de la organización; específicamente, la etapa de verificación de la metodología eco-eficiente y segura para el proceso de combustión tiene por objetivo realizar el seguimiento y control del desempeño del proceso y la etapa de actuar presenta los procedimientos a seguir en función del cumplimiento de las metas propuesta por la organización.

En el marco de la norma ISO 50001 se establece el uso de indicadores para el monitoreo y control operacional, tales como los indicadores de desempeño energético (IDE) [68], que están relacionados con el uso significativo de la energía y por lo tanto con la producción de la empresa. Estos indicadores no están directamente relacionados con los aspectos ambientales y seguridad, sino que para cada uno de los aspectos se cuentan con indicadores diferentes, además en una misma organización se pueden tener indicadores específicos por áreas. Teniendo en cuenta la necesidad de integrar los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad para el proceso de combustión, se desarrolló un indicador bajo los criterios de eco-eficiencia mediante la utilización de la lógica difusa.

Las variables de entrada para el modelo difuso fueron, el poder calorífico, la cantidad de CO<sub>2</sub> emitida y la temperatura de combustión obtenidas de la evaluación de las mezclas combustibles presentadas en el capítulo 4 y 5; seguidamente se establecieron los procedimientos para la etapa actuar que presentan los pasos a seguir según las características de red de combustible, facilitando la toma de decisiones para todos los niveles de la organización.

En las siguientes secciones se describen conceptos de la teoría difusa, el sistema de inferencia difusa y el indicador establecido para el seguimiento y control de la combustión de combustibles de composición variable. De igual manera, se especifican las acciones a seguir de acuerdo a los resultados de la etapa de verificación y el diseño de la red de combustible bajo los criterios de eco-eficiencia.

Los resultados presentados en este capítulo están basados en los artículos publicados:

Computer aided evaluation of eco-efficiency of refinery combustion process. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov. Chemical Engineering Transactions. ISBN 978-88-95608-26-6; ISSN 1974-9791. Volumen 35, 2013.

Optimización de la combustión utilizando como criterios de evaluación el índice de Wobbe y el número de metano. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, María Gómez, Viatcheslav Kafarov. Enviado a Revista ITECKNE. Vol. 11 Número 1, 2014.

## **6.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS**

### **6.2.1 Indicadores de gestión**

Las organizaciones plantean sus objetivos y metas de desempeño de acuerdo a sus recursos y su capacidad de producción para cumplir con la legislación vigente y los estándares de calidad exigidos por los clientes, tanto en cantidad como en calidad. Es por esto que las organizaciones deben tener control de los procesos con el fin de poder anticiparse a los problemas que se pudieran presentar y obtener los rendimientos económicos esperados.

Los sistemas de gestión plantean el uso de indicadores como herramienta fundamental para el mejoramiento continuo; puesto que un indicador ofrece una medida de la situación del proceso. En una organización pueden coexistir tantos

indicadores como se consideren necesarios para mantener el control del proceso y obtener información que permita la toma de decisiones.

En este sentido, un indicador es una relación de variables cuantitativas o cualitativas que permite medir una situación u objeto de estudio; sobre este principio de medición del desempeño [153] define los criterios de selección que deben cumplir los indicadores, especialmente referido a sostenibilidad. En la tabla 21 se explican los criterios para seleccionar los indicadores.

Tabla 21. Criterios para selección de indicadores.

<b>Relevante:</b>	Muestra la importancia del mejoramiento de las condiciones existentes.
<b>Significativo:</b>	Es aceptado por su transparencia y accesibilidad
<b>Objetivo:</b>	Emplea técnica de medición veraces y confiables
<b>Efectivo:</b>	Apoya la evaluación comparativa y el monitoreo para la toma de decisiones
<b>Integral:</b>	Ofrece una evaluación global de los avances con respecto a los objetivos
<b>Contextualizado:</b>	Tiene en cuenta las condiciones y restricciones, utilizando la normalización apropiada
<b>Practico:</b>	Implementación fácil y bajo costo

Fuente: EPA [153]

De acuerdo a los atributos anteriormente mencionados, es importante el conocimiento de la organización en la cual van a implementarse los indicadores con el fin de que sean realmente una herramienta útil. Otras características deseables en los indicadores según la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos son [154], y que también son aplicables a los procedimientos para la etapa actuar son:

- Accionable, para que se puedan tomar acciones concretas según la medición.
- Transferible y escalable, adaptables a otras organizaciones similares.

- Intergeneracional, para distribuir costos y beneficios en las diferentes generaciones.
- Durable, aplicable a largo plazo.

La elaboración o selección de los indicadores debe responder las siguientes preguntas: ¿Cómo obtener los datos?, ¿Cómo procesar los datos?, ¿Cómo interpretar los resultados? El resultado es una unidad de medida del desempeño de las variables que lo componen.

Muchas organizaciones se han basado en las características descritas anteriormente para definir sus indicadores de sostenibilidad, según sus propósitos y objetivos y han ideado diferentes estrategias de socialización de la información obtenida con el fin de que los miembros de la organización, los clientes o el público en general tenga acceso a la información [153]. Las organizaciones seleccionan los índices y elaboran los procedimientos sobre la base de una evaluación integral de largo plazo, los criterios económicos, ambientales y sociales que dan cuenta tanto específica como general de las tendencias de sostenibilidad.

Los índices son creados y mantenidos de acuerdo con una metodología sistemática, permitiendo a los inversores interesados en la sostenibilidad tomar decisiones [155]; un ejemplo es el índice Dow Jones Sustainability, el cual sigue el enfoque de mejor en su clase y está diseñado para medir el desempeño de los líderes en sostenibilidad en el mundo [156].

Algunas compañías, entre esas Toyota y Toshiba, incluyen los indicadores de eco-eficiencia en la estrategia de negocios; estos indicadores buscan influir en el mercado ofreciendo información del valor del producto o servicio en función del impacto ambiental (Eco-eficiencia= valor del producto/impacto ambiental) [157]. Otros ejemplos de indicadores de desempeño energético (IDE) que se utilizan para el monitoreo del desempeño energético son [153]:

IDE= Gas natural consumido/unidad de producto

Ecuación 13

IDE= kCal consumidas/MWh energía producida. Ecuación 14

IDE= m<sup>3</sup> de combustible consumido/MWh electricidad producida Ecuación 15

Se han utilizado diferentes técnicas para elaborar los indicadores de desempeño, tanto para organizaciones como para la evaluación de la sostenibilidad en los territorios; tales técnicas incluyen modelos de dinámica de sistemas, análisis de componentes principales [158] y pruebas de correlación [159]. Herramientas computacionales como la lógica difusa también pueden ser utilizadas para la elaboración de indicadores de desempeño.

Desde el punto de vista ambiental, la combustión de grandes cantidades de combustibles gaseosos aumenta el contenido de dióxido de carbono en la atmosfera originando un incremento de la temperatura global de la superficie del planeta conocido como efecto invernadero [14, 160, 161]. Por lo tanto, el desempeño ambiental de una empresa es relevante en una estrategia de diferenciación de precios porque se constituye como un indicador de la eficiencia de los procesos de transformación utilizados [15, 162], desde este punto de vista, la contaminación resulta de la incapacidad tecnológica para utilizar la totalidad de la materia y energía en los procesos productivos, y evidencia que los recursos han sido utilizados de forma incompleta, ineficiente o inefectiva.

Asociados a estas ineficiencias aparecen costos de disposición y de oportunidad, los cuales pueden llegar a ser determinantes para el éxito o fracaso en ambientes de alta competencia. Los costos de disposición pueden dividirse en costos de manejo (costos de almacenamiento, transporte, carga y descarga inherentes al manejo de los residuos) y costos regulatorios: penalizaciones impuestas por los reguladores ambientales a las empresas contaminantes [16].

### **6.2.2 Lógica difusa**

En 1965, el Profesor Lotfi A. Zadeh formalizó la teoría de los conjuntos difusos, basado en el concepto fundamental de la variación de la temperatura o

multivalencia [163]. La lógica difusa se puede resumir como una generalización de la teoría de conjuntos clásica, según la definición de Zadeh, "uno de los objetivos principales de la lógica difusa es la formalización / mecanización de la capacidad humana notable de razonar y tomar decisiones en un entorno de imprecisión, la incertidumbre, la parcialidad de la información y la parcialidad de la verdad" [164]. Contrariamente a la teoría clásica en la que los conjuntos tienen límites nítidos, la lógica difusa tiene un conjunto con límites poco definidos.

La selección del modelo de lógica difusa para el análisis y la evaluación de los problemas de combustión y la gestión de los mismos, se basa en que esta permite la toma de decisiones en escenarios de "información imprecisa y conocimiento parcial" según Zahdeh [163], facilitando con esto la simplificación del diseño, el desarrollo de productos más eficientes y la reducción de costos de producción; de esta forma, su potencial de aplicación tiene alto grado de impacto en la industria química, el control de procesos y el desarrollo de sistema expertos basados en conocimiento para la ingeniería química [165, 166]. Así mismo como el desarrollo de indicadores y modelos de gestión para lograr un alto grado de eficiencia en las organizaciones expuestas a incertidumbre [167].

La idea de los conjuntos borrosos es que en el análisis de lógica común, un punto pertenece (o no) a una sola etapa, pero en un proceso real, no hay sólo una pertenencia; un elemento puede ser 30% de un conjunto X y el 70% del conjunto X'. Esto explica la transición de un estado ajustado X a un conjunto en el estado X' como un proceso continuo en el mundo físico y la descripción de las fronteras tienden a ser subjetiva.

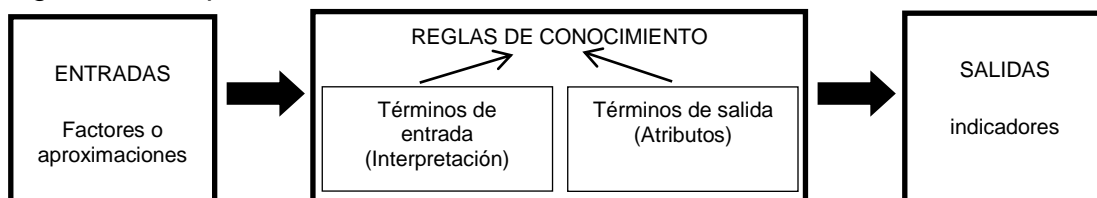
Un conjunto difuso A, definido en el universo de discurso X, es cualquier conjunto que permite que sus miembros ( $x \in X$ ) tengan diferentes grados de pertenencia (función de pertenencia  $\mu_A$ ). Las funciones de pertenencia se obtienen generalmente a través de la parametrización de las funciones con formas geométricas simples, tales como: Gauss, PI y función de campana [168].

Hay varios métodos de defuzzificación en la literatura, los dos más utilizados son el centro de gravedad y el promedio máximo. En el método de la máxima media, la salida debe ser obtenida de la media de los dos elementos extremos en el universo que corresponden a los valores más altos de la función de pertenencia. A diferencia del anterior, en el método del centro de gravedad, la salida es el valor en el universo que separa el área bajo la curva de la función en dos partes iguales. Las aplicaciones son ilimitadas, y adaptable a todas las áreas [169].

### 6.2.3 Inferencia difusa

En la inferencia difusa se interpreta los valores en la entrada, y luego basándose en las reglas de conocimiento, se asignan valores para la salida. La figura 35, representa un diagrama que contiene un esquema general que describe el sistema difuso.

Figura 35. Esquema del sistema difuso



Fuente: Dumitras [164].

El establecimiento de un proceso de inferencia difusa se realiza a partir de un conjunto de reglas, que son las frases con una estructura similar a Si / Entonces, que son interpretados por el sistema. Es de destacar que existe un paralelismo natural de las reglas, en la forma que son evaluados, siendo éste uno de los aspectos más importantes de los sistemas de lógica difusa. Se establece un rango de valores para cada caso de variable analizada, así como también cuál es el significado de cada término lingüístico.

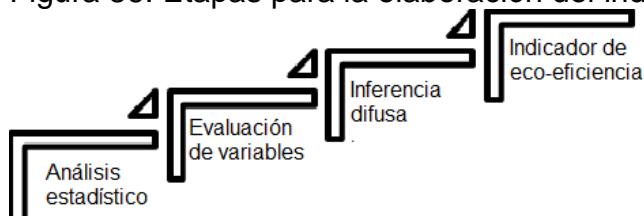
La inferencia difusa es el proceso de asignación de una determinada entrada a una salida; en este proceso, se encuentran las funciones de pertenencia, operadores lógicos difusos y reglas del tipo Si / Entonces. El proceso de decisión

puede ser mejor descrito mediante un nivel lingüístico utilizando reglas [R]. Tipo: [R] SI Antecedente ENTONCES Consecuente (peso). El método de inferencia difusa de Mandani es el más comúnmente usado y fue utilizado para construir los primeros métodos de control usando lógica difusa. Este método fue propuesto por Ebrahim Mamdani en 1975 para un sistema de control de una turbina de vapor y una caldera combinando reglas de control lingüísticas obtenidas de la experiencia de los operadores de planta [170].

### 6.3 METODOLOGÍA:

La metodología aplicada para determinar el indicador de eco-eficiencia y los procedimientos para la gestión eco-eficiente de la combustión, parte de la definición del problema y las variables que intervienen, las cuales han sido definidas en los capítulos anteriores; estas variables son analizadas con el fin de obtener las reglas de conocimiento que definen las interacciones de las variables, mediante el proceso de inferencia difusa. Luego, la salida del proceso de inferencia difusa es sometida a la defuzzificación para obtener un valor que permita ubicar el resultado en una escala predeterminada. Esta metodología está basada en las etapas para la selección o elaboración de indicadores de sostenibilidad, propuestas por La Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos [153]. Se utilizó la caja de herramientas de la lógica difusa de MATLAB [171]. La figura 36 muestra las etapas para la elaboración del indicador de eco-eficiencia utilizando lógica difusa.

Figura 36. Etapas para la elaboración del indicador



- Selección de variables de entrada y escala de medición

Las variables de entrada seleccionadas son las correspondientes a los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad para proceso de combustión. Las reglas de conocimiento corresponden a las correlaciones de estas variables que están definidas según el modelo de combustión presentado en el capítulo 5; las variables son: poder calorífico (aspecto energético), cantidad de CO<sub>2</sub> equivalente (aspecto ambiental) y temperatura adiabática (aspecto de seguridad). Se estableció la escala de medición para el indicador de eco-eficiencia de 0 a 1.

- Proceso de inferencia difusa

Los datos de las variables son las entradas para el modelo de Mandani; las reglas de conocimiento fueron definidas basadas en las correlaciones identificadas por el modelo de combustión en el capítulo 5 y para la defuzzificación del dato de salida se utilizó el método de centroide.

- Indicador Eco-eficiencia

En la etapa de post-procesamiento de cada muestra por defuzzyfication correspondiente a las clasificaciones individuales entre la composición de una medición de la posición como la media o la mediana. En este caso particular, la mediana se utilizó para que no sea afectada por los valores extremos. Es importante destacar que el valor de salida de la etapa de post-procesamiento se puede convertir de nuevo en la forma de términos lingüísticos. Los resultados permiten identificar las mezclas de combustible que promueven la eco-eficiencia en el proceso de combustión.

Para establecer los procedimientos para la eco-eficiencia se identificaron los puntos clave en cada etapa y se identificaron buenas prácticas basadas en el cumplimiento de la norma 50001, lo cual dio como resultado el diseño de la red de combustible.

## 6.4 RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

### 6.4.1 Indicador de eco-eficiencia

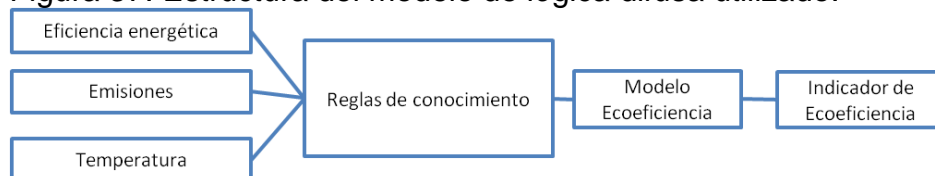
Con el propósito de establecer un patrón de medida que permita el control, el análisis y el conocimiento del proceso de combustión, se implementó el método de inferencia difusa de Mamdani para obtener el índice de eco-eficiencia, numérico y lingüístico de fácil comprensión basado en las interrelaciones de las siguientes variables:

- Emisiones
- Temperatura
- Eficiencia energética

### Modelo de lógica difusa

Los componentes del modelo y su estructura fueron programados usando la herramienta “fuzzy logic” del software Matlab. En términos generales, en la inferencia difusa se toman una serie de valores de entrada, los cuales, al ser analizados en conjunto mediante reglas definidas, permiten calcular una salida numérica [172]. La figura 37 muestra en detalle la estructura general del modelo aplicado y a continuación se explican cada uno de los elementos.

Figura 37. Estructura del modelo de lógica difusa utilizado.



### Entradas

La Eficiencia energética, Temperatura y Emisiones, como elementos claves para el análisis de la eco-eficiencia de los procesos de combustión, han sido elegidas

como las variables de entrada. La tabla 22 muestra la descripción de las entradas al modelo difuso.

Tabla 22. Entradas del modelo difuso.

Aspecto	Variable	Intervalo de valores	Explicación	Tipo Pertenencia	Funciones de pertenencia
Energética	Eficiencia Energética	70 – 98	Condiciones de operación	Gaussiana	Muy Bajo Bajo Medio Alto Muy Alto
Ambiental	Emisiones (CO <sub>2</sub> )	9 - 11,1	Metas ambientales y valores permisibles		
Seguridad de procesos	Temperatura	1910-2120 (°C)	Condiciones de operación		

Los valores de la tabla 22 corresponden a especificaciones de la industria y las mezclas combustibles analizadas; de acuerdo a las condiciones de operación, las mezclas que presenten valores inferiores al límite de eficiencia energética (70%) son descartadas para uso como combustible; para emisiones, el rango 9%-11,1% corresponde con la normativa ambiental para la industria petroquímica y las metas corporativas [17]; así mismo, el intervalo de valores para la seguridad de procesos de 1910 °C -2120 °C fue tomado de la literatura [103, 109].

Los cinco niveles de pertenencia fueron distribuidos uniformemente a lo largo de los intervalos mencionados en la tabla 22, esto se realizó de manera automática usando el *fuzzy toolbox* en MATLAB, tomando como modelo una función de pertenencia Gaussiana, ya que esta permite distribuir los niveles de pertenencia en una función normalizada a lo largo del intervalo, los valores calculados por el software y las condiciones de operación del modelo pueden apreciarse en el Anexo F.

### Reglas de conocimiento

125 reglas de conocimiento fueron identificadas a partir de los valores posibles para cada una de las variables (tres variables con cinco niveles cada una, da un

total de 125 combinaciones), usando el formato de un conjunto de reglas definido por Del Brío y colaboradores [173]:

$R^{(i)} : \text{IF } X_1 \text{ is } F_1^i \text{ and } \dots \text{ And } X_n \text{ is } F_n^i \text{ THEN } y \text{ is } G^i$  Ecuación 15

Donde R: Regla,  $X_i$ =Variable,  $F_i$ =Función de pertenencia,  $y$ = Ecoeficiencia y  $G$ =Función de pertenencia de índice de Ecoeficiencia.

Por ejemplo, al aplicar la ecuación 15 en uno de los casos se obtiene:

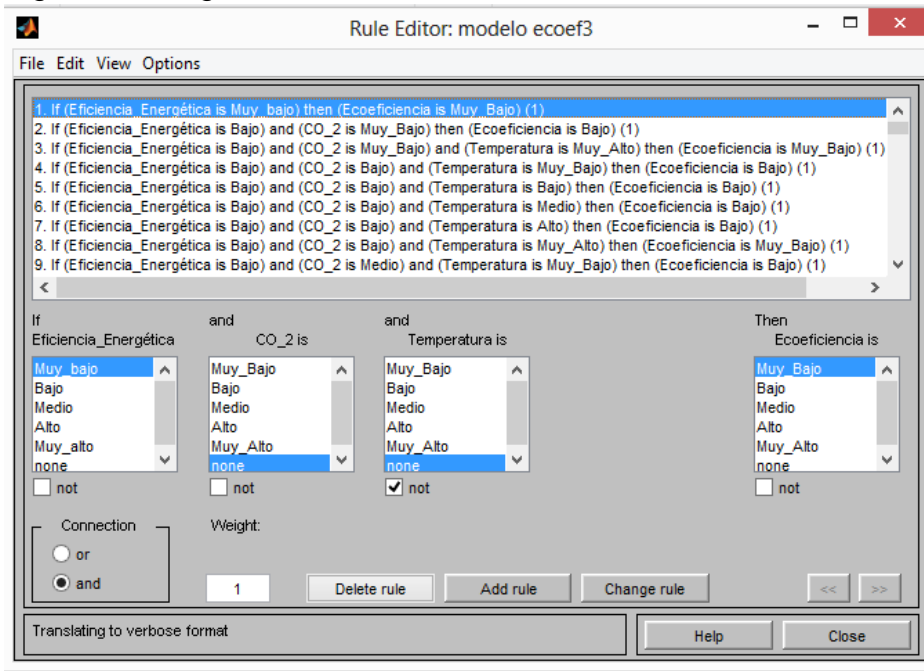
**R: Si Eficiencia energética = Muy bajo AND Emisiones = Muy alto AND Temperatura = Muy Alto THEN Ecoeficiencia = Muy Bajo** o (1 5 5, 1(1)) en lenguaje de MATLAB.

La aplicación y el diseño de las reglas se basaron en el sentido común y el comportamiento del sistema ya analizado escritas en términos de las etiquetas de las funciones de pertenencia. Las reglas de conocimiento permiten describir el comportamiento del sistema y la respuesta a cualquier cambio en las variables de entrada, teniendo en cuenta la interacción entre ellas y proporcionando una respuesta integral.

La valoración de las reglas de conocimiento se realizó de acuerdo a la normatividad y la importancia que tienen la eficiencia energética, el medio ambiente y la seguridad de los procesos a nivel industrial; se establecieron cinco niveles para cada uno de los aspectos, como se aprecia en la tabla 22: muy bajo, bajo, medio, alto y muy alto, lo que representa el estado de cada componente y su impacto en la eco-eficiencia de la combustión.

El conjunto de reglas definido para cada una de las 125 combinaciones se puede apreciar en el Anexo F. La figura 38 presenta el proceso de entrada de las reglas de conocimiento en el entorno de MATLAB.

Figura 38. Reglas de conocimiento.



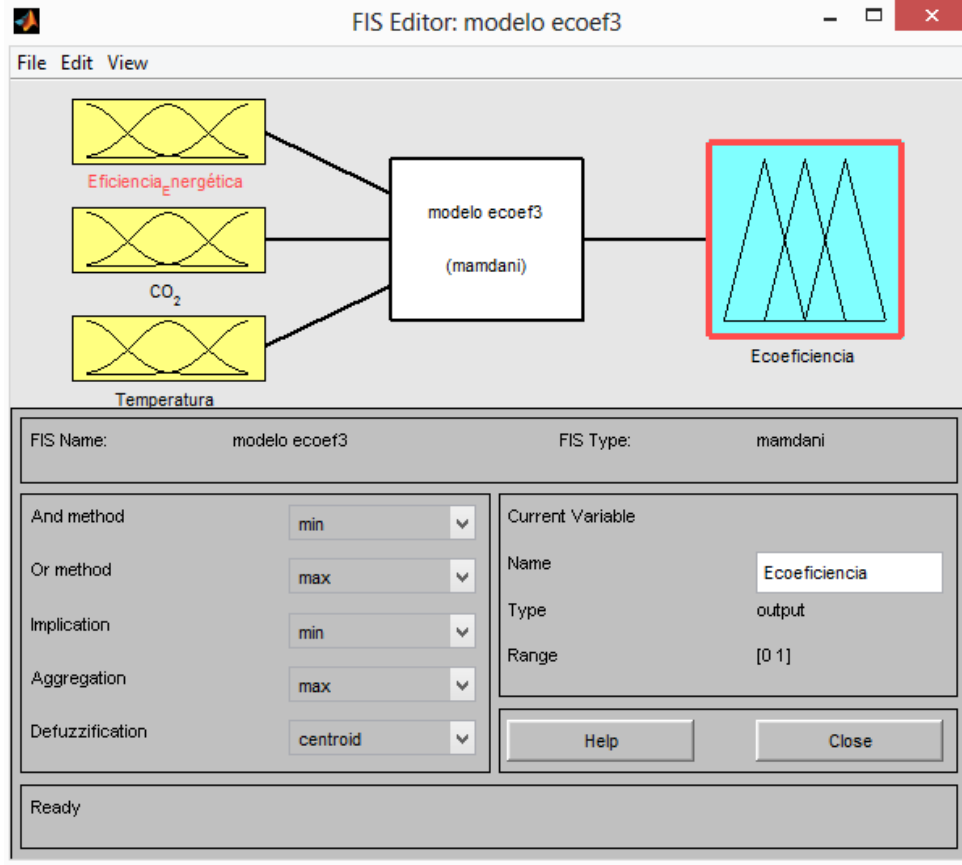
### **Salida: Medida de ecoeficiencia**

El indicador de eco-eficiencia calcula el grado de pertenencia de cada uno de los conjuntos difusos de las variables de entrada para la composición de la mezcla de gas combustible que se requiere evaluar.

La medida integrada de todos los aspectos aplica el proceso de inferencia difuso utilizando el conjunto de reglas de conocimiento y luego mediante el método del centroide se realiza la defuzificación y se obtiene la salida difusa.

La figura 39 ilustra el modelo difuso obtenido en MATLAB.

Figura 39. Modelo difuso



Fuente: Toolbox Fuzzy Logic Matlab.

### Evaluación del modelo

El modelo difuso programado en Matlab consta de 3 elementos de entrada:

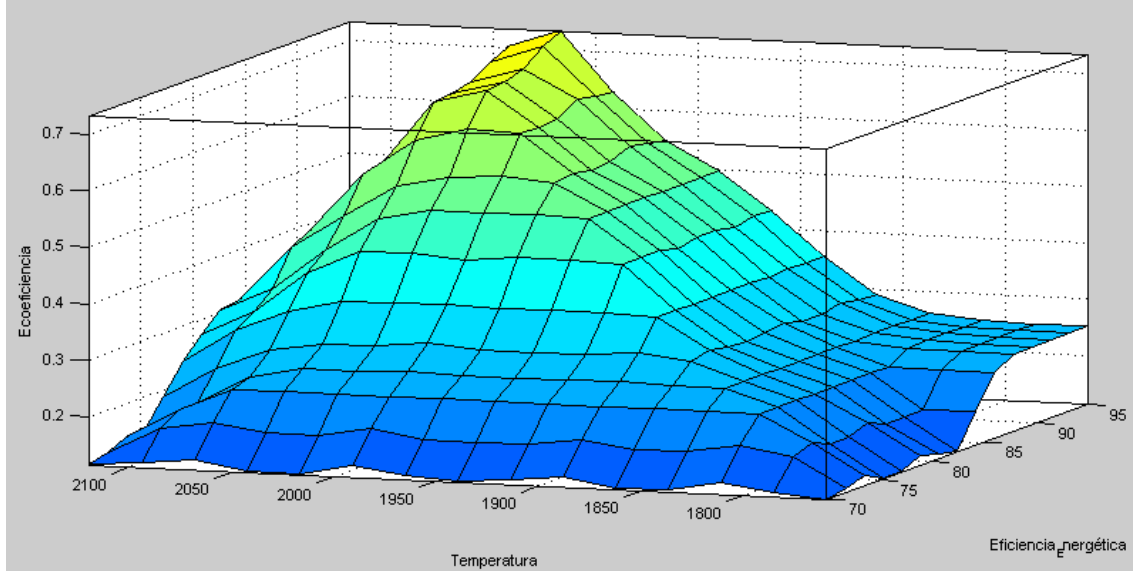
- Membership function editor: Correspondiente con las entradas y las condiciones de pertenencia
- Rule Editor: Para el montaje de las reglas
- FIS Editor: Diseño general del modelo

Ya programados estos 3 elementos es posible obtener 2 ventanas de resultados.

- Surface Viewer: Superficies de respuesta bidimensional.
- Rule viewer: Obtención de valor numérico (Indicador de eco-eficiencia).

La evaluación de superficies de respuesta permite ver, de manera gráfica, la interrelación por pares de variables frente a la eco-eficiencia del proceso. Las figura 40 y 41 muestran la superficie de respuesta del modelo analizado.

Figura 40. Superficie de respuesta Temperatura –Eficiencia energética. (CO<sub>2</sub> Bajo)



Fuente: Toolbox Fuzzy Logic Matlab.

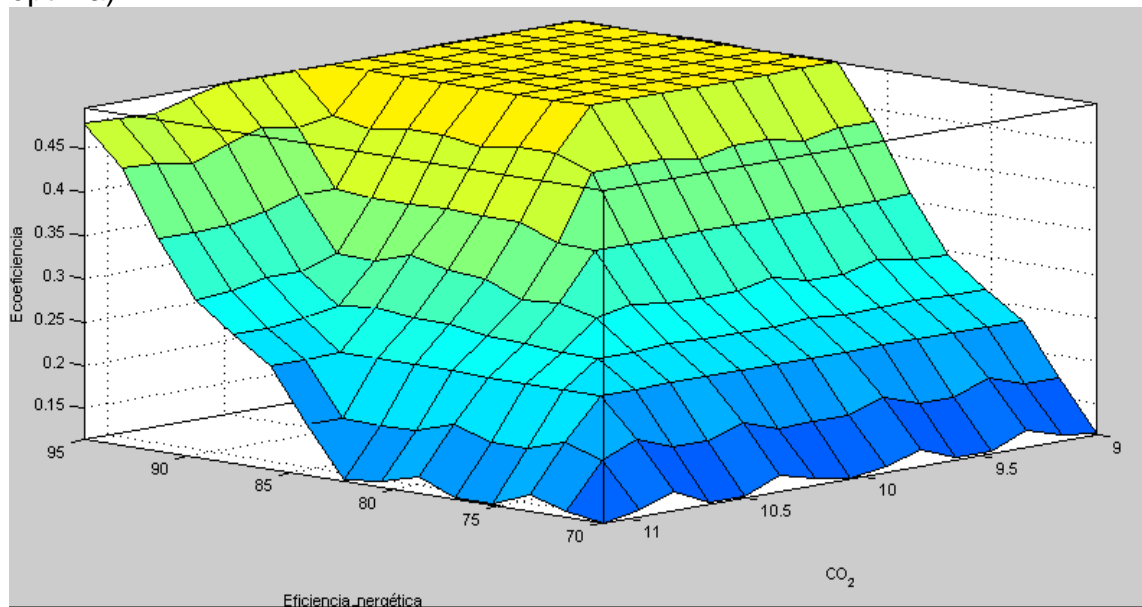
Es importante observar que la temperatura tiene un alto grado de influencia, siendo muy pequeño el margen de operación de esta frente a la eco-eficiencia del proceso. Temperaturas adiabáticas de llama catalogadas como Muy bajas y Bajas (1760-1850°C) dan como resultado baja eco-eficiencia debido a los requerimientos energéticos del proceso, siendo en estos casos necesario agregar energía al proceso de otras fuentes o modificar los flujos de los gases combustibles.

Para el caso de temperatura adiabática de llama, catalogada como “Muy altas” (Superiores a 2060°C) se incrementa el riesgo de fallo en los equipos por alta temperatura, incidiendo de manera negativa en la eco-eficiencia total del proceso. La figura 39 muestra que para el caso de un valor medio de emisiones, que la relación T-Eficiencia alcanza un máximo grado de eco-eficiencia cercano al 75%.

La relación entre Eficiencia energética y Emisiones muestra el mayor rendimiento para resultados de emisiones entre Muy bajo y Bajo (9%-10%) y eficiencia en niveles Alto y Muy alto (85%-95%) condicionado al rendimiento de la temperatura de la mezcla de gases.

La figura 41 muestra la superficie de respuesta que relaciona la eficiencia energética y las emisiones con la eco-eficiencia para una temperatura promedio de 1940 °C.

Figura 41. Superficie de respuesta Eficiencia energética-CO<sub>2</sub> (Temperatura óptima)



Fuente: Toolbox Fuzzy Logic Matlab.

En estos casos, la medida de eco-eficiencia brinda una aproximación al rendimiento integral del proceso que puede ser mejorado con medidas operacionales tales como las que muestra la tabla 23.

Tabla 23. Medidas operacionales para el mejoramiento del indicador de eco-eficiencia.

Dimensión	Mejora operacional
Eficiencia Energética	Sistema de Gestión Eficiente de Energía. ISO 50001
Emisiones	Cambio tecnológico en equipos
Temperatura	Regulación de flujos de mezclas. Controles de flujo de combustible y Cambio tecnológico en quemadores y sistema de mezcla Aire-Combustible.

A partir de los resultados obtenidos en el análisis de las superficies de respuesta es posible concluir que los valores óptimos de eco-eficiencia no implican, al analizar las relaciones interdependientes, necesariamente obtener los más altos resultados individuales. Aunque en principio, a nivel industrial o matemático sea posible esperar que los más altos valores en cualquier variable de proceso sean demandados (o el menor en el caso de las emisiones).

En este caso particular, el problema de la mezcla de gases dentro de los procesos, incluye también elementos de riesgo operacional, económico, social y ambiental que obligan a trabajar dentro de rangos y resultados que aunque no representen los mayores rendimientos individuales (por variable) en conjunto son la mejor apuesta de largo plazo para garantizar la seguridad del proceso, el cuidado del medio ambiente y la mayor eficiencia operacional.

### **Indicador de Ecoeficiencia**

La defuzzificación se realiza mediante el método de centroide, el cual es aplicado al modelo mediante la siguiente fórmula:

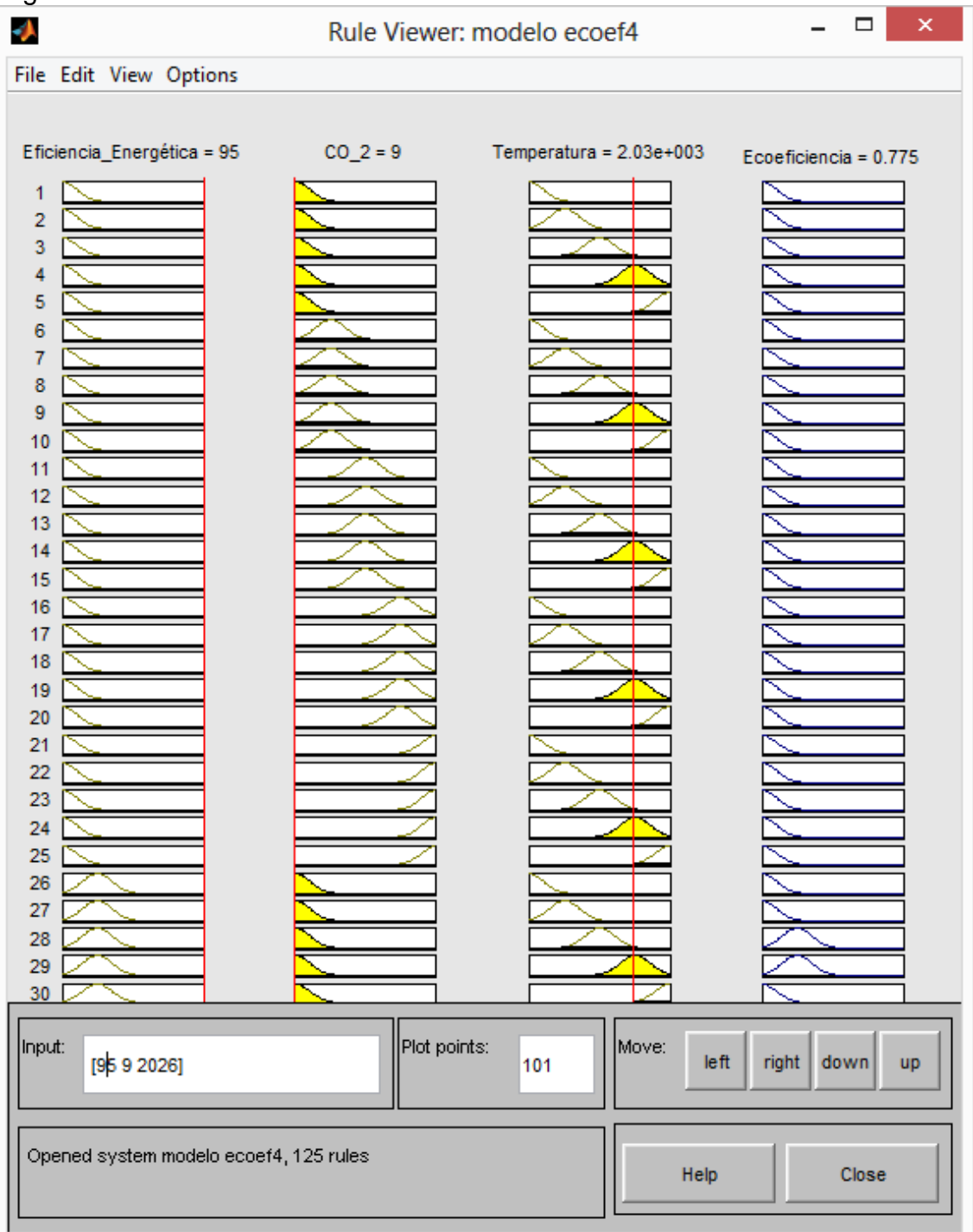
$$Ecoeficiencia = \frac{\sum_{i=0}^n F(x_i) x_i}{\sum_{i=0}^n F(x_i)} \quad \text{Ecuación 18}$$

En esta ecuación, los valores de  $F(x)$  y  $x$ , son los resultados particulares de eco-eficiencia asociados a cada variable (Eficiencia energética, emisiones, temperatura) y su cálculo se realiza automáticamente en Matlab. Estos resultados son mostrados en el módulo “Rules viewer”. La figura 42 muestra el cálculo de eco-eficiencia para uno de los casos evaluados.

Tal como se aprecia en la figura 42, en el modelo analizado, el más alto valor de ecoeficiencia se obtiene al integrar valores altos de Eficiencia energética (Alrededor de 90%-95%) Valores entre muy bajos y medios de emisiones de CO2 (Alrededor de 9%-10%) y Temperatura alta (Cercano a 2026°C) llegando a un

máximo teórico de 77,5% que puede ser mejorado a partir de la implementación de controles operacionales como los mencionados en la tabla 23.

Figura 42 Cálculo del indicador de eco-eficiencia.



Fuente: Resultados Toolbox Lógica difusa de Matlab.

Usando la herramienta presentada en el Anexo B. y con el conocimiento de las corrientes representativas analizadas en el capítulo 5, se evaluaron mezclas que para el caso de estudio cumplieran con estos requisitos, encontrando las siguientes:

Mezclas con contenido de hidrógeno entre 15 y 20%, contenido de metano entre 50 y 70 % y contenidos de etano o propano que no sean superiores al 15%.

Mezclas con contenido de metano entre 30 y 50 %, contenido de propano o etano máximo de 25 % y contenido de hidrógeno que no supere el 10 %; en este caso se favorece la eficiencia energética y el porcentaje de hidrógeno contribuye a la disminución de emisiones al medio ambiente.

El indicador de eco-eficiencia puede presentar valores cercanos al máximo para mezclas que incluyan hidrocarburos ligeros; cuando se incluyen butano o pentano, la eco-eficiencia disminuye debido a las altas temperaturas que se pueden presentar por la presencia de estos hidrocarburos en la mezcla (Temperaturas mayores a 2100 °C). Para mantener niveles óptimos del indicador de eco-eficiencia se espera que el contenido de butano o pentano no supere el 5% en la mezcla.

#### **6.4.2 Procedimientos para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión.**

Los procedimientos para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión permiten determinar los parámetros y condiciones en las que fundamenta una red de combustible, cumpliendo con los requerimientos de calidad de los productos, eficiencia energética, minimización de daños producidos por alta temperatura y reduciendo las emisiones de contaminantes.

Teniendo en cuenta los resultados del indicador de eco-eficiencia, las restricciones ambientales y de seguridad del proceso, así como también las condiciones tecnológicas de las organizaciones, se diseñó la red combustible que permite el

aprovechamiento de las corrientes de proceso sin dañar el medio ambiente y comprometer la seguridad operacional.

En cada etapa aparecen las herramientas básicas para incluir o descartar las corrientes de proceso en la red combustible y formar las mezclas que deben ser evaluadas para la toma de decisiones con base en el valor del indicador de eco-eficiencia obtenido, los resultados para cada fase se encuentran en el anexo G.

La primera fase corresponde a la identificación de las corrientes de proceso y el análisis estadístico para determinar disponibilidad en cuanto a cantidad y calidad de las corrientes, esta fase da como resultado una clasificación de las corrientes en áreas y la tipificación de los componentes según la procedencia. En esta fase se pueden utilizar herramientas estadísticas comerciales como el software Statgraphics Centurion XV.11, Matlab o el desarrollo de macros en Excel para la determinación de límites de composición por componentes, porcentajes de participación de las corrientes aportantes y su influencia en la red de combustible.

La segunda fase para determinar la logística de la red de combustible clasifica las corrientes teniendo en cuenta los datos de composición, la evaluación del peso molecular, la densidad y el poder calorífico de cada una de las corrientes. El cálculo de las propiedades se realiza con las ecuaciones herramientas descritas en los capítulos anteriores.

En la tercera fase se determinan rangos de mezclas y sus propiedades evaluando el índice de Wobbe y el número de metanos, esta evaluación se hace con herramientas desarrolladas mediante programación para la solución de las ecuaciones variando la composición de la mezcla, como las desarrolladas por Cala, Gómez y Carreño [98, 99, 174].

Una vez establecidas las propiedades de las mezclas en los aspectos energéticos, ambiental y de seguridad de procesos, se determina de manera integral, el grado

de eco-eficiencia de las mezclas y su aplicabilidad, mediante la evaluación del indicador de eco-eficiencia desarrollado por lógica difusa.

Como resultado de la implementación de cada una de las etapas y sus procedimientos de cálculo se identifican las corrientes con óptimas condiciones para ser sometidas a combustión o las que deben ser almacenadas, reprocesadas o sometidas a tratamientos adicionales para su posterior aprovechamiento.

En concordancia con las fases anteriormente descritas, cada organización puede implementar las siguientes acciones de monitoreo en el sistema de gestión de energía:

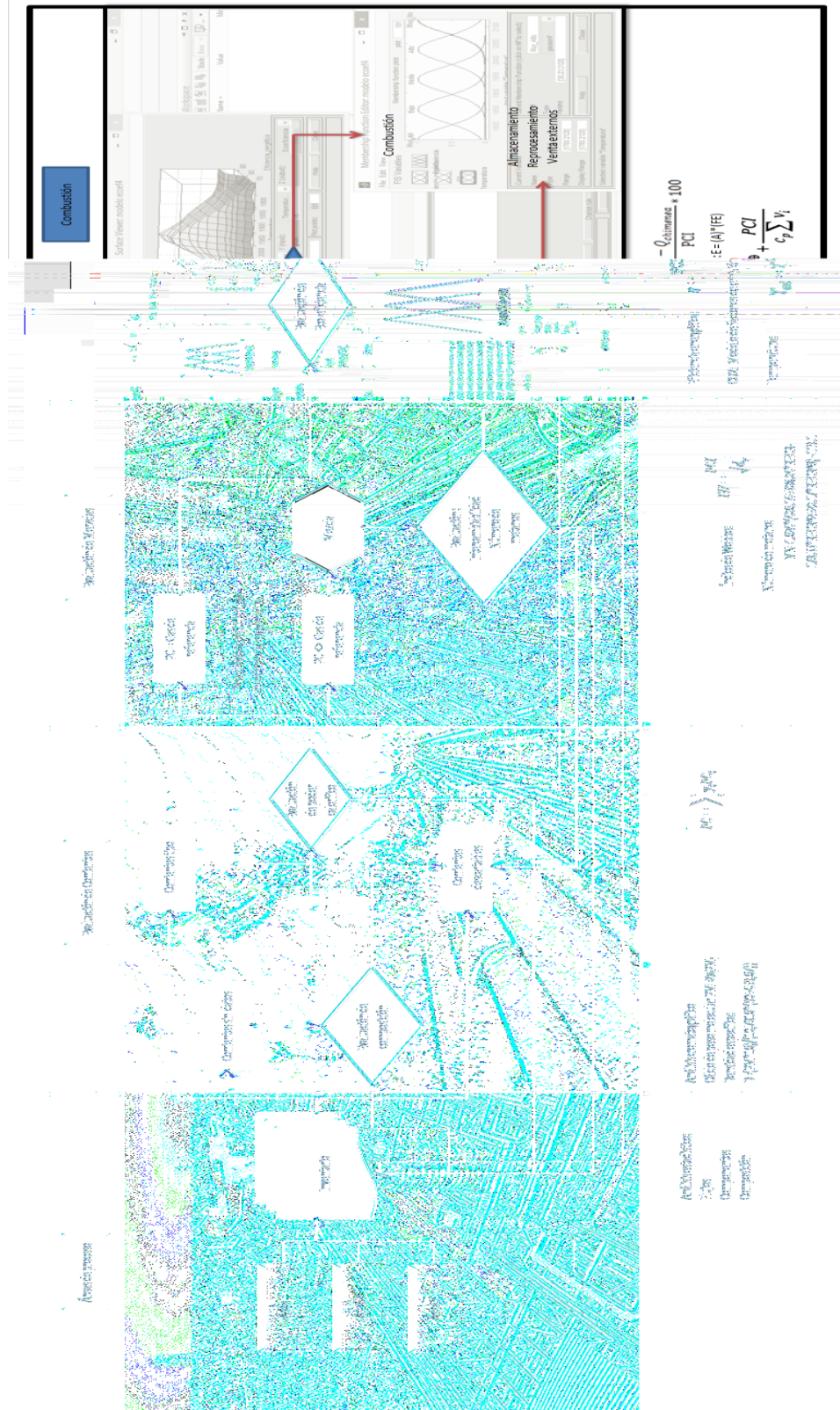
- Instalación de aplicaciones “en línea” para que el operador disponga de medidas de los efectos de las mezclas en la red combustible.
- Balances de materia y energía por tipo de combustible.
- Evolución de índices de consumo de combustible y seguimiento de tendencias de consumo.
- Evaluación periódica de los indicadores de eficiencia energética y eco-eficiencia de las mezclas de gases combustibles.
- Comparación de índices de consumo de organizaciones similares.
- Seguimiento de utilización de aplicaciones de control de procesos.

Las herramientas establecidas para la gestión son:

- Herramientas de seguimiento a desvíos de gas a la red de combustible.
- Herramienta para el inventario de gas combustible
- Seguimiento a emisiones
- Plan de gestión de calidad del aire
- Plan de documentación y registro de todos los casos para la conformación del banco de buenas prácticas de combustión.

El diagrama general para el diseño de la red de combustible se muestra en la figura 43.

Figura 43. Diagrama general para el diseño de la red de combustible.



La implementación de la metodología para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión permite tener una lista de chequeo rápida del uso eficiente del gas combustible, los principales resultados son:

1. Identifica la magnitud y el alcance del aprovechamiento del gas de proceso que puede obtenerse en la empresa.
2. Identifica y prepara los equipos y el personal clave de la empresa para reducir los costos energéticos mediante el aprovechamiento de gas de proceso.
3. Genera las bases cuantitativas y cualitativas para establecer la política, los objetivos y las metas en el uso del gas natural y las corrientes de proceso de la empresa.
4. Permite el control y el análisis de las causas de las variaciones en el consumo de gas y los costos energéticos asociados al mantenimiento de equipos.
5. Identifica y justifica el orden en que deben implementarse los proyectos de baja, media o alta inversión para reducir los costos energéticos de la empresa en forma rentable.
6. Identifica, establece y mantiene el desarrollo de buenas prácticas de operación y mantenimiento de los equipos y procesos que usan gas combustible.
7. Identifica, establece y mantiene un programa adecuado de conservación de los equipos de medición y control vitales para el uso eficiente de la energía.
8. Eleva y mantiene el nivel de cultura operacional, tecnológica y energética de la organización.
9. Establece la estructura técnico-organizativa necesaria para mantener el uso eficiente del gas natural y las mezclas combustibles.
10. Permite una planificación de consumos y de eficiencia en el uso del gas combustible basada en un ciclo de mejora continua.
11. Elimina la posibilidad de improvisación en la compra y manejo del gas natural y corrientes combustibles de proceso.

12. Reduce y controla el impacto ambiental del uso de la energía en la empresa.
13. Establece métodos para introducir o actualizar y mantener la vigilancia tecnológica y la innovación dirigida a la eficiencia energética de los procesos.
14. Incorpora a la gestión organizacional interna y externa los elementos necesarios para el manejo integral eficiente de la energía en la empresa.

## **6.5 CONCLUSIONES**

Un indicador de eco-eficiencia que integra los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad operacional fue determinado mediante el uso de lógica difusa. Se utilizaron la eficiencia energética, las emisiones de CO<sub>2</sub> equivalente y la temperatura para cada uno de los aspectos antes mencionados, los cuales al evaluarse en 5 niveles dan como resultado 125 reglas de conocimiento aplicadas a procesos petroquímicos.

La utilización de soporte informático para el análisis de procesos e indicadores de combustión, en este caso, específicamente MATLAB y su toolbox fuzzy logic facilitan el procesamiento de datos, la operacionalización de las variables e indicadores y la comprensión de las interrelaciones entre las variables principales de eco-eficiencia definidas para este proceso.

Los resultados de la evaluación del indicador de eco-eficiencia presentan un valor máximo teórico de 77,5%, integrando mezclas con valores altos de eficiencia energética (alrededor de 90%-95%) Valores entre muy bajos y medios de emisiones de CO<sub>2</sub> equivalente (alrededor de 9%-10%) y temperatura alta (Cercano a 2026°C). El indicador de eco-eficiencia presenta valores cercanos al máximo para mezclas que incluyan hidrocarburos ligeros; cuando se incluyen butano o pentano, la eco-eficiencia disminuye debido a las altas temperaturas que se pueden presentar por la presencia de estos hidrocarburos en la mezcla (Temperaturas mayores a 2100 °C). Para mantener niveles óptimos del indicador

de eco-eficiencia se espera que el contenido de butano o pentano no supere el 5% en la mezcla.

El diseño de la red de combustible está basado en procedimientos de evaluación preventiva, seguimiento y monitoreo de la eficiencia energética y los impactos ambientales, los cuales están especificados en cada una de las etapas de la metodología diseñada para la lograr la combustión eco-eficiente y segura de mezclas de gases.

La metodología para lograr la combustión eco-eficiente y segura fue validada diseñando una red de combustibles utilizando datos del proceso de refinación del petróleo de Ecopetrol S.A.; en los resultados se aprecia que aunque en la planta industrial existen unas 84 corrientes que son comúnmente desviadas a la red combustible, 15 son descartables por su poder calorífico, 31 son descartadas por problemas de intercambiabilidad y de las corrientes restantes, solo 4 mezclas cumplen con criterios de eco-eficiencia. Estas corrientes alcanzan un valor entre 65% y 70%, demostrando la importancia de la evaluación integral de las mezclas utilizadas para combustión y su incidencia.

## 7. CONCLUSIONES GENERALES

La metodología para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión de mezclas gases se diseñó con una estructura que sigue el ciclo de mejoramiento continuo PHVA; esta metodología se basa en el cálculo de las propiedades fisicoquímicas, termodinámicas, las ecuaciones del transporte de masa, energía y momentum para las mezclas de gases industriales, buscando con ello la toma de decisiones basada en criterios energéticos, ambientales y de integridad de equipos.

La implementación de la metodología diseñada permite el análisis de problemas particulares en el uso de gases combustibles, teniendo en cuenta el tipo de industria y sus requerimientos energéticos, los cambios tecnológicos y la implementación de mejoras que impactan directamente en los costos de operación y mantenimiento en una organización.

La etapa inicial de la implementación de la metodología diseñada, parte de la vigilancia tecnológica, donde a partir del análisis de artículos y patentes se demuestra como una tendencia el estudio de los procesos de combustión desde la perspectiva ambiental, energética y de seguridad; además, se aprecia la integración de herramientas computacionales para el análisis y solución de problemas. En esta etapa se desarrolla igualmente la caracterización de las mezclas de gases que integran la red de combustible y la evaluación integral de los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad de acuerdo al modelo de combustión apropiado según el tipo de gases. La caracterización y evaluación del proceso de combustión corresponden a las etapas Planear y Hacer.

De acuerdo a las actividades establecidas en la metodología diseñada, se realizó la caracterización fisicoquímica de las mezclas de gases que constituyen la red de combustible en una refinería, determinando un intervalo de poder calorífico y emisiones de contaminantes para las mezclas estadísticamente probables y

posibles; los datos fueron obtenidos mediante análisis estadístico de datos históricos y simulación computacional.

Con los datos obtenidos de la etapa planear se realizó la evaluación experimentalmente de la temperatura, la composición química de las emisiones ambientales y la velocidad del frente de llama de mezclas combustibles para procesos de refinación. Para la evaluación del proceso de combustión se realizó un diseño experimental teniendo como variables la composición de las mezclas combustibles y la relación de equivalencia. Los resultados permitieron seleccionar el modelo de combustión para hidrocarburos ligeros propuesto por Kee [114] como el modelo apropiado para describir el objeto de estudio analizado, el cual es presentado en el capítulo 5.

Para la etapa Verificar se determinó el índice de eco-eficiencia que integra los aspectos energético, ambiental y de seguridad operacional, haciendo uso de la lógica difusa. Complementando las herramientas para el monitoreo y control del proceso de combustión, se establecieron los procedimientos correspondientes a la etapa Actuar, los cuales permiten realizar la mejora continua en el proceso de combustión de una organización.

La metodología elaborada permitió diseñar la red de combustibles bajo criterios de eco-eficiencia: eficiencia energética, reducción de emisiones contaminantes e seguridad de equipos (minimización de daños producidos por alta temperatura), para un proceso de combustión desarrollado en una refinería, donde se evaluaron 84 corrientes de proceso aplicando cada una de las herramientas y procedimientos definidos en las fases y etapas, con lo cual se validó la metodología para la gestión eco-eficiente y segura.

## **8. NOVEDAD CIENTÍFICA**

Los productos de esta investigación están direccionados al cumplimiento de los objetivos propuestos y se pueden clasificar en tres categorías: generación de nuevo conocimiento o desarrollo tecnológico, fortalecimiento de la capacidad científica tecnológica y apropiación social de conocimiento, a continuación se mostrarán los productos en cada una de las categorías:

### **8.1. Generación de nuevo conocimiento o desarrollo tecnológico**

La integración de los aspectos energéticos, ambientales y la seguridad operacional, basados en la caracterización y evaluación del proceso de combustión para gases generados en el proceso de refinación del petróleo, permitió diseñar una metodología para la gestión eco-eficiente y segura de la combustión, la cual incluye un modelo de combustión y herramientas y procedimientos para el monitoreo y control.

La metodología diseñada permite hacer el seguimiento al proceso de combustión basado en el ciclo de mejora continua de la norma ISO 50001, con las siguientes herramientas diseñadas en esta investigación:

- Modelo de combustión que describe el comportamiento de las mezclas de gases combustibles generadas en procesos químicos.
- Indicador de eco-eficiencia para el monitoreo integral de los aspectos energéticos, ambientales y de seguridad de la combustión.
- Procedimientos para la gestión eficiente de la combustión teniendo en cuenta los parámetros operacionales.

### **8.2. Fortalecimiento de la capacidad científica y tecnológica:**

El desarrollo de esta investigación fomentó las relaciones universidad – empresa – estado en la medida en que participaron las siguientes entidades:

- Universidad Industrial de Santander
- Universidad Sapienza de Roma (Italia)
- Universidad Técnica Federico Santa María (Chile).
- Instituto Colombiano del Petróleo – ECOPETROL
- COLCIENCIAS (como financiador del programa )

Los productos son la formación de un doctor en Ingeniería Química, un magister en Ingeniería Química, una magister en Química ambiental y dos Ingenieras Químicas.

### **8.3. Apropiación social de conocimiento**

El indicador para la apropiación social del conocimiento se basa en el número de publicaciones científicas publicadas a partir de los resultados de la investigación. A continuación se indican los artículos y trabajos presentados en eventos científicos.

- Computer aided evaluation of eco-efficiency of refinery combustion process. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov. Chemical Engineering Transactions. Vol 32. p. 217 – 222. ISSN 1974-9791.
- Determination of the gas composition effect in carbon dioxide emission at refinery furnaces. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov. Chemical Engineering Transactions Vol 35, p. 1357-1362. ISSN 1974-9791.
- Evaluation of combustion models for efficiency of refinery furnaces. J. Saavedra, O. Cala, V. Kafarov, L. Meriño. Revista Ingenierías Universidad de Medellín, vol. 12, No. 23 pp. 101-112 - ISSN 1692-3324 - julio-diciembre de 2013/184 p. Medellín, Colombia. Indexado en Publindex Categoría A2.

- Optimización de la combustión utilizando como criterios de evaluación el índice de wobbe y el número de metano. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, María Gómez, Viatcheslav Kafarov. Revista ITECKNE. Vol. 11 Número 1, 2014 p. 76. Indexada en Publindex Categoría B.
- Influence of fuel mixtures and biomass on efficiency and safety in combustion process. Viatcheslav Kafarov, Lourdes Meriño, Jaqueline Saavedra, Antonio Zorro. Chemical Engineering Transactions. Vol. 38, 2014. p. 73 - 78.
- Combustion Optimization using Methane Number and Wobbe Index as Evaluation Criteria. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Maria Gómez, Viatcheslav Kafarov. Chemical Engineering Transactions. Vol. 39, 2014. ISSN 2283-9216. p. 1231.

Trabajos presentados en eventos científicos:

- Análisis de tecnologías ambientalmente eficientes para procesos de combustión mediante mapas tecnológicos de patentes. Autores: Jaqueline Saavedra, Lourdes Meriño, Viatcheslav Kafarov. XII seminario internacional del medio ambiente y desarrollo sostenible. Bucaramanga - Colombia. 2011.
- Análisis de mezclas combustibles producidas en procesos de refinación. Jaqueline Saavedra. Instituto colombiano del petróleo. Ecopetrol, Lourdes Meriño, Daniel Montaña, Viatcheslav Kafarov. V Simposio sobre biofábricas y I Congreso de flujos reactivos. Medellín – Colombia 2011.
- Characterization of fuel mixtures produced and used in the petroleum refining process. Jaqueline Saavedra, Lourdes Meriño, Viatcheslav Kafarov, Daniel Montaña. 12th mediterranean congress of chemical engineering. Barcelona - España. November 15-18th 2011.

- Vigilancia tecnológica de procesos de combustión ecoeficientes mediante mapas tecnológicos de patentes. Jaqueline Saavedra, Lourdes Meriño, Viatcheslav Kafarov. XXVI Congreso Colombiano de Ingeniería Química “energía y desarrollo sostenible”, 21 al 23 de septiembre de 2011. Barrancabermeja - Colombia.
- Vigilancia tecnológica de la aplicación de espectrografía de Raman para la evaluación de daños en hornos. Lourdes Meriño, Viatcheslav Kafarov, Jaqueline Saavedra. Latin American Seminar Of Analysis By X-Ray Techniques (SARX 2012). Noviembre 18 – 23, 2012. Santa Marta, Colombia.
- Análisis de tendencias tecnológicas para el proceso de combustión ecoeficiente. Jaqueline Saavedra, Lourdes Meriño, Viatcheslav Kafarov. V Congreso Internacional de Ciencia y Tecnología de los Biocombustibles – CIBSCOL 2012, 5 al 8 de Junio de 2012. Bucaramanga, Colombia.
- Mechanism of damage by high temperature of the tubes, exposed to the atmosphere characteristic of a furnace of pyrolysis of ethane for ethylene production in the petrochemical industry. Jaqueline Saavedra, Lourdes Meriño Juan Amezcua, Francisco Pérez, Harbey Escobar, Luis Navas. 25<sup>th</sup> ECOS, 26 - 29 Junio 2012. Perugia – Italia. ISBN 978-88-6655-322-9.
- Computer aided evaluation of eco-efficiency of refinery combustion process. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov. ICheAp 11. 2-5 de Junio 2013. Milan – Italia.
- Determination of the gas composition effect in carbon dioxide emission at refinery furnaces. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov. PRES 2013. 29 Septiembre – 2 Octubre de 2013. Rhode – Grecia.
- Evaluación de emisiones de CO<sub>2</sub> y potencial energético de corrientes de gases en procesos de refinación. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino,

Viatcheslav Kafarov. SIMADS 2013. 6 -8 de Noviembre. Bucaramanga – Colombia.

- Efecto del uso del gas de refinera sobre la eficiencia energetica y las emisiones de dióxido de carbono en el proceso de combustión. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Viatcheslav Kafarov, Oscar Cala. SIMADS 2013. 6 -8 de Noviembre. Bucaramanga – Colombia.
- Aplicación del concepto de red de gases combustibles para la adecuación de gases combustibles provenientes de procesos termoquímicos en biorefinerías. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, María Gómez, Viatcheslav Kafarov. CIBSCOL 2014, Del 18 Al 21 de Marzo, Cartagena – Colombia.
- Influence of fuel mixtures and biomass on efficiency and safety in combustion process. Viatcheslav Kafarov, Lourdes Meriño, Jaqueline Saavedra, Antonio Zuorro. IBIC 2014. 8 – 11 de Junio Rome – Italia.
- Combustion optimization using methane number and wobble index as evaluation criteria. Jaqueline Saavedra, Lourdes Merino, Maria Gómez, Viatcheslav Kafarov. PRES 2014. 23 – 27 Agosto, Praga – República Checa.
- Effect of the variability of the composition of the fuel gas on the methane number at furnaces at refinery. SDEWES 2014. September 20 - 27, 2014, Venice-Istanbul.

## BIBLIOGRAFÍA

Acevedo Alvarez, C. A., 2003, Estudio sobre la influencia de la composición química de los principales gases naturales colombianos sobre el rendimiento de la conversión y el desempeño mecánico de los motores a gas en Colombia. Trabajo de grado Especialización en combustibles gaseosos. Universidad de Antioquia. Disponible en: <http://bibliotecadigital.udea.edu.co/dspace/bitstream/10495/61/1/EstudioInfluenciaComposicionQuimicaGasesnaturales.pdf>. Consultado en: Febrero 20 de 2015.

Agencia Chilena de eficiencia energética, 2012, Guía de implementación sistema de gestión de la energía basado en la ISO 50001, Santiago de Chile.

Alfradique, M.F. and Castier, M., 2007, Calculation of Phase Equilibrium of Natural Gases with the Peng-Robinson and PC-SAFT Equations of State. *Oil & Gas Science and Technology – Rev. Institut français du pétrole*, Vol. 62, No. 5, 707-714.

Amell A., 1996, Tecnología de la Combustión de Gases y Quemadores Atmosféricos de Premezcla. Medellín, Antioquia, Colombia: Universidad de Antioquia.

American Gas Association (AGA). <http://www.aga.org/our-issues/Pages/default.aspx>.

American Gas Association, 1994, Interchangeability, Chapter 2, Utilization: Book U-1, Residential/Commercial, Gas Engineering and Operations Series, Arlington VA.

American Gas Association. AGA. Interchangeability of Other Fuel Gases with Natural Gases. Research Bulletin #36.

Angulo, G. Meriño, L. Sepulveda, J. Charris, M., 2008, Diseño de un plan de transferencia de tecnologías en generación de energías para el departamento del Atlántico. Memorias I congreso internacional de gestión tecnológica e innovación, Universidad Nacional Bogotá.

Angulo, J. Meriño, L. Sepulveda, J., 2007, Metodología para la elaboración de mapas tecnológicos aplicado a celdas de combustible. Revista Teknos. 2007

Arango-Serna M., Serna Duran C., Pérez-Ortega G., 2012, La gestión de indicadores empresariales con lógica difusa para la toma de decisiones, Revista digital L'ampsakos, Número 8. Disponible en: <http://www.funlam.edu.co/revistas/index.php/lampsakos/article/view/678>. Consultado en Agosto 2014.

Araus K., Reyes F., Toledo M., 2014, Syngas production from wood pellet using filtration combustion of lean natural gas - air mixtures. International journal of hydrogen energy 39, 7819 – 7825.

Araya R., Araus K., Utria, K., Toledo M., 2014, Optimization of hydrogen production by filtration combustion of natural gas by water addition, International Journal of Hydrogen Energy 39, 7338 -7345.

Aspen HYSYS – ASPEN TECH. ASPEN TECHNOLOGY (2011). Tutorial and Application-Version Number 7.2. Inc. Cambridge, MA 02141-2201. USA.

Barbosa de Alencar D., Cabral Leite J., De Souza Silva C., Santos M., Sousa W., Simões S., Aplicación de la lógica difusa para la evaluación de rendimiento del desarrollo de proyectos de dispositivos y equipos para la producción industrial. Universidad del Norte. Barranquilla. [http://www.itegam.org.br/upload/pdf/david\\_upadi.pdf](http://www.itegam.org.br/upload/pdf/david_upadi.pdf). Consultado en Septiembre de 2014.

Battin-Leclerc F., 2008, Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates Progress in Energy and Combustion Science 34 440–498.

Baukal, Ch. E., Hong, Jr. J., Waibel, R. T., 2007, Bussman, W., Controlling Emissions During Cold Furnace Startup. John Zink Co. [www.aiche.org/cep](http://www.aiche.org/cep). Environmental Management, 42 -26.

Bell H. S. Tecnología del Gas Natural Ed. Diana 1959.

Bendick, W.; Haarman, K.; Ullmann, K. and Zschau, M. 1994, Use of P91 in Europe and overseas, ASME Joint International Power Generation Conference, Phoenix-AZ, 1-6.

Blasiak, W. N., 2004, Evaluation of New Combustion Technologies for CO<sub>2</sub> and NO<sub>x</sub> Reduction in Steel Industries. Air Pollution XII , 761 - 771.

Blevins L.G., Renfro M.W., Lyle K.H., Laurendeau H.M., Gore J.P., 1999, Experimental study of temperature and CH radical location in partially premixed CH<sub>4</sub>/air coflow flames, Combustion and Flame 118, 684 – 696

Borroto A., Lapido M., Monteagudo J., De Armas M., Montesinos M., Delgado J., Padrón A., Viego P., González F., 2005, La gestión energética: una alternativa eficaz para mejorar la competitividad empresarial Revista: Energética 33.

Cala, O., Meriño L., Kafarov V., Saavedra J., Efecto de la composición del gas de refinería sobre las características del proceso de combustión, Revista Ingenierías Universidad de Medellín, vol. 12, No. 23 pp. 101 - 112 Julio 2013, Medellín, Colombia.

Cala. O. Determinación de índices para la gestión de los procesos de combustión de los gases de refinería. Tesis de Maestría en Ingeniería Química UIS, 2014.

Campos J., Gómez R. y Leonardo Santos Macías, 1998, Eficiencia Energética y Competitividad de Empresas. Editorial UCF.80.

Campos J., Lora E., Quispe E., Prias O., Meriño L., Tovar I., Navarro A., Vidal J., Castrillón R., López Y., 2007, Guía para la implementación de sistemas de gestión integral de la energía. <http://www.si3ea.gov.co/Portals/0/Gie/Guia/Guia.pdf>. Consultado en Noviembre 2014.

Cardu M., Baica M., 1999, Regarding a global methodology to estimate the energy ecologic efficiency of thermopower plants, *Energy Conversion and Management* 40, 71–87.

Carreño A. Desarrollo de un modelo predictivo para determinar las mezclas óptimas de combustibles gaseosos utilizados en hornos de craqueo térmico para la disminución de gases de efecto invernadero (GEI). Trabajo de grado de maestría de química ambiental. Universidad Industrial de Santander. 2014.

Charris, M. Becerra, L. Angulo, G. Camacho, J., 2010, Identificación de socios estratégicos: metodologías basadas en redes sociales e informetría. VIII Congreso iberoamericano de indicadores de ciencia y tecnología. España.

Chiminelli A., 2007, Ecodiseño y ecoeficiencia en la maquinaria de construcción y obra pública (MOP), Departamento de Materiales, Instituto Tecnológico de Aragón, Libro “Estudio de Tendencias Tecnológicas en el Sector de Maquinaria de Obras Públicas, Construcción y Minería” publicado por la Asociación Nacional de Maquinaria de Obras Públicas, Construcción y Minería (ANMOPYC).

Choudhuri, A.R. and Gollahalli, S.R., 2003, Characteristics of hydrogen–hydrocarbon composite fuel turbulent jet flames. *International Journal of Hydrogen Energy* 28(4): p. 445-454.

Coakley T., Duffy N., Freiberger S., Houben J., Kern H., 2010, Energy efficiency in industry. *Intelligent Energy Europe*. Disponible en: [http://managenergy.net/iee\\_docs/IEE\\_07\\_828\\_IUSES\\_Handbook\\_Students\\_for\\_industry\\_ENG\\_wcover.pdf](http://managenergy.net/iee_docs/IEE_07_828_IUSES_Handbook_Students_for_industry_ENG_wcover.pdf). Consultado en 20 de febrero de 2015.

Comisión Nacional para el uso eficiente de la energía. Metodología para la cuantificación de emisiones de gases de efecto de invernadero y de consumos energéticos evitados por el aprovechamiento de la energía. Diciembre 2009. [http://www.conuee.gob.mx/work/files/metod\\_gei\\_cons\\_evit.pdf](http://www.conuee.gob.mx/work/files/metod_gei_cons_evit.pdf). Consultado en abril 2014.

Committee on Domestic Gas Research, 1944, Gas Burner Utilization All Air for Combustion as Primary Air, Research Bulletin No. 20, American Gas Association Testing Laboratories, Cleveland OH.

Corporación Andina de Fomento. Sostenibilidad ambiental y desempeño financiero. Cuatro casos de estudio de gerencia del valor en América Latina. [www.caf.com](http://www.caf.com).2002. Consultado en Marzo 2013.

Correa J., Borroto A., Alpha M., González R., Curbelo M., Díaz A., 2014, Diseño y aplicación de un procedimiento para la planificación energética según la NC-ISO 50001:2011. Ingeniería Energética. vol.35. No.1.

Cortés, J.; Hernández, J., 2003, Validación de la intercambiabilidad de gases en el contexto colombiano: Calentadores Instantáneos de Agua. Trabajo de grado Especialización en gases combustibles. Universidad de Antioquia. 99-102.

Coward, H.F., Greenwald, H.P., 1928, Propagation of Flame in Mixtures of Natural Gas and Air, Bureau of Mines, Department of Commerce, Washington DC.

Cox RA, Cole JA., 1985, Chemical aspects of autoignition of hydrocarbon–air mixtures. Combust Flame; 60:109–23.

De Arenas, L., 1993, Indicadores de la actividad científica, Ciencias de la Información 24 (1): 2-6.

Del Brío, B. Sanz, A., 2002, Redes neuronales y sistemas difusos. Alfa Omega – RA-MA. México.

Delbourg, P., 1969 L'interchangeabilité des combustibles gazeux. Annales de Mines, 49.

Delbourg, P., 1969, L'interchangeabilité des combustibles gazeux. Annales des mines. Etudes et Techniques nouvelles gaz de France , 40.

Desimone L., & Popoff S., 1997, Eco-efficiency: The business link to sustainable development. The World Business Council for Sustainable Development. MIT Press.

Díaz Cadavid. A., 2009, Diseño estadístico de experimentos. Editorial Universidad de Antioquia. Segunda edición.

Dow Jones Sustainability Indexes. <http://www.djindexes.com/sustainability>  
Consultado en abril 2014.

Dumitras, A., Moschytz, G., 2007, Understanding Fuzzy Logic: An Interview with Lotfi Zadeh. IEEE Signal Processing Magazine, Vol. 24, Issue 3, 102-103.

Ecopetrol 2014. Informe termografico de la tubería de radiación y choque del horno H 2002 IT-14-11-08. Héctor Fabián Reyes/ Jorge Carreño / Jose Luis Velazquez30 de junio de 2014.

ECOPETROL, Reporte de sostenibilidad 2010.

El-Mahallawy, F., El-Din Habik S., 2002, Fundamentals and technology of combustion. Elsevier.

Ennis, C.J., Botros, K.K., 2009, On the Difference between US Example Supply Gases, European Limit Gases, and their Respective Interchangeability Indices. NOVA Chemicals Research & Technology Centre and D. Engler TransCanada. AGA – Operations Conference & Biennial Exhibition. Pennsylvania.

Environmental Protection Agency, 2011, Sustainability and the U.S. EPA. Committee on Incorporating Sustainability in the U.S.; National Research Council. The National Academies Press.

Estrada Jr. A.B., 1996, The Effect of Gas Composition on Residential Appliance Burner Performance, Symposium Paper, Natural Gas Quality & Energy Measurement, Institute of Gas Technology.

Expósito, J. Fernández, A., 2002, La productividad de la investigación sobre evaluación de programas educativos españoles 1975-2000. Revista de investigación educativa. Vol. 20. No. 1, 113-129. Disponible en: <http://revistas.um.es/rie/article/viewFile/97531/93591>. Consultado en: Abril 1 de 2014.

Faruque. M., Kamiri, I., Cory M., 2011, Preliminary synthesis of fuel gas networks to conserve energy and preserve the environment, Industrial and engineering chemistry research, 50 (12), 7414–7427.

Fiksel J., Eason T., Frederickson H., A., 2012, Framework for Sustainability Indicators at EPA. National Risk Management Research Laboratory Office of Research and Development. U.S. Environmental Protection Agency, Disponible en: <http://www.epa.gov/sustainability/docs/framework-for-sustainability-indicators-at-epa.pdf>. Consultado en Septiembre de 2014.

Fired Steam Generators, Performance Test Code 4: 2008, ASME, NY, the U.S. standard since first released in 1998.

Fish A. Oxidation of organic compounds, vol. 2. Adv Chem Ser1968;76:69.

Fonseca, A., Tavares, M., Gomes, L., 2010, Burning clean fuel gas improves energetic efficiency. Energy Conversion and Management 51, 498–504.

Fundación BBVA, 2013, El inventor de la lógica difusa Lotfi Zadeh, Premio Fundación BBVA Fronteras del Conocimiento por hacer posible que ordenadores y

máquinas funcionen y decidan como los humanos, Disponible en: <http://www.fbbva.es/TLFU/tlfu/esp/noticias/fichanoticia/index.jsp?codigo=1000>.

Consultado en Agosto 2014.

Fundación Forum ambiental. Guía para la ecoeficiencia. Barcelona España. Disponible en: [www.forumambiental.org/pdf/guiacast](http://www.forumambiental.org/pdf/guiacast). Consultado abril 2012.

G. L. Borman, K. W. Ragland, 1996 Combustion Engineering, International Ed, The McGraw-Hill Companies, Inc.

Gómez A., Gómez E., Hernández G., Vargas A., Torres F., 2007, Formulación de lineamientos de política en materia de eficiencia energética en sectores clave de la economía mexicana para el programa especial de cambio climático. Instituto Nacional de Ecología. México.

Gómez E., Sánchez M., Jaramillo J., 2009, Cinética de la Combustión Sin Llama de Gas Natural sobre CaOMgO. Información tecnológica. Vol. 20(4), 63-74.

Halchuck, R. A., 2003, Gas Quality Specifications Ensure Interchangeability For End Users. Gas Quality Engineer, Xcel Energy, Denver, CO. Pipeline & Gas Journal. Consultado en: [www.pipelineandgasjournal.com](http://www.pipelineandgasjournal.com). En Junio 2012.

Halchuk R.A., 2001, Gas Quality Specification and Interchangeability for End Use Applications, Conference Paper, Operations Conference, American Gas Association, Dallas TX.

Halchuk R.A., 2001, Gas Quality Specification and Interchangeability for End Use Applications," Conference Paper, Operations Conference, American Gas Association.

Halchuk, R.A., 1996, Btu Stabilization: To Air is Natural. Natural Gas Quality & Energy Measurement, Institute of Gas Technology, Gas Line service of Gas Technology Institute, Des Plaines.

Halchuk-Harrington, R. and Wilson, R., 2006. American Gas Association Bulletin #36 and Weaver Interchangeability Methods: Yesterday's Research and Today's Challenges. AGA Operations Conference, Washington, D.C.

Hsieh, S.C., and Jou, C.J.G. 2007, Reduction of greenhouse gas emission on a medium-pressure boiler through hydrogen-rich fuel control, Applied Thermal Engineering, 27, 2924 – 2928.

Hu, J.L., Kao, C.H., 2007, Efficient energy-saving targets for APEC economies. Energy Policy, 35: 373–382.

Hunters T.B., Litzinger T.A., Wang H., Frenklach M., 1996, Ethane oxidation at elevated pressures in the intermediate temperature regime: experiments and modeling. Combustion and Flame, 104:505–23.

Instituto de carboquímica. Grupo de combustión y gasificación. Disponible en: [www.icb.csic.es/fileadmin/grupos/CombustionGasificacion/combustionGasificacion](http://www.icb.csic.es/fileadmin/grupos/CombustionGasificacion/combustionGasificacion).

Internacional Energy Agency, 2010, Perspectivas sobre tecnologías energéticas: Escenarios y estrategias hasta el año 2050. [www.iea.org](http://www.iea.org). Consultado en noviembre 2012.

International Gas Union. Guidebook to Gas Interchangeability and Gas Quality. 2010.

Jakobiak F., 1992, Exemples commentés de veille technologique. Les Editions d'Organisation.

Jang, J. S. R.; Gulley, N., 1995, Fuzzy Logic Toolbox User's Guide. The Math Works Inc.

Johnson, F., and Rue, D. M., 2003, Gas Interchangeability Tests-Evaluating the Range of Interchangeability of Vaporized LNG and Natural Gas, GRI-03/0159, Gas Research Institute, Des Plaines IL.

Jou, C.-J.G., Lee C., Tsai Ch., Wang H., 2007, Reduction of Energy Cost and CO<sub>2</sub> Emission for the Boilers in a Full-Scale Refinery Plant by Adding Waste Hydrogen-Rich Fuel Gas. *Energy & Fuels* 22(1): p. 564-569.

Jou, CJG., Lee, CL., Tsai, CH., Wang, HP., 2008, Enhancing the performance of a high-pressure cogeneration boiler with waste hydrogen-rich fuel. *International Journal Hydrogen Energy*, 33: 5806–5810.

Julia Fernández Martín, 2010, Estudio del mecanismo químico reducido en llamas de premezcla rica de hidrógeno-aire. Proyecto fin de carrera, Universidad Carlos III de Madrid, Departamento de energía térmica y de fluidos, Madrid, España.

Kee RJ, Rupley FM, Miller JA, Coltrin ME, Grcar JF, Meeks E, Moffat, HK, Lutz AE, Lewis DG, Smooke MD, Warnatz J, Evans GH, Larson RS, Mitchell RE, Petzold LR, Reynolds WC, Caracotsios M, Stewart WE, Glarborg P, Wang C, McLellan CL, Adigun O, Houf WG, Chou CP, Miller SF, Ho P, Young PD, Young DJ, Hodgson DW, Petrova MV, Puduppakkam KV., 2007, CHEMKIN Release 4.1.1, Reaction Design, San Diego, CA.

Kennedy L., Bingue J., Saveliev A., Fridman A., Foutko S., 2000, Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions. *Proceedings of the Combustion Institute* Vol. 28, Issue 1, 1431–1438.

Klimstra J, Hernández AB, Bowman WH, Gerard A, Karll B, Quinto V, Roberts GH, Schollmeyer HJ., 1999, Classification methods for the knock resistance of gaseous fuels: an attempt towards unification. *Fall Tech Conf ASME*, No. 99-ICE-214, 33 (1):127–37.

Knox JH. In: Ashmore PG, Sugden TM, Dainton FS, editors. *Photochemistry and reaction kinetics*. Cambridge: Cambridge University Press; 1967.

Ko, YC., Lin, TH., 2003, Emissions and efficiency of a domestic gas stove burning natural gases with various compositions. *Energy Conversion and Management* 44, 3001–3014.

Laboratorio de Investigación en Tecnologías de la Combustión.  
<http://www.litec.csic.es/actividades.html>.

Larson, D. and Scott, M., 1973, The Combustion Interchangeability of Natural and Substitute Gases. Institute of Gas Technology, Chicago, Illinois. En: Society of Petroleum Engineers of AIME.

Leal, L. A., 2011, Visión de Ecopetrol frente al cambio climático. Seminario Responsabilidad social y cambio climático. Bogotá.

Lee, CL., Hou, SS., Lee, WJ., Jou, CJ., 2010, Improving cost-effectiveness for the furnace in a full-scale refinery plant with reuse of waste tail gas fuel, *International Journal of Hydrogen Energy* 35, 1797-1802.

Lee, CL., Jou, CJG., Tai, HS., Wang, CH., Hsieh, SC., Wang, HP., 2006, Reduction of nitrogen oxides emissions of a medium-pressure boiler through fuel control. *Aerosol Air Qual Res*, 6(2):123–33.

Lesca, H. *Veille stratégique*, 1994, l'intelligence de l'entreprise. Aster, Gières.

Lou H., Chen D., Martin C., Li X., Kyuen Li, Vaid H., Kumar A., Singh K., 2012, Validation of a reduced combustion mechanism for light hydrocarbons *Clean Techn Environ Policy* 14: 737–748.

Loubar, K., Rahmouni, C., Le Corre, O., Tazerout, M. A., 2007, combustionless determination method for combustion properties of natural gases. *Fuel* Volume 86, Issue 16, 2535–2544.

Lunghi, P., Burzacca, R., 2004, Energy recovery from industrial waste of a confectionery plant by means of BIGFC plant. *Energy*, 29: 2601–2617.

Martínez I., 2009, Termodinámica básica y aplicada. Universidad Politécnica de Madrid. Madrid.

Mastral, A., M., Murillo, R., García, T., Navarro, M., V., Callen, M., S., López, J., M., 2002, Study of the viability of the process for hydrogen recovery from old tyre oils, *Fuel Processing Technology* 75, 185–199.

Mathworks. <http://www.mathworks.it/help/fuzzy/what-is-mamdani-type-fuzzy-inference.html>. Consultado en Septiembre de 2014.

Matthes S., Covino B., Bullard J., Ziomek-Moroz M., Holcomb G., 2006, Determining the Cause of a Header Failure in a Natural Gas Production Facility. Department of Energy National Energy Technology Laboratory.

Matthes, B. S. Covino, Jr., S. J. Bullard, M. Ziomek-Moroz, and G.R. Holcomb, 2011, Determining the Cause of a Header Failure in a Natural Gas Production Facility S. A. Department of Energy National Energy Technology Laboratory Albany U. S. Disponible en: [www.osti.gov/scitech/servlets/purl/913151/](http://www.osti.gov/scitech/servlets/purl/913151/)

Miller J., Kee R., 1990, Chemical kinetics and combustion modeling, Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, California. *Annual Review of Physical Chemistry*, Vol. 41: 345-387.

Miller JA, Smooke MD, Green RM, Kee RJ., 1983, Kinetic modelling of the oxidation of ammonia in flames. *Combust Sci Technol.* 34:149–176.

Monika Zajemska, Dorota Musiał and Anna Poskart, 2014, Application of CHEMKIN and COMSOL Programs in the Calculations of Chemical Composition of Natural Gas Combustion Products. *Combustion Science and Technology*. Volume 186, Issue 2, 153-172.

Montaña, D., 2011, Determinación de las propiedades de combustión e identificación de problemas de intercambiabilidad de las mezclas de gas natural

con otros combustibles de refinería. Tesis de maestría en ingeniería química. Universidad Industrial de Santander.

Montgomery, D., 2004, Diseño y análisis de experimentos, Segunda edición, Limusa Wiley. México.

Muller C.J, Craig I.K., and Ricker N.L., 2014, Modelling, validation, and control of an industrial fuel gas blending system.

Nabi, MN., 2010, Theoretical investigation of engine thermal efficiency, adiabatic flame temperature, NOx emission and combustion-related parameters for different oxygenated fuels. Applied Thermal Engineering 30, 839–844.

Nardini, M. L., 2004, Eficiencia Energética y Gases de Efecto Invernadero. Mejoras Ambientales – EcoEficiencia, DOW/PBBPolisur S.A. Bahía Blanca Argentina.

Nash, K., Craig R. A., Angeler, D., Barichievy, C., Eason, T., Garmestani, A., Graham, N., Granholm, D., Knutson, M., Nelson, R., Nyström, M., Stow, C., Sundstrom, D., 2014, Discontinuities, cross-scale patterns and the organization of ecosystems. Journal Ecology, Vol. 95 Issue 3, 654 – 667.

Novo, M. y Bautista, M., 2012, Análisis de la incidencia de la educación ambiental para el desarrollo sostenible en las revistas científicas españolas. Revista educación 358, España.

Oficina catalana del Canvi Climàtic. Guía práctica para el cálculo de emisiones de gases de efecto invernadero GEI. Versión de marzo de 2012. <http://canviclimatic.gencat.cat/>. Consultado en septiembre de 2014.

Organización Internacional para la Estandarización, 2011, NTC-ISO 50001 Sistemas de Gestión de la Energía. Requisitos con orientación para su uso.

Papadimitriou, F. Kidman, G., 2012, Statistical and scientometric analysis of international research in geographical and environmental education. Journal of

international research in geographical and environmental education. Disponible en: <http://eprints.qut.edu.au/56067/2/56067.pdf>. Consultado en Marzo 20 de 2014.

Poe, R., Patel, A., Baukal, Ch., and Wright, D., 2007, Advanced combustion system for cracking furnaces. John Zink Company LLC. PTQ Q2. [www.eptq.com](http://www.eptq.com). Consultado en octubre 2013.

Poinsot T. and Veynante, 2012, Theoretical and Numerical Combustion. Third Edition, R.T. Edwards, Inc.

Pollard RT., 1977, Hydrocarbons. In: Bamford CH, Tipper CFH, editors. Comprehensive chemical kinetics: gas-phase combustion, vol. 17. Amsterdam: Elsevier.

Premix a program for modeling steady, laminar, one-dimensional premixed flames, pre-036-1 Chemkin Collection Release 3.6 September 2000, Reaction Design.

Primpas I., Tsirtsis G., Karydis M., Kokkoris G., 2010, Principal component analysis: Development of a multivariate index for assessing eutrophication according to the European water framework directive, Ecological Indicators 10, 178–183.

Rahmouni, C., Le Corre, O., Tazerout M., 2003, Determination of the combustion properties of natural gases by pseudo-constituents. Fuel 82 1399–1409.

Rahmouni, C., Le Corre, O., Tazerout M., 2003, Online determination of natural gas properties. C. R. Mecanique 331, 545–550.

Richard I. Levin, David S. Rubin. Estadística para administración y economía, Pearson Prentice-Hall, Séptima edición. México 2004

Rodríguez C., Andrade de Carvalho J., Tiyoko Yoshioka J., Silveira J., 2009, Determination of ecological efficiency in internal combustion engines: The use of biodiesel. Applied Thermal Engineering 29, 1887–1892.

Rogaume, T., Auzanneau, M., Jabouille, F., Goudeau, C.J., Torero, J.L., 2002, The effects of different airflows on the formation of pollutants during waste incineration, *Fuel* 81: 2277-2288.

Rogers D., 2003, Gas interchangeability and its effects on U.S. import plans. *Pipeline & Gas Journal*.

Rokke, N.A., Hustad, J.E., Sonju, O.K., Williams, F.A., 1992, Scaling of Nitric Oxide Emissions from Buoyancy-Dominated Hydrocarbon Turbulent-Jet Diffusion Flames. Twenty-fourth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 385–393.

Rollins, B. C., Quickel, G. T., Beavers, J. A. and Bubenik, T. A., 2007, Failure analysis in integrity management programs. Paper No. 07145. Corrosion Conference and Expo NACE International.

Rosal, R. and Di Scipio, S. Interchangeability And Wobbe Index Used As Quality Parameter For Liquefied Natural Gas.

Saavedra J. Merino L., Gómez M., Kafarov V., 2014, Optimización de la combustión utilizando como criterios de evaluación el índice de Wobbe y el número de metano. *Revista ITECKNE*. Vol. 11 Número 1.

Sepúlveda, J. Meriño L. Diseño de un modelo y desarrollo de ejercicios de vigilancia para la toma de decisiones tecnológicas en el área de energías renovables, en la región de Guipuzcoa-España. Tesis de Maestría. Universidad del Magdalena, 2011.

Serna J. A., Afanador W., 2003, Estimation of improved productivity based on materials substitution in high temperature applications. Use of alloy ASTM A-335 P91.

Serna, J., 2002, Hornos de Viscosreducción H-01 A/B: Fase 0 Fundamentación. *Ecopetrol*, 437.

Serna, J., 2004, Oxidación, carburación y sulfidación de aleaciones ferríticas Fe-9Cr-1Mo modificadas en ambientes con hidrocarburos a temperaturas entre 550 y 750°C. Tesis de Doctorado en Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga.

Serrano, J., Carranza, Y., 2005, Análisis teórico de la combustión en quemadores de gas natural, *Scientia et Technica* Vol. 29, 139 - 143.

Sharma, S.D., Dolan, M., Park, D., Morpeth, L. A. Ilyushechkin, K. McLennan, D.J. Harris, K.V. Thambimuthu, 2008, A critical review of syngas cleaning technologies – fundamental limitations and practical problems. *Powder Technology*, 180, 115-121.

Shih-Chieh Hsieh and CHih-Ju G. Jou, 2009, Using Hydrogen-Rich Multifuel to Improve Energy Efficiency and Reduce CO<sub>2</sub> Emission for High-Energy Furnace. *Environmental Progress & Sustainable Energy*, Vol.28, No.1.

Showers Glenn, 2002, Combustion Safety for Furnace Operation. Boiler and Burner Systems, Cincinnati, Ohio. Industrial heating. Consultado en: [www.industrialheating.com](http://www.industrialheating.com).

Simmie J., Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels. *Progress in Energy and Combustion Science* 29 (2003) 599–634.

Skander, N. and Chitour, C.E., 2007, Group-Contribution Estimation of the Critical Properties of Hydrocarbons. *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, Vol. 62, No. 3, 391-398. Institut français du pétrole.

Smith GP, Golden GM, Frenklach M, Moriarty NW, Eiteneer B, Goldenberg M, Bowman T, Hanson RK, Song S, Gardiner WC, Lissianski VV, Qin Z., 2000, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/). Accessed 03 Oct 2014.

Smith, J.M., 1991, Ingeniería de la cinética química, McGraw-Hill, Sexta edición.

Sonibare J.A. and Akeredolu F.A., 2004, A Theoretical Prediction of Non-methane Gaseous Emissions from Natural Gas Combustion, *Energy Policy*, Netherlands, 32(14), 1653 – 1665.

Stefanidis G., Merci B., Heinderickx G., Marin G., DFD Simulation of steams cracking furnaces using detailed combustion mechanisms. *Computer chemical engineering* 30 (2006) 635 – 649.

Steinmetz, G. F., 1989, Revolutionary path towards compatible requirement between gas appliance performance and natural gas quality. *Gas quality and measurement 1989: conference proceeding*, Institute of gas technology.

Steinmetz, G.F., 1988, The Case for Compatible Standards Between Gas Appliance Performance and Natural Gas Quality, Conference Paper, Spring National Meeting, American Institute of Chemical Engineers, New Orleans LA.

Sundén B., Faghri M., 2008, Transport phenomena in fires. WIT Pres.

Toledo M, Bubnovich V, Saveliev A, Kennedy L., 2009, Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media. *International Journal Hydrogen Energy* 34:1818e27.

Toledo M., Vergara E., Saveliev A., 2011, Syngas production in hybrid filtration combustion. *International Journal of Hydrogen Energy* 36, 3907 – 3912.

Turányi, T., Zalotai, L., Dóbbé S., Bercés, T., 2002, Effect of the uncertainty of kinetic and thermodynamic data on methane flame simulation results. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4, 2568–2578.

U.S. Department of Energy, 1999, Industrial Combustion Technology Roadmap. A Technology Roadmap by and for the Industrial Combustion Community. North Dakota: U.S. Department of Energy.

Ul-Hamid, A., Tawancy, HM., Mohammed, A-R., Nureddin, MA., 2006, Failure analysis of furnace radiant tubes exposed to excessive temperature” Engineering Failure Analysis 13, 1005–1021.

UNE 166000:2006, 2006, Gestión de la I+D+i: Terminología y definiciones de las actividades de I+D+i. Aenor, España.

United Nations Environment Programme, 2006, Energy Efficiency Guide for Industry in Asia. Thermal Equipment: Fuels and Combustion. Asia. Consultado en: [www.energyefficiencyasia.org](http://www.energyefficiencyasia.org) .

United Nations publication. Eco-efficiency Indicators: Measuring Resource-use Efficiency and the Impact of Economic Activities on the Environment. Greening of Economic Growth Series. United Nations 2009. ST/ESCAP/2561. Environment and Development Division. United Nations Economic and Social Commission for Asia and the Pacific.

United Nations, 2007, Building science, technology and innovative systems for sustainable development in Africa. Disponible en: [www.unep.org](http://www.unep.org). Consultado en: Marzo 20 de 2014.

United Nations, 2009, Eco-efficiency Indicators: Measuring Resource-use Efficiency and the Impact of Economic Activities on the Environment. United Nations publication.

United States Environmental Protection Agency. <http://www.epa.gov/ttnchie1/ap42/>. Consultado en octubre de 2014.

Utria K., González F., ToledoM., 2011, Simulación numérica de la oxidación parcial de la mezcla metano-aire en presencia de vapor de agua en medios porosos inertes. Mecánica Computacional Vol. XXX, 1733-1746.

Valderrama, J.O. 2003, The State of the Cubic Equations of State. Ind. Eng. Chem. Res., 42, 1603-1618.

Valente T., Ferreira M., Gomes C., 2011, Application of Fuzzy Logic to Qualify the Environmental Impact in Abandoned Mining Sites Water Air Soil Pollut 217:303–315.

Vesanto, J., 2000, An Automated Report Generation Tool for the Data Understanding Phase in HIS'01. Clustering of the Self-Organizing Map in IEEE Transactions on Neural Networks, special issue on data mining.

Vijayaraghavan G., Jayalakshmi M., 2012, Emerging applications of fuzzy logic in chemical process systems. International Journal of Advanced Engineering Technology, Vol. III, Issue I, 159 – 163. Disponible en: <https://www.academia.edu/9198070>. Consultado en Agosto 2014.

Villaflor G., Morales, G. y Velasco J., 2008, Variables Significativas del Proceso de Combustión del Gas Natural. Información Tecnológica, Vol. 9, 4.

Villela I.A.C., Silveira J.L., 2007, Ecological efficiency in thermoelectrical power plants, Applied Thermal Engineering 27, 840–847.

Walker RW, Morley C., 1997, Basic chemistry of combustion. In: Pilling MJ, editor. Comprehensive chemical kinetics: low-temperature combustion and autoignition, vol. 35. Amsterdam: Elsevier.

Wang H, Xiaoqing Y, Joshi AV, Davis SG, Laskin A, Egolfopoulos F, Law CK., 2007, USC Mech Version II. High-temperature combustion reaction model of H<sub>2</sub>/CO/C<sub>1</sub>–C<sub>4</sub> Compounds. [http://ignis.usc.edu/USC\\_Mech\\_II.htm](http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm). Accessed 14 Feb 2014.

Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.W., 2006, Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. 4th Edition. 4th ed. Springer Berlin Heidelberg New York.

Weaver E.R., 1951, Formulas and Graphs for Representing the Interchangeability of Fuel Gases, Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol. 46, No. 3.

Wildy, F., 2000, Fired heater optimization, AMETEK process instruments.

Williams, T., 2005, Assessment of changes to the performance of gas appliances in relation to variation in gas quality, 87.

Williams, T., 2007, Meeting the Challenges - Gas Interchangeability Matters. Advantica Ltd. [www.advanticagroup.com](http://www.advanticagroup.com) USA.

Wilson, B., American Gas Association (AGA), 2006, White Paper on Natural Gas Interchangeability And Non-Combustion End Use. Appendix H Research Recommendations.

World Business Council for Sustainable Development. Addressing the Avoided Emissions Challenge <http://www.wbcd.org/about/wbcd-usa/>

Zachariah-Wolff, J.L., 2007, From natural gas to hydrogen via theWobbe index: The role of standardized gateways in sustainable infrastructure transitions. International Journal of Hydrogen Energy 32, 1235– 1245.

Zadeh L.A., 2008, Information Sciences 178, 2751–2779.

Zadeh, L. A., 1965, Fuzzy Sets, Information and Control, V.8, 338-353.

## ANEXOS

### ANEXO A. ANÁLISIS DE VARIACIÓN DE LA COMPOSICIÓN DE LAS CORRIENTES DE GASES APORTANTES A LA RED DE COMBUSTIBLE.

Los datos presentados en este anexo fueron suministrados por ECOPETROL y corresponden a datos históricos de las características de las de las corrientes de proceso y sus análisis cromatográficos.

#### CRACKING

##### 1. Componentes por cromatografía en corrientes analizadas

Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado
Monoxido de Carbono	2,43	Monoxido de Carbono	1,41	Monoxido de Carbono	0,62	Monoxido de Carbono	1,12
Nitrogeno	8,59	Hidrogeno	9,80	Dioxido de Carbono	0,67	Nitrogeno	3,22
Hidrogeno	18,36	Etileno	11,95	Nitrogeno	1,64	Hidrogeno	14,79
Etileno	0,08	Propano	2,62	Hidrogeno	17,29	Etileno	11,88
Propano	1,13	Propileno	12,98	H2S	3,01	Propano	1,76
Propileno	5,21	Total Olefinas	0,61	Metano	36,89	Propileno	7,16
Iso-Pentano	0,01	Metano	32,73	Etano	8,79	Iso-Pentano	0,35
Total Olefinas	0,68	Etano	13,62	Etileno	5,79	Total Olefinas	0,10
Metano	62,04	Iso-Butano	0,62	Propano	7,36	Metano	39,02
Etano	0,63	N-Butano	0,10	Propileno	9,50	Etano	13,39
Iso-Butano	0,64	Nitrogeno	4,82	Iso-Butano	4,45	Iso-Butano	0,16
N-Butano	0,19	Iso-Pentano	0,56	Iso-Pentano	0,42	N-Butano	0,02
C5 y mas Pesados	0,02	Dioxido de Carbono	1,94	N-Butano	1,94	Dioxido de Carbono	1,36
		H2S	6,07	Total Olefinas	1,63	H2S	5,58
		C5 y mas Pesados	0,19			C5 y mas Pesados	0,10

Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado
Nitrogeno	0,17	Monoxido de Carbono	0,87	Monoxido de Carbono	1,77	Monoxido de Carbono	0,42
Hidrogeno	0,14	Oxigeno	0,41	Nitrogeno	5,23	Nitrogeno	1,68
H2S	0,00	Nitrogeno	4,08	Hidrogeno	31,80	Hidrogeno	15,88
Metano	1,04	Hidrogeno	18,22	Metano	56,15	Etileno	1,22
Etano	2,65	Etileno	6,98	Etano	0,48	Propano	5,87

Etileno	1,78	Propano	7,27	Etileno	4,57	Propileno	8,07
Propano	6,77	Propileno	10,89			Iso-Pentano	0,91
Propileno	22,93	Iso-Pentano	0,52			N-Pentano	0,06
Iso-Butano	15,89	Total Olefinas	2,03			Total Olefinas	0,95
Iso-Pentano	8,51	Metano	33,98			Metano	55,97
N-Butano	5,49	Etano	9,38			Etano	6,03
Total Olefinas	34,63	Iso-Butano	3,30			Iso-Butano	1,97
		N-Butano	1,67			N-Butano	0,99
		Dioxido de Carbono	0,40				

Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado
Monoxido de Carbono	0,93	Monoxido de Carbono	1,22
Nitrogeno	3,32	Nitrogeno	3,45
Hidrogeno	23,27	Hidrogeno	19,07
Etileno	7,88	Metano	30,92
Propano	4,92	Etano	10,88
Propileno	9,01	Etileno	8,72
Iso-Pentano	0,07	Propano	7,49
Total Olefinas	1,72	Propileno	12,80
Metano	34,22	Iso-Butano	1,62
Etano	10,14	Iso-Pentano	1,20
Iso-Butano	2,86	N-Butano	0,59
N-Butano	1,22	Total Olefinas	2,04
Dioxido de Carbono	0,44		

## 2. Frecuencia de componentes en corrientes analizadas

Componentes	Frecuencia
Nitrogeno	10
Metano	10
Hidrogeno	10
Etileno	10
Etano	10
Total Olefinas	9
Propileno	9
Propano	9
N-Butano	9
Monoxido de	9

Carbono

Iso-Pentano	9
Iso-Butano	9
Dioxido de Carbono	5
H2S	4
C5 y mas Pesados	3
Oxigeno	1
N-Pentano	1

### 3. Resumen estadístico por componentes más frecuentes

Componentes	Porcentajes	Promedio	Desv
Etano	0,48	7,599	4,91936864
	0,63		
	10,14		
	10,88		
	13,39		
	13,62		
	2,65		
	6,03		
	8,79		
	9,38		
Etileno	0,08	6,08	4,21096518
	1,22		
	1,78		
	11,88		
	11,95		
	4,57		
	5,79		
	6,98		
	7,88		
	8,72		
Hidrogeno	0,14	16,86	8,219945
	14,79		
	15,88		
	17,29		
	18,22		
	18,36		
	19,07		
	23,27		
	31,8		
	9,8		
Metano	1,04		
	30,92	38,296	17,3399059
	32,73		
	33,98		
	34,22		

	36,89		
	39,02		
	55,97		
	56,15		
	62,04		
Monoxido de Carbono	0,42	1,19	0,61393087
	0,62		
	0,87		
	0,93		
	1,12		
	1,22		
	1,41		
	1,77		
	2,43		
Nitrogeno		4	2,10905785
	1,64		
	1,68		
	3,22		
	3,32		
	3,45		
	4,08		
	4,82		
	5,23		
	8,59		
Propano	1,13	5,02	2,54837421
	1,76		
	2,62		
	4,92		
	5,87		
	6,77		
	7,27		
	7,36		
	7,49		
Propileno	10,89	10,95	5,15436223
	12,8		
	12,98		
	22,93		
	5,21		
	7,16		
	8,07		
	9,01		
	9,5		
Total Olefinas	0,1	1,22	0,73071394
	0,61		
	0,68		

	0,95		
	1,63		
	1,72		
	2,03		
	2,04		
N-Butano	0,02	0,84	0,73395212
	0,1		
	0,19		
	0,59		
	0,99		
	1,22		
	1,67		
	1,94		
Iso-Pentano	0,01	0,505	0,3992493
	0,07		
	0,35		
	0,42		
	0,52		
	0,56		
	0,91		
	1,2		
Iso-Butano	0,16	1,95	1,49756707
	0,62		
	0,64		
	1,62		
	1,97		
	2,86		
	3,3		
	4,45		

Componente	Max	Min	Rango
Nitrogeno	8,59	1,64	6,95
Metano	62,04	1,04	61
Hidrogeno	31,8	0,14	31,66
Etileno	11,95	0,08	11,87
Etano	13,62	0,48	13,14
Total Olefinas	1,63	0,1	1,53
Propileno	22,93	5,21	17,72
Propano	7,49	1,13	6,36
N-Butano	1,94	0,02	1,92
Monoxido de Carbono	2,43	0,42	2,01
Iso-Pentano	0,01	1,2	1,19
Iso-Butano	0,16	4,45	4,29

<b>Promedio Desviaciones en el área de Cracking</b>	<b>3,03</b>
<b>Promedio de desviaciones para los componentes mas frecuentes</b>	<b>4,03</b>

Promedio de los rangos

13,3

### PETROQUÍMICA

#### 1. Componentes por cromatografía en Corrientes analizadas

Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado
Dioxido de Carbono	0,53	Dioxido de Carbono	0,44	Dioxido de Carbono	0,44
Nitrogeno	0,50	Nitrogeno	1,13	Oxigeno	2,39
Hidrogeno	0,00	Hidrogeno	7,18	Nitrogeno	9,47
Metano	86,17	Metano	81,85	Hidrogeno	0,02
Etano	8,70	Etano	3,50	Metano	86,11
Etileno	2,26	Etileno	1,21	Etano	1,42
Propano	1,15	Propano	0,64	Propano	0,06
Iso-Butano	0,16	Propileno	0,05	Iso-Butano	0,01
Iso-Pentano	0,27	Iso-Butano	0,25	N-Butano	0,01
N-Butano	0,26	Iso-Pentano	1,20	C5 y mas Pesados	0,07
		N-Butano	0,59		
		Total Olefinas	1,74		
		Oxigeno	0,22		

#### 2. Frecuencia de componentes en corrientes analizadas

Componentes	Total
C5 y mas Pesados	1
Dioxido de Carbono	3
Etano	3
Etileno	2
Hidrogeno	3
Iso-Butano	3
Iso-Pentano	2
Metano	3
N-Butano	3
Nitrogeno	3
Oxigeno	2
Propano	3
Propileno	1
Total Olefinas	1
Total general	33

#### 3. Resumen estadístico por componentes más frecuentes

Componentes	Porcentaje	Promedio	Desviación	Max	Min	Rango
-------------	------------	----------	------------	-----	-----	-------

Etano	1,42	4,54	3,74977333	8,7	1,42	7,28
	3,5					
	8,7					
Iso-Butano	0,01	0,14	0,12124356	0,25	0,01	0,24
	0,16					
	0,25					
Metano	81,85	84,71	2,47701433	86,17	81,85	4,32
	86,11					
	86,17					
N-Butano	0,01	0,28	0,29091809	0,59	0,01	0,58
	0,26					
	0,59					
Nitrogeno	0,5	3,7	5,00688526	9,47	0,5	8,97
	1,13					
	9,47					
Propano	0,06	0,61	0,54537449	1,15	0,06	1,09
	0,64					
	1,15					

<b>Promedio Desviaciones en el área</b>	<b>2,03</b>
<b>Promedio de desviaciones para los componentes mas frecuentes</b>	<b>2,03</b>
<b>Promedio de los rangos</b>	<b>3,74</b>

#### REFINACIÓN

Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado	Componentes	Porcentaje Normalizado
Monoxido de Carbono	0,87	Nitrogeno	0,17	Dióxido de Carbono	0,73
Oxigeno	0,41	Hidrogeno	0,14	Nitrógeno	1,26
Nitrogeno	4,08	Metano	1,04	Metano	92,04
Hidrogeno	18,22	Etano	2,65	Etano	5,33
Etileno	6,98	Etileno	1,78	Propano	0,26
Propano	7,27	Propano	6,77	Iso-Butano	0,03
				Iso-Pentano	0,07
Propileno	10,89	Propileno	22,93		
Iso-Pentano	0,52	Iso-Butano	15,89	N-Butano	0,04
Total Olefinas	2,03	Iso-Pentano	8,51	Oxigeno	0,24
Metano	33,98	N-Butano	5,49		
Etano	9,38	Total Olefinas	34,63		
Iso-Butano	3,30				
N-Butano	1,67				
Dioxido de Carbono	0,40				

2. Frecuencia de componentes en corrientes analizadas

Componente	Total
Dioxido de Carbono	2
Etano	3
Etileno	2
Hidrogeno	2
Iso-Butano	3
Iso-Pentano	3
Metano	3
Monoxido de Carbono	1
N-Butano	3
Nitrogeno	3
Oxigeno	2
Propano	3
Propileno	2
Total Olefinas	2
Total general	34

3. Resumen estadístico por componentes más frecuentes

Componente	Porcentajes	Promedio	Desviación	Max	Min	Rango
Dioxido de Carbono	0,4	0,56	0,23334524	0,73	0,4	0,33
	0,73					
Etano	2,65	5,78	3,38816076	9,38	2,65	6,73
	5,33					
	9,38					
Etileno	1,78	4,38	3,67695526	6,98	1,78	5,2
	6,98					
Hidrogeno	0,14	9,18	12,7844906	18,22	0,14	18,08
	18,22					
Iso-Butano	0,03	6,4	8,37397357	15,89	0,03	15,86
	15,89					
	3,3					
Iso-Pentano	0,07	3,03	4,74826635	8,51	0,07	8,44
	0,52					
	8,51					
Metano	1,04	42,35	46,0742285	92,04	1,04	91
	33,98					
	92,04					
N-Butano	0,04	2,4	2,79737377	5,49	0,04	5,45
	1,67					
	5,49					
Nitrogeno	0,17	1,83	2,01777931	4,08	0,17	3,91

	1,26					
	4,08					
Oxigeno	0,24	0,32	0,12020815	0,41	0,24	0,17
	0,41					
Propano	0,26	4,76	3,91088652	7,27	0,26	7,01
	6,77					
	7,27					
Propileno	10,89	16,91	8,51356565	22,93	10,89	12,04
	22,93					
Total Olefinas	2,03	18,33	23,0516811	34,63	2,03	32,6
	34,63					

<b>Promedio Desviaciones en el área</b>	<b>9,2</b>
<b>Promedio de desviaciones para los componentes más frecuentes</b>	<b>9,2</b>
<b>Promedio de los rangos</b>	<b>15,9</b>

#### Resumen de Análisis

Promedio Desviaciones en el área de Cracking	3,03
Promedio de desviaciones para los componentes mas frecuentes	4,03
Promedio de los rangos	13,3

Promedio Desviaciones en el área Petroquímica	2,03
Promedio de desviaciones para los componentes mas frecuentes	2,03
Promedio de los rangos	3,74

Promedio Desviaciones en el área Refinación	9,2
Promedio de desviaciones para los componentes mas frecuentes	9,2
Promedio de los rangos	15,9

No se analizaron las área de Hidrógeno y Gas de Campos ya que las corrientes analizada presentaban una sola cromatografía

Promedio total de Rangos	10,98
Promedio desviaciones 3 áreas	5,08

## ANEXO B. HERRAMIENTA DE CÁLCULO PARA EL PODER CALORÍFICO

DATOS DE ENTRADA	
Composición de Gas Combustible	
Compuestos	Vol %
Hidrógeno	0,00
Metano	0,00
Etano	0,00
Propano	0,00
n-Butano	0,00
Etileno	0,00
Propileno	0,00
Sulfuros de Hidrógeno	0,0000
<b>Total</b>	<b>100,00</b>
Condiciones de proceso	
Flujo de Comb. a ambos serpent.	Pceh
Temperatura del combustible	°F
Temp. Del aire ambiente	°F
Presión aire ambiente	psi.a
Humedad Rel. A Temp ambiente	%
%Vol de oxígeno en la chimenea	%
Temp. gas de combustión en chimenea	°F
Pérdida estimada de calor por radiación	%
Presión del fuel gas a quemadores	psi

BASE DE DATOS PARA CÁLCULOS							
Componentes	FORM.	PESO MOLECULAR	VOL %	LHV	LHV COMP	COMP.	COMP.
				KCAL/NM3	KCAL/NM3	KG/HR	WT%
Hidrógeno	H2	2,02	0,00	2575,90	0,00	0,00	0,00
Monóxido de Carbono	CO	28,01	0,00	3017,00	0,00	0,00	0,00
Metano	CH4	16,04	35,00	8559,00	2995,65	561,40	17,45
Etano	C2H6	30,07	15,00	15232,30	2284,85	451,05	14,02

Propano	C3H8	44,10	50,00	21804,90	10902,45	2205,00	68,53
n-Butano	C4H10	58,12	0,00	28432,60	0,00	0,00	0,00
i-Butano	C4H10	58,12	0,00	28254,30	0,00	0,00	0,00
n-Pentano	C5H12	72,15	0,00	34903,40	0,00	0,00	0,00
i-Pentano	C5H12	72,15	0,00	34818,30	0,00	0,00	0,00
n-Hexano	C6H14	86,18	0,00	41458,20	0,00	0,00	0,00
Etileno	C2H4	28,05	0,00	14111,70	0,00	0,00	0,00
Propileno	C3H6	42,08	0,00	20549,10	0,00	0,00	0,00
n-Buteno	C4H8	56,11	0,00	27105,90	0,00	0,00	0,00
i-Buteno	C4H8	56,11	0,00	26927,20	0,00	0,00	0,00
n-Penteno	C5H10	70,14	0,00	33661,70	0,00	0,00	0,00
Benzeno	C6H6	78,11	0,00	33808,20	0,00	0,00	0,00
Tolueno	C6H5-CH3	91,11	0,00	40233,20	0,00	0,00	0,00
Xyleno	C6H5-C2H5	106,20	0,00	46676,10	0,00	0,00	0,00
Acetileno	C2H2	26,04	0,00	13388,20	0,00	0,00	0,00
Naftaleno	C10H8	128,19	0,00	53897,90	0,00	0,00	0,00
Metanol	CH3OH	32,04	0,00	7217,50	0,00	0,00	0,00
Etanol	C2H5OH	46,07	0,00	13627,60	0,00	0,00	0,00
Sulfuros de Hidrógeno	H2S	34,08	0,00	5604,00	0,00	0,00	0,00
Dióxido de Carbono	CO2	44,02	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrogeno	N2	28,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Oxígeno	O2	32,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dióxido de Azufre	SO2	64,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Vapor de agua	H2O	18,02	0,00	0,00		0,00	0,00
TOTAL	PesoMolec Fuel	32,17	100,00		16182,95	3217,45	100,00
CALCULOS DE COMBUSTION							
COMPONENTES	VOL %	C	M	N	OXIGENO REQD.	H2O CONT.	CO2 Cont
H2	0,00	0,5	0	2	0,00	0,00	0,00
CO	0,00	0,5	1	0	0,00		0,00
CH4	0,000	2,0	1	4	70,00	70,00	35,00
C2H6	0,00	3,5	2	6	52,50	45,00	30,00
C3H8	0,00	5,0	3	8	250,00	200,00	150,00
C4H10	0,00	6,5	4	10	0,00	0,00	0,00
C4H10	0,00	6,5	4	10	0,00	0,00	0,00
C5H12	0,00	8,0	5	12	0,00	0,00	0,00
C5H12	0,00	8,0	5	12	0,00	0,00	0,00
C6H14	0,00	9,5	6	14	0,00	0,00	0,00
C2H4	0,00	3,0	2	4	0,00	0,00	0,00
C3H6	0,00	4,5	3	6	0,00	0,00	0,00

C4H8	0,00	6,0	4	8	0,00	0,00	0,00
C4H8	0,00	6,0	4	8	0,00	0,00	0,00
C5H10	0,00	7,5	5	10	0,00	0,00	0,00
C6H6	0,00	7,5	6	6	0,00	0,00	0,00
C6H5-CH3	0,00	9,0	7	8	0,00	0,00	0,00
C6H5-C2H5	0,00	10,5	8	10	0,00	0,00	0,00
C2H2	0,00	2,5	2	2	0,00	0,00	0,00
C10H8	0,00	12,0	10	8	0,00	0,00	0,00
CH3OH	0,00	2,0	1	4	0,00	0,00	0,00
C2H5OH	0,00	3,5	2	6	0,00	0,00	0,00
H2S	0,00	1,5	0	2	0,00	0,00	
CO2	0,00	0,0	1	0			0,00
N2	0,00	0,0	0	0			
O2	0,00	0,0	0	0	0,00		
SO2	0,00	0,0	0	0			
H2O	0,00	0,0	0	2		0,00	
TOTAL					372,50	315,00	215,00
COMP. ELEMENTALES DEL GAS COMBUSTIBLE		PESO MOLECULAR	K MOLES	KGS	MOL %	WT %	
CARBONO	C	12,011	215,000	2582,365	25,444	80,262	
HIDROGENO	H	1,008	630,000	635,040	74,556	19,738	
AZUFRE	S	32,060	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	
OXIGENO	O	16,000	0,000	0,000	0,000	0,000	
NITROGENO	N	28,020	0,000	0,000	0,000	0,000	
TOTAL			845,000	3217,405	100,000	100,000	

RESULTADOS	
Densidad promedio de gas combustible	
Peso molecular promedio del gas combustible	
Eficiencia Térmica Neta %	
Eficiencia Térmica Bruta %	
Exceso calculado de aire %	%
Composición de Gas de Combustión	
Oxigeno	%
Dióxido de Carbono	%

Vapor de agua	%
Nitrógeno	%
Dióxido de Azufre	%
Argón	%
Total	
Peso molecular promedio del gas de chimenea	
Poder Calorífico	
LHV de Gas combustible	
HHV de Gas combustible	

## ANEXO C. CONDICIONES DE OPERACIÓN Y ENTRADA DE DATOS PARA LA SIMULACIÓN EN PREMIX.

```
/SELF-SUSTAINED 2-T MODEL
/
/
/RESTART
RSTR
/BURN
/TGIV
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL 1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM 1.E-4
TIME 50 1.00E-5
TIM2 500 1.00E-5
DTMX 1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS 100
GRAD 0.1
CURV 0.5
XSTR 0.
XCEN 10.
XEND 20.
WMIX 2.0
WDIF
/CDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES 1.0 (atmospheres)
FLRT 3.1E-2 (g/cm**2-sec)
UVEL 3.6E-4
VFCT 1.0
FRAD 0.3
BETA 4.0
DIAM 0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
REAC C2H6 0.00501193
REAC CH4 0.01754177
```

```

REAC  C3H8 0.02155131
REAC  O2 0.19947494
REAC  C4H10 0.00601432
REAC  N2 0.75040573
/ESTIMATED PRODUCTS
PROD  O2 0.12479714
PROD  N2 0.75040573
PROD  CH4 0.000
PROD  CO 0.00000
PROD  CO2 0.12479714
PROD  H2O 0.0
PROD  H2 0.00000
PROD  C2H2 0.000000
PROD  C2H3 .000000
PROD  C2H4 0.0000
PROD  C2H5 .000000
PROD  C2H6 0.00000
/ESTIMATED INTERMEDIATES
INTM  H2O2 .000001
INTM  HO2 .0000001
INTM  C .0000000001
INTM  HCO .0000001
INTM  H .0001
INTM  CH .0000001
INTM  CH2O .0000001
INTM  O .0000001
INTM  CH2 .00000001
INTM  CH2OH .00000001
INTM  CH2(S) .00000001
INTM  CH3O .00000001
INTM  CH3OH 0.00000001
INTM  HCCO .0000001
INTM  OH .0000001
INTM  CH3 .00000001
INTM  CH2CO .0000001
INTM  C2H .0000001
INTM  HCCOH .00000001
/ PRINT CONTROL
PRNT  2
/ GIVEN SOLID TEMPERATURE PROFILE
/
TEMP      0 308.1
TEMP     20 1419
/TEMP 0.0 300
/TEMP 20.0 1400
/USTG
TFIX 1100
/
/TRANSPORT OPTIONS
/
/TDIF
/

```

```

/SENSITIVITY OPTIONS
/
/ASEN
/
/MISCELLANEOUS
/
/PRNT
CNTN
/
END
/
//////////CONTINUATION-1
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL 1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM 1.E-4
TIME 50 1.00E-5
TIM2 500 1.00E-5
DTMX 1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS 140
GRAD 0.1
CURV 0.5
XSTR 0.
XCEN 10.
XEND 20.
WMIX 2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES 1.0 (atmospheres)
/FLRT 3.7E-2 (g/cm**2-sec)
/UVEL -3.5E-3
VFCT 1.2
FRAD 0.3
BETA 4.0
DIAM 0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/REAC O2 0.2026
/REAC N2 0.7620

```

```

/REAC  CH4  0.0354
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT    2
/
CNTN
END
//////////CONTINUATION-2
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL  1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM  1.E-4
TIME  50   1.00E-5
TIM2  500  1.00E-5
DTMX  1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS  46
GRAD  0.1
CURV  0.5
XSTR  0.
XCEN  10.
XEND  20.
WMIX  2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES  1.0 (atmospheres)
/FLRT  3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/UVEL  -3.0E-3
VFCT  1.2
FRAD  0.3
BETA  4.0
DIAM  0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/REAC  O2    0.1650
/REAC  N2    0.6206
/REAC  CH4   0.2145

```

```

/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT      2
/
CNTN
END
//////////CONTINUATION-3
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL  1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM  1.E-4
TIME  50   1.00E-5
TIM2  500  1.00E-5
DTMX  1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS   50
GRAD   0.1
CURV   0.5
XSTR   0.
XCEN   10.
XEND   20.
WMIX   2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES   1.0 (atmospheres)
/FLRT  3.E-2 (g/cm**2-sec)
/VEL   -2.5E-3
VFCT   1.2
FRAD   0.3
BETA   4.0
DIAM   0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/REAC  O2   0.1650
/REAC  N2   0.6206
/REAC  CH4  0.2145
/ESTIMATED PRODUCTS

```

```

/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT      1
/
CNTN
END
//////////CONTINUATION-4
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL  1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM  1.E-4
TIME  50   1.00E-5
TIM2  500  1.00E-5
DTMX  1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS   50
GRAD   0.1
CURV   0.5
XSTR   0.
XCEN   10.
XEND   20.
WMIX   2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES   1.0 (atmospheres)
/FLRT  3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/VEL   -2.0E-3
VFCT   1.2
FRAD   0.3
BETA   4.0
DIAM   0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL

```

```

PRNT      1
/
CNTN
END
//////////CONTINUATION-5
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL  1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM  1.E-4
TIME  50   1.00E-5
TIM2  500  1.00E-5
DTMX  1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS   50
GRAD   0.1
CURV   0.5
XSTR   0.
XCEN   10.
XEND   20.
WMIX   2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES   1.0 (atmospheres)
FLRT   3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/VEL   3.25E-3
VFCT   1.2
FRAD   0.3
BETA   4.0
DIAM   0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT   1
/
CNTN
END

```

```

//////////CONTINUATION-6
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL 1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM 1.E-4
TIME 50 1.00E-5
TIM2 500 1.00E-5
DTMX 1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS 50
GRAD 0.1
CURV 0.5
XSTR 0.
XCEN 10.
XEND 20.
WMIX 2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES 1.0 (atmospheres)
FLRT 3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/VEL 3.5E-3
VFCT 1.2
FRAD 0.3
BETA 4.0
DIAM 0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT 1
/
CNTN
END
//////////CONTINUATION-7
/
FREE
ENRG

```

```

/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL 1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM 1.E-4
TIME 50 1.00E-5
TIM2 500 1.00E-5
DTMX 1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS 50
GRAD 0.1
CURV 0.5
XSTR 0.
XCEN 10.
XEND 20.
WMIX 2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES 1.0 (atmospheres)
FLRT 3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/VEL 3.75E-3
VFCT 1.2
FRAD 0.3
BETA 4.0
DIAM 0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT 1
/
CNTN
END
//////////CONTINUATION-8
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION

```

```

ATOL  1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM  1.E-4
TIME  50   1.00E-5
TIM2  500  1.00E-5
DTMX  1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS  50
GRAD  0.1
CURV  0.5
XSTR  0.
XCEN  10.
XEND  20.
WMIX  2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES  1.0 (atmospheres)
FLRT  3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/UVEL  3.75E-3
VFCT  1.2
FRAD  0.3
BETA  4.0
DIAM  0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT  1
/
/CNTN
END
//////////CONTINUATION-9
/
FREE
ENRG
/
/METHOD OPTIONS
/
/ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
ATOL  1.E-9
/RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
RTIM  1.E-4
TIME  50   1.00E-5

```

```
TIM2  500  1.00E-5
DTMX  1.00
/
/GRID PARAMETERS
/
/NPTS  50
GRAD  0.1
CURV  0.5
XSTR  0.
XCEN  10.
XEND  20.
WMIX  2.0
WDIF
/
/FLAME DEFINITION
/
PRES  1.0 (atmospheres)
FLRT  3.1E-2 (g/cm**2-sec)
/VEL  3.75E-3
VFCT  1.2
FRAD  0.3
BETA  4.0
DIAM  0.56
/
/
/REACTANTS
MOLE
/ESTIMATED PRODUCTS
/
/ESTIMATED INTERMEDIATES
/
/ PRINT CONTROL
PRNT  1
/
/CNTN
END
```

## ANEXO D. PARÁMETROS Y ECUACIONES CINÉTICAS UTILIZADAS PARA LA SIMULACIÓN EN PREMIX.

CHEMKIN INTERPRETER OUTPUT: CHEMKIN-II Version 3.6 Apr. 1994  
DOUBLE PRECISION

```

-----
ELEMENTS  ATOMIC
CONSIDERED WEIGHT
-----
1. O      15.9994
2. H      1.00797
3. C      12.0112
4. N      14.0067
5. AR     39.9480
-----

```

```

-----
C
P H
H A
A R
SPECIES      S G MOLECULAR TEMPERATURE  ELEMENT COUNT
CONSIDERED   E E WEIGHT  LOW  HIGH  O  H  C  N  AR
-----
1. H2        G 0  2.01594  200.0 3500.0 0 2 0 0 0
2. H         G 0  1.00797  200.0 3500.0 0 1 0 0 0
3. O         G 0 15.99940  200.0 3500.0 1 0 0 0 0
4. O2        G 0 31.99880  200.0 3500.0 2 0 0 0 0
5. OH        G 0 17.00737  200.0 3500.0 1 1 0 0 0
6. H2O       G 0 18.01534  200.0 3500.0 1 2 0 0 0
7. HO2       G 0 33.00677  200.0 3500.0 2 1 0 0 0
8. H2O2      G 0 34.01474  200.0 3500.0 2 2 0 0 0
9. C         G 0 12.01115  200.0 3500.0 0 0 1 0 0
10. CH       G 0 13.01912  200.0 3500.0 0 1 1 0 0
11. CH2      G 0 14.02709  200.0 3500.0 0 2 1 0 0
12. CH2(S)   G 0 14.02709  200.0 3500.0 0 2 1 0 0
13. CH3      G 0 15.03506  200.0 3500.0 0 3 1 0 0
14. CH4      G 0 16.04303  200.0 3500.0 0 4 1 0 0
15. CO       G 0 28.01055  200.0 3500.0 1 0 1 0 0
16. CO2      G 0 44.00995  200.0 3500.0 2 0 1 0 0
17. HCO      G 0 29.01852  200.0 3500.0 1 1 1 0 0

```

18. CH2O	G 0 30.02649 200.0 3500.0 1 2 1 0 0
19. CH2OH	G 0 31.03446 200.0 3500.0 1 3 1 0 0
20. CH3O	G 0 31.03446 300.0 3000.0 1 3 1 0 0
21. CH3OH	G 0 32.04243 200.0 3500.0 1 4 1 0 0
22. C2H	G 0 25.03027 200.0 3500.0 0 1 2 0 0
23. C2H2	G 0 26.03824 200.0 3500.0 0 2 2 0 0
24. C2H3	G 0 27.04621 200.0 3500.0 0 3 2 0 0
25. C2H4	G 0 28.05418 200.0 3500.0 0 4 2 0 0
26. C2H5	G 0 29.06215 200.0 3500.0 0 5 2 0 0
27. C2H6	G 0 30.07012 200.0 3500.0 0 6 2 0 0
28. HCCO	G 0 41.02967 300.0 4000.0 1 1 2 0 0
29. CH2CO	G 0 42.03764 200.0 3500.0 1 2 2 0 0
30. HCCOH	G 0 42.03764 300.0 5000.0 1 2 2 0 0
31. N	G 0 14.00670 200.0 6000.0 0 0 0 1 0
32. NH	G 0 15.01467 200.0 6000.0 0 1 0 1 0
33. NH2	G 0 16.02264 200.0 6000.0 0 2 0 1 0
34. NH3	G 0 17.03061 200.0 6000.0 0 3 0 1 0
35. NNH	G 0 29.02137 200.0 6000.0 0 1 0 2 0
36. NO	G 0 30.00610 200.0 6000.0 1 0 0 1 0
37. NO2	G 0 46.00550 200.0 6000.0 2 0 0 1 0
38. N2O	G 0 44.01280 200.0 6000.0 1 0 0 2 0
39. HNO	G 0 31.01407 200.0 6000.0 1 1 0 1 0
40. CN	G 0 26.01785 200.0 6000.0 0 0 1 1 0
41. HCN	G 0 27.02582 200.0 6000.0 0 1 1 1 0
42. H2CN	G 0 28.03379 300.0 4000.0 0 2 1 1 0
43. HCNN	G 0 41.03252 300.0 5000.0 0 1 1 2 0
44. HCNO	G 0 43.02522 300.0 5000.0 1 1 1 1 0
45. HOCN	G 0 43.02522 300.0 5000.0 1 1 1 1 0
46. HNCO	G 0 43.02522 300.0 5000.0 1 1 1 1 0
47. NCO	G 0 42.01725 200.0 6000.0 1 0 1 1 0
48. N2	G 0 28.01340 300.0 5000.0 0 0 0 2 0
49. AR	G 0 39.94800 300.0 5000.0 0 0 0 0 1
50. C3H7	G 0 43.08924 300.0 5000.0 0 7 3 0 0
51. C3H8	G 0 44.09721 300.0 5000.0 0 8 3 0 0
52. CH2CHO	G 0 43.04561 300.0 5000.0 1 3 2 0 0
53. CH3CHO	G 0 44.05358 200.0 6000.0 1 4 2 0 0

---

$$(k = A T^{**}b \exp(-E/RT))$$

REACTIONS CONSIDERED		A	b	E
1.	$2O+M \rightleftharpoons O_2+M$	1.20E+17	-1.0	.0
	H2 Enhanced by	2.400E+00		
	H2O Enhanced by	1.540E+01		
	CH4 Enhanced by	2.000E+00		
	CO Enhanced by	1.750E+00		
	CO2 Enhanced by	3.600E+00		
	C2H6 Enhanced by	3.000E+00		
	AR Enhanced by	8.300E-01		
2.	$O+H+M \rightleftharpoons OH+M$	5.00E+17	-1.0	.0
	H2 Enhanced by	2.000E+00		
	H2O Enhanced by	6.000E+00		
	CH4 Enhanced by	2.000E+00		
	CO Enhanced by	1.500E+00		
	CO2 Enhanced by	2.000E+00		
	C2H6 Enhanced by	3.000E+00		
	AR Enhanced by	7.000E-01		
3.	$O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$	3.87E+04	2.7	6260.0
4.	$O+HO_2 \rightleftharpoons OH+O_2$	2.00E+13	.0	.0
5.	$O+H_2O_2 \rightleftharpoons OH+HO_2$	9.63E+06	2.0	4000.0
6.	$O+CH \rightleftharpoons H+CO$	5.70E+13	.0	.0
7.	$O+CH_2 \rightleftharpoons H+HCO$	8.00E+13	.0	.0
8.	$O+CH_2(S) \rightleftharpoons H_2+CO$	1.50E+13	.0	.0
9.	$O+CH_2(S) \rightleftharpoons H+HCO$	1.50E+13	.0	.0
10.	$O+CH_3 \rightleftharpoons H+CH_2O$	5.06E+13	.0	.0
11.	$O+CH_4 \rightleftharpoons OH+CH_3$	1.02E+09	1.5	8600.0
12.	$O+CO(+M) \rightleftharpoons CO_2(+M)$	1.80E+10	.0	2385.0
	Low pressure limit:	.60200E+15	.00000E+00	.30000E+04
	H2 Enhanced by	2.000E+00		
	O2 Enhanced by	6.000E+00		
	H2O Enhanced by	6.000E+00		
	CH4 Enhanced by	2.000E+00		
	CO Enhanced by	1.500E+00		
	CO2 Enhanced by	3.500E+00		
	C2H6 Enhanced by	3.000E+00		
	AR Enhanced by	5.000E-01		
13.	$O+HCO \rightleftharpoons OH+CO$	3.00E+13	.0	.0
14.	$O+HCO \rightleftharpoons H+CO_2$	3.00E+13	.0	.0
15.	$O+CH_2O \rightleftharpoons OH+HCO$	3.90E+13	.0	3540.0
16.	$O+CH_2OH \rightleftharpoons OH+CH_2O$	1.00E+13	.0	.0

17. O+CH3O<=>OH+CH2O	1.00E+13	.0	.0
18. O+CH3OH<=>OH+CH2OH	3.88E+05	2.5	3100.0
19. O+CH3OH<=>OH+CH3O	1.30E+05	2.5	5000.0
20. O+C2H<=>CH+CO	5.00E+13	.0	.0
21. O+C2H2<=>H+HCCO	1.35E+07	2.0	1900.0
22. O+C2H2<=>OH+C2H	4.60E+19	-1.4	28950.0
23. O+C2H2<=>CO+CH2	6.94E+06	2.0	1900.0
24. O+C2H3<=>H+CH2CO	3.00E+13	.0	.0
25. O+C2H4<=>CH3+HCO	1.25E+07	1.8	220.0
26. O+C2H5<=>CH3+CH2O	2.24E+13	.0	.0
27. O+C2H6<=>OH+C2H5	8.98E+07	1.9	5690.0
28. O+HCCO<=>H+2CO	1.00E+14	.0	.0
29. O+CH2CO<=>OH+HCCO	1.00E+13	.0	8000.0
30. O+CH2CO<=>CH2+CO2	1.75E+12	.0	1350.0
31. O2+CO<=>O+CO2	2.50E+12	.0	47800.0
32. O2+CH2O<=>HO2+HCO	1.00E+14	.0	40000.0
33. H+O2+M<=>HO2+M	2.80E+18	-.9	.0
O2	Enhanced by	0.000E+00	
H2O	Enhanced by	0.000E+00	
CO	Enhanced by	7.500E-01	
CO2	Enhanced by	1.500E+00	
C2H6	Enhanced by	1.500E+00	
N2	Enhanced by	0.000E+00	
AR	Enhanced by	0.000E+00	
34. H+2O2<=>HO2+O2	2.08E+19	-1.2	.0
35. H+O2+H2O<=>HO2+H2O	1.13E+19	-.8	.0
36. H+O2+N2<=>HO2+N2	2.60E+19	-1.2	.0
37. H+O2+AR<=>HO2+AR	7.00E+17	-.8	.0
38. H+O2<=>O+OH	2.65E+16	-.7	17041.0
39. 2H+M<=>H2+M	1.00E+18	-1.0	.0
H2	Enhanced by	0.000E+00	
H2O	Enhanced by	0.000E+00	
CH4	Enhanced by	2.000E+00	
CO2	Enhanced by	0.000E+00	
C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
AR	Enhanced by	6.300E-01	
40. 2H+H2<=>2H2	9.00E+16	-.6	.0
41. 2H+H2O<=>H2+H2O	6.00E+19	-1.3	.0
42. 2H+CO2<=>H2+CO2	5.50E+20	-2.0	.0
43. H+OH+M<=>H2O+M	2.20E+22	-2.0	.0
H2	Enhanced by	7.300E-01	

H2O	Enhanced by	3.650E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	3.800E-01		
44. H+HO2<=>O+H2O		3.97E+12	.0	671.0
45. H+HO2<=>O2+H2		4.48E+13	.0	1068.0
46. H+HO2<=>2OH		8.40E+13	.0	635.0
47. H+H2O2<=>HO2+H2		1.21E+07	2.0	5200.0
48. H+H2O2<=>OH+H2O		1.00E+13	.0	3600.0
49. H+CH<=>C+H2		1.65E+14	.0	.0
50. H+CH2(+M)<=>CH3(+M)		6.00E+14	.0	.0
Low pressure limit:		.10400E+27	-.27600E+01	.16000E+04
TROE centering:		.56200E+00	.91000E+02	.58360E+04
.85520E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
51. H+CH2(S)<=>CH+H2		3.00E+13	.0	.0
52. H+CH3(+M)<=>CH4(+M)		1.39E+16	-.5	536.0
Low pressure limit:		.26200E+34	-.47600E+01	.24400E+04
TROE centering:		.78300E+00	.74000E+02	.29410E+04
.69640E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	3.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
53. H+CH4<=>CH3+H2		6.60E+08	1.6	10840.0
54. H+HCO(+M)<=>CH2O(+M)		1.09E+12	.5	-260.0
Low pressure limit:		.24700E+25	-.25700E+01	.42500E+03
TROE centering:		.78240E+00	.27100E+03	.27550E+04
.65700E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		

CO2        Enhanced by 2.000E+00  
 C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
 AR         Enhanced by 7.000E-01  
 55. H+HCO<=>H2+CO                    7.34E+13   .0   .0  
 56. H+CH2O(+M)<=>CH2OH(+M)            5.40E+11   .5   3600.0  
     Low pressure limit: .12700E+33 -.48200E+01 .65300E+04  
     TROE centering:    .71870E+00 .10300E+03 .12910E+04  
 .41600E+04  
     H2        Enhanced by 2.000E+00  
     H2O       Enhanced by 6.000E+00  
     CH4       Enhanced by 2.000E+00  
     CO        Enhanced by 1.500E+00  
     CO2       Enhanced by 2.000E+00  
     C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
 57. H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)            5.40E+11   .5   2600.0  
     Low pressure limit: .22000E+31 -.48000E+01 .55600E+04  
     TROE centering:    .75800E+00 .94000E+02 .15550E+04  
 .42000E+04  
     H2        Enhanced by 2.000E+00  
     H2O       Enhanced by 6.000E+00  
     CH4       Enhanced by 2.000E+00  
     CO        Enhanced by 1.500E+00  
     CO2       Enhanced by 2.000E+00  
     C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
 58. H+CH2O<=>HCO+H2                    5.74E+07   1.9   2742.0  
 59. H+CH2OH(+M)<=>CH3OH(+M)           1.06E+12   .5   86.0  
     Low pressure limit: .43600E+32 -.46500E+01 .50800E+04  
     TROE centering:    .60000E+00 .10000E+03 .90000E+05  
 .10000E+05  
     H2        Enhanced by 2.000E+00  
     H2O       Enhanced by 6.000E+00  
     CH4       Enhanced by 2.000E+00  
     CO        Enhanced by 1.500E+00  
     CO2       Enhanced by 2.000E+00  
     C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
 60. H+CH2OH<=>H2+CH2O                   2.00E+13   .0   .0  
 61. H+CH2OH<=>OH+CH3                   1.65E+11   .7   -284.0  
 62. H+CH2OH<=>CH2(S)+H2O               3.28E+13   -.1   610.0  
 63. H+CH3O(+M)<=>CH3OH(+M)            2.43E+12   .5   50.0  
     Low pressure limit: .46600E+42 -.74400E+01 .14080E+05  
     TROE centering:    .70000E+00 .10000E+03 .90000E+05  
 .10000E+05

H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
64.	H+CH3O<=>H+CH2OH	4.15E+07	1.6	1924.0	
65.	H+CH3O<=>H2+CH2O	2.00E+13	.0	.0	
66.	H+CH3O<=>OH+CH3	1.50E+12	.5	-110.0	
67.	H+CH3O<=>CH2(S)+H2O	2.62E+14	-.2	1070.0	
68.	H+CH3OH<=>CH2OH+H2	1.70E+07	2.1	4870.0	
69.	H+CH3OH<=>CH3O+H2	4.20E+06	2.1	4870.0	
70.	H+C2H(+M)<=>C2H2(+M)	1.00E+17	-1.0	.0	
	Low pressure limit:	.37500E+34	-.48000E+01	.19000E+04	
	TROE centering:	.64640E+00	.13200E+03	.13150E+04	
	.55660E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
71.	H+C2H2(+M)<=>C2H3(+M)	5.60E+12	.0	2400.0	
	Low pressure limit:	.38000E+41	-.72700E+01	.72200E+04	
	TROE centering:	.75070E+00	.98500E+02	.13020E+04	
	.41670E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
72.	H+C2H3(+M)<=>C2H4(+M)	6.08E+12	.3	280.0	
	Low pressure limit:	.14000E+31	-.38600E+01	.33200E+04	
	TROE centering:	.78200E+00	.20750E+03	.26630E+04	
	.60950E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			

CO2       Enhanced by 2.000E+00  
 C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
 AR         Enhanced by 7.000E-01  
 73. H+C2H3<=>H2+C2H2               3.00E+13   .0   .0  
 74. H+C2H4(+M)<=>C2H5(+M)           5.40E+11   .5  1820.0  
     Low pressure limit: .60000E+42 -.76200E+01 .69700E+04  
     TROE centering:   .97530E+00 .21000E+03 .98400E+03  
 .43740E+04  
     H2       Enhanced by 2.000E+00  
     H2O       Enhanced by 6.000E+00  
     CH4       Enhanced by 2.000E+00  
     CO        Enhanced by 1.500E+00  
     CO2       Enhanced by 2.000E+00  
     C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
     AR        Enhanced by 7.000E-01  
 75. H+C2H4<=>C2H3+H2               1.33E+06   2.5  12240.0  
 76. H+C2H5(+M)<=>C2H6(+M)           5.21E+17  -1.0  1580.0  
     Low pressure limit: .19900E+42 -.70800E+01 .66850E+04  
     TROE centering:   .84220E+00 .12500E+03 .22190E+04  
 .68820E+04  
     H2       Enhanced by 2.000E+00  
     H2O       Enhanced by 6.000E+00  
     CH4       Enhanced by 2.000E+00  
     CO        Enhanced by 1.500E+00  
     CO2       Enhanced by 2.000E+00  
     C2H6       Enhanced by 3.000E+00  
     AR        Enhanced by 7.000E-01  
 77. H+C2H5<=>H2+C2H4               2.00E+12   .0   .0  
 78. H+C2H6<=>C2H5+H2               1.15E+08   1.9  7530.0  
 79. H+HCCO<=>CH2(S)+CO              1.00E+14   .0   .0  
 80. H+CH2CO<=>HCCO+H2              5.00E+13   .0  8000.0  
 81. H+CH2CO<=>CH3+CO               1.13E+13   .0  3428.0  
 82. H+HCCOH<=>H+CH2CO              1.00E+13   .0   .0  
 83. H2+CO(+M)<=>CH2O(+M)            4.30E+07   1.5  79600.0  
     Low pressure limit: .50700E+28 -.34200E+01 .84350E+05  
     TROE centering:   .93200E+00 .19700E+03 .15400E+04  
 .10300E+05  
     H2       Enhanced by 2.000E+00  
     H2O       Enhanced by 6.000E+00  
     CH4       Enhanced by 2.000E+00  
     CO        Enhanced by 1.500E+00  
     CO2       Enhanced by 2.000E+00

C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
84. OH+H2<=>H+H2O		2.16E+08	1.5	3430.0	
85. 2OH(+M)<=>H2O2(+M)		7.40E+13	-.4	.0	
Low pressure limit:		.23000E+19	-.90000E+00	-.17000E+04	
TROE centering:		.73460E+00	.94000E+02	.17560E+04	
.51820E+04					
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
86. 2OH<=>O+H2O		3.57E+04	2.4	-2110.0	
87. OH+HO2<=>O2+H2O		1.45E+13	.0	-500.0	
Declared duplicate reaction...					
88. OH+H2O2<=>HO2+H2O		2.00E+12	.0	427.0	
Declared duplicate reaction...					
89. OH+H2O2<=>HO2+H2O		1.70E+18	.0	29410.0	
Declared duplicate reaction...					
90. OH+C<=>H+CO		5.00E+13	.0	.0	
91. OH+CH<=>H+HCO		3.00E+13	.0	.0	
92. OH+CH2<=>H+CH2O		2.00E+13	.0	.0	
93. OH+CH2<=>CH+H2O		1.13E+07	2.0	3000.0	
94. OH+CH2(S)<=>H+CH2O		3.00E+13	.0	.0	
95. OH+CH3(+M)<=>CH3OH(+M)		2.79E+18	-1.4	1330.0	
Low pressure limit:		.40000E+37	-.59200E+01	.31400E+04	
TROE centering:		.41200E+00	.19500E+03	.59000E+04	
.63940E+04					
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
96. OH+CH3<=>CH2+H2O		5.60E+07	1.6	5420.0	
97. OH+CH3<=>CH2(S)+H2O		6.44E+17	-1.3	1417.0	
98. OH+CH4<=>CH3+H2O		1.00E+08	1.6	3120.0	
99. OH+CO<=>H+CO2		4.76E+07	1.2	70.0	
100. OH+HCO<=>H2O+CO		5.00E+13	.0	.0	

101. OH+CH2O<=>HCO+H2O	3.43E+09	1.2	-447.0
102. OH+CH2OH<=>H2O+CH2O	5.00E+12	.0	.0
103. OH+CH3O<=>H2O+CH2O	5.00E+12	.0	.0
104. OH+CH3OH<=>CH2OH+H2O	1.44E+06	2.0	-840.0
105. OH+CH3OH<=>CH3O+H2O	6.30E+06	2.0	1500.0
106. OH+C2H<=>H+HCCO	2.00E+13	.0	.0
107. OH+C2H2<=>H+CH2CO	2.18E-04	4.5	-1000.0
108. OH+C2H2<=>H+HCCOH	5.04E+05	2.3	13500.0
109. OH+C2H2<=>C2H+H2O	3.37E+07	2.0	14000.0
110. OH+C2H2<=>CH3+CO	4.83E-04	4.0	-2000.0
111. OH+C2H3<=>H2O+C2H2	5.00E+12	.0	.0
112. OH+C2H4<=>C2H3+H2O	3.60E+06	2.0	2500.0
113. OH+C2H6<=>C2H5+H2O	3.54E+06	2.1	870.0
114. OH+CH2CO<=>HCCO+H2O	7.50E+12	.0	2000.0
115. 2HO2<=>O2+H2O2	1.30E+11	.0	-1630.0
Declared duplicate reaction...			
116. 2HO2<=>O2+H2O2	4.20E+14	.0	12000.0
Declared duplicate reaction...			
117. HO2+CH2<=>OH+CH2O	2.00E+13	.0	.0
118. HO2+CH3<=>O2+CH4	1.00E+12	.0	.0
119. HO2+CH3<=>OH+CH3O	3.78E+13	.0	.0
120. HO2+CO<=>OH+CO2	1.50E+14	.0	23600.0
121. HO2+CH2O<=>HCO+H2O2	5.60E+06	2.0	12000.0
122. C+O2<=>O+CO	5.80E+13	.0	576.0
123. C+CH2<=>H+C2H	5.00E+13	.0	.0
124. C+CH3<=>H+C2H2	5.00E+13	.0	.0
125. CH+O2<=>O+HCO	6.71E+13	.0	.0
126. CH+H2<=>H+CH2	1.08E+14	.0	3110.0
127. CH+H2O<=>H+CH2O	5.71E+12	.0	-755.0
128. CH+CH2<=>H+C2H2	4.00E+13	.0	.0
129. CH+CH3<=>H+C2H3	3.00E+13	.0	.0
130. CH+CH4<=>H+C2H4	6.00E+13	.0	.0
131. CH+CO(+M)<=>HCCO(+M)	5.00E+13	.0	.0
Low pressure limit: .26900E+29 -.37400E+01 .19360E+04			
TROE centering: .57570E+00 .23700E+03 .16520E+04			
.50690E+04			
H2	Enhanced by	2.000E+00	
H2O	Enhanced by	6.000E+00	
CH4	Enhanced by	2.000E+00	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO2	Enhanced by	2.000E+00	

C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
132.	CH+CO2<=>HCO+CO	1.90E+14	.0	15792.0	
133.	CH+CH2O<=>H+CH2CO	9.46E+13	.0	-515.0	
134.	CH+HCCO<=>CO+C2H2	5.00E+13	.0	.0	
135.	CH2+O2=>OH+H+CO	5.00E+12	.0	1500.0	
136.	CH2+H2<=>H+CH3	5.00E+05	2.0	7230.0	
137.	2CH2<=>H2+C2H2	1.60E+15	.0	11944.0	
138.	CH2+CH3<=>H+C2H4	4.00E+13	.0	.0	
139.	CH2+CH4<=>2CH3	2.46E+06	2.0	8270.0	
140.	CH2+CO(+M)<=>CH2CO(+M)	8.10E+11	.5	4510.0	
	Low pressure limit:	.26900E+34	-.51100E+01	.70950E+04	
	TROE centering:	.59070E+00	.27500E+03	.12260E+04	
	.51850E+04				
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
141.	CH2+HCCO<=>C2H3+CO	3.00E+13	.0	.0	
142.	CH2(S)+N2<=>CH2+N2	1.50E+13	.0	600.0	
143.	CH2(S)+AR<=>CH2+AR	9.00E+12	.0	600.0	
144.	CH2(S)+O2<=>H+OH+CO	2.80E+13	.0	.0	
145.	CH2(S)+O2<=>CO+H2O	1.20E+13	.0	.0	
146.	CH2(S)+H2<=>CH3+H	7.00E+13	.0	.0	
147.	CH2(S)+H2O(+M)<=>CH3OH(+M)	4.82E+17	-1.2	1145.0	
	Low pressure limit:	.18800E+39	-.63600E+01	.50400E+04	
	TROE centering:	.60270E+00	.20800E+03	.39220E+04	
	.10180E+05				
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
148.	CH2(S)+H2O<=>CH2+H2O	3.00E+13	.0	.0	
149.	CH2(S)+CH3<=>H+C2H4	1.20E+13	.0	-570.0	
150.	CH2(S)+CH4<=>2CH3	1.60E+13	.0	-570.0	
151.	CH2(S)+CO<=>CH2+CO	9.00E+12	.0	.0	

152. CH2(S)+CO2<=>CH2+CO2	7.00E+12	.0	.0
153. CH2(S)+CO2<=>CO+CH2O	1.40E+13	.0	.0
154. CH2(S)+C2H6<=>CH3+C2H5	4.00E+13	.0	-550.0
155. CH3+O2<=>O+CH3O	3.56E+13	.0	30480.0
156. CH3+O2<=>OH+CH2O	2.31E+12	.0	20315.0
157. CH3+H2O2<=>HO2+CH4	2.45E+04	2.5	5180.0
158. 2CH3(+M)<=>C2H6(+M)	6.77E+16	-1.2	654.0
Low pressure limit:	.34000E+42	-.70300E+01	.27620E+04
TROE centering:	.61900E+00	.73200E+02	.11800E+04
.99990E+04			
H2	Enhanced by	2.000E+00	
H2O	Enhanced by	6.000E+00	
CH4	Enhanced by	2.000E+00	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO2	Enhanced by	2.000E+00	
C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
AR	Enhanced by	7.000E-01	
159. 2CH3<=>H+C2H5	6.84E+12	.1	10600.0
160. CH3+HCO<=>CH4+CO	2.65E+13	.0	.0
161. CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.32E+03	2.8	5860.0
162. CH3+CH3OH<=>CH2OH+CH4	3.00E+07	1.5	9940.0
163. CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	1.00E+07	1.5	9940.0
164. CH3+C2H4<=>C2H3+CH4	2.27E+05	2.0	9200.0
165. CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	6.14E+06	1.7	10450.0
166. HCO+H2O<=>H+CO+H2O	1.50E+18	-1.0	17000.0
167. HCO+M<=>H+CO+M	1.87E+17	-1.0	17000.0
H2	Enhanced by	2.000E+00	
H2O	Enhanced by	0.000E+00	
CH4	Enhanced by	2.000E+00	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO2	Enhanced by	2.000E+00	
C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
168. HCO+O2<=>HO2+CO	1.35E+13	.0	400.0
169. CH2OH+O2<=>HO2+CH2O	1.80E+13	.0	900.0
170. CH3O+O2<=>HO2+CH2O	4.28E-13	7.6	-3530.0
171. C2H+O2<=>HCO+CO	1.00E+13	.0	-755.0
172. C2H+H2<=>H+C2H2	5.68E+10	.9	1993.0
173. C2H3+O2<=>HCO+CH2O	4.58E+16	-1.4	1015.0
174. C2H4(+M)<=>H2+C2H2(+M)	8.00E+12	.4	86770.0
Low pressure limit:	.15800E+52	-.93000E+01	.97800E+05
TROE centering:	.73450E+00	.18000E+03	.10350E+04

.54170E+04

H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
175.	C2H5+O2<=>HO2+C2H4	8.40E+11	.0	3875.0
176.	HCCO+O2<=>OH+2CO	3.20E+12	.0	854.0
177.	2HCCO<=>2CO+C2H2	1.00E+13	.0	.0
178.	N+NO<=>N2+O	2.70E+13	.0	355.0
179.	N+O2<=>NO+O	9.00E+09	1.0	6500.0
180.	N+OH<=>NO+H	3.36E+13	.0	385.0
181.	N2O+O<=>N2+O2	1.40E+12	.0	10810.0
182.	N2O+O<=>2NO	2.90E+13	.0	23150.0
183.	N2O+H<=>N2+OH	3.87E+14	.0	18880.0
184.	N2O+OH<=>N2+HO2	2.00E+12	.0	21060.0
185.	N2O(+M)<=>N2+O(+M)	7.91E+10	.0	56020.0
Low pressure limit: .63700E+15 .00000E+00 .56640E+05				
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	6.250E-01		
186.	HO2+NO<=>NO2+OH	2.11E+12	.0	-480.0
187.	NO+O+M<=>NO2+M	1.06E+20	-1.4	.0
H2	Enhanced by	2.000E+00		
H2O	Enhanced by	6.000E+00		
CH4	Enhanced by	2.000E+00		
CO	Enhanced by	1.500E+00		
CO2	Enhanced by	2.000E+00		
C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
AR	Enhanced by	7.000E-01		
188.	NO2+O<=>NO+O2	3.90E+12	.0	-240.0
189.	NO2+H<=>NO+OH	1.32E+14	.0	360.0
190.	NH+O<=>NO+H	4.00E+13	.0	.0
191.	NH+H<=>N+H2	3.20E+13	.0	330.0
192.	NH+OH<=>HNO+H	2.00E+13	.0	.0

193.	$\text{NH}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{N}+\text{H}_2\text{O}$	2.00E+09	1.2	.0
194.	$\text{NH}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HNO}+\text{O}$	4.61E+05	2.0	6500.0
195.	$\text{NH}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{NO}+\text{OH}$	1.28E+06	1.5	100.0
196.	$\text{NH}+\text{N}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{H}$	1.50E+13	.0	.0
197.	$\text{NH}+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HNO}+\text{H}_2$	2.00E+13	.0	13850.0
198.	$\text{NH}+\text{NO}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{OH}$	2.16E+13	-.2	.0
199.	$\text{NH}+\text{NO}\rightleftharpoons\text{N}_2\text{O}+\text{H}$	3.65E+14	-.5	.0
200.	$\text{NH}_2+\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{NH}$	3.00E+12	.0	.0
201.	$\text{NH}_2+\text{O}\rightleftharpoons\text{H}+\text{HNO}$	3.90E+13	.0	.0
202.	$\text{NH}_2+\text{H}\rightleftharpoons\text{NH}+\text{H}_2$	4.00E+13	.0	3650.0
203.	$\text{NH}_2+\text{OH}\rightleftharpoons\text{NH}+\text{H}_2\text{O}$	9.00E+07	1.5	-460.0
204.	$\text{NNH}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{H}$	3.30E+08	.0	.0
205.	$\text{NNH}+\text{M}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{H}+\text{M}$	1.30E+14	-.1	4980.0
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
206.	$\text{NNH}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{N}_2$	5.00E+12	.0	.0
207.	$\text{NNH}+\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{N}_2$	2.50E+13	.0	.0
208.	$\text{NNH}+\text{O}\rightleftharpoons\text{NH}+\text{NO}$	7.00E+13	.0	.0
209.	$\text{NNH}+\text{H}\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{N}_2$	5.00E+13	.0	.0
210.	$\text{NNH}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{N}_2$	2.00E+13	.0	.0
211.	$\text{NNH}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{CH}_4+\text{N}_2$	2.50E+13	.0	.0
212.	$\text{H}+\text{NO}+\text{M}\rightleftharpoons\text{HNO}+\text{M}$	4.48E+19	-1.3	740.0
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
213.	$\text{HNO}+\text{O}\rightleftharpoons\text{NO}+\text{OH}$	2.50E+13	.0	.0
214.	$\text{HNO}+\text{H}\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{NO}$	9.00E+11	.7	660.0
215.	$\text{HNO}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{NO}+\text{H}_2\text{O}$	1.30E+07	1.9	-950.0
216.	$\text{HNO}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{NO}$	1.00E+13	.0	13000.0
217.	$\text{CN}+\text{O}\rightleftharpoons\text{CO}+\text{N}$	7.70E+13	.0	.0
218.	$\text{CN}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{NCO}+\text{H}$	4.00E+13	.0	.0
219.	$\text{CN}+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCN}+\text{OH}$	8.00E+12	.0	7460.0

220.	CN+O2<=>NCO+O	6.14E+12	.0	-440.0
221.	CN+H2<=>HCN+H	2.95E+05	2.5	2240.0
222.	NCO+O<=>NO+CO	2.35E+13	.0	.0
223.	NCO+H<=>NH+CO	5.40E+13	.0	.0
224.	NCO+OH<=>NO+H+CO	2.50E+12	.0	.0
225.	NCO+N<=>N2+CO	2.00E+13	.0	.0
226.	NCO+O2<=>NO+CO2	2.00E+12	.0	20000.0
227.	NCO+M<=>N+CO+M	3.10E+14	.0	54050.0
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
228.	NCO+NO<=>N2O+CO	1.90E+17	-1.5	740.0
229.	NCO+NO<=>N2+CO2	3.80E+18	-2.0	800.0
230.	HCN+M<=>H+CN+M	1.04E+29	-3.3	126600.0
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
231.	HCN+O<=>NCO+H	2.03E+04	2.6	4980.0
232.	HCN+O<=>NH+CO	5.07E+03	2.6	4980.0
233.	HCN+O<=>CN+OH	3.91E+09	1.6	26600.0
234.	HCN+OH<=>HOCN+H	1.10E+06	2.0	13370.0
235.	HCN+OH<=>HNCO+H	4.40E+03	2.3	6400.0
236.	HCN+OH<=>NH2+CO	1.60E+02	2.6	9000.0
237.	H+HCN(+M)<=>H2CN(+M)	3.30E+13	.0	.0
	Low pressure limit:	.14000E+27	-.34000E+01	.19000E+04
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
238.	H2CN+N<=>N2+CH2	6.00E+13	.0	400.0

239.	C+N2<=>CN+N	6.30E+13	.0	46020.0
240.	CH+N2<=>HCN+N	3.12E+09	.9	20130.0
241.	CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)	3.10E+12	.1	.0
	Low pressure limit:	.13000E+26	-.31600E+01	.74000E+03
	TROE centering:	.66700E+00	.23500E+03	.21170E+04
	.45360E+04			
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	1.000E+00	
242.	CH2+N2<=>HCN+NH	1.00E+13	.0	74000.0
243.	CH2(S)+N2<=>NH+HCN	1.00E+11	.0	65000.0
244.	C+NO<=>CN+O	1.90E+13	.0	.0
245.	C+NO<=>CO+N	2.90E+13	.0	.0
246.	CH+NO<=>HCN+O	4.10E+13	.0	.0
247.	CH+NO<=>H+NCO	1.62E+13	.0	.0
248.	CH+NO<=>N+HCO	2.46E+13	.0	.0
249.	CH2+NO<=>H+HNCO	3.10E+17	-1.4	1270.0
250.	CH2+NO<=>OH+HCN	2.90E+14	-.7	760.0
251.	CH2+NO<=>H+HCNO	3.80E+13	-.4	580.0
252.	CH2(S)+NO<=>H+HNCO	3.10E+17	-1.4	1270.0
253.	CH2(S)+NO<=>OH+HCN	2.90E+14	-.7	760.0
254.	CH2(S)+NO<=>H+HCNO	3.80E+13	-.4	580.0
255.	CH3+NO<=>HCN+H2O	9.60E+13	.0	28800.0
256.	CH3+NO<=>H2CN+OH	1.00E+12	.0	21750.0
257.	HCNN+O<=>CO+H+N2	2.20E+13	.0	.0
258.	HCNN+O<=>HCN+NO	2.00E+12	.0	.0
259.	HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.20E+13	.0	.0
260.	HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.20E+13	.0	.0
261.	HCNN+H<=>CH2+N2	1.00E+14	.0	.0
262.	HNCO+O<=>NH+CO2	9.80E+07	1.4	8500.0
263.	HNCO+O<=>HNO+CO	1.50E+08	1.6	44000.0
264.	HNCO+O<=>NCO+OH	2.20E+06	2.1	11400.0
265.	HNCO+H<=>NH2+CO	2.25E+07	1.7	3800.0
266.	HNCO+H<=>H2+NCO	1.05E+05	2.5	13300.0
267.	HNCO+OH<=>NCO+H2O	3.30E+07	1.5	3600.0
268.	HNCO+OH<=>NH2+CO2	3.30E+06	1.5	3600.0
269.	HNCO+M<=>NH+CO+M	1.18E+16	.0	84720.0

H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
270.	HCNO+H<=>H+HNCO	2.10E+15	-.7	2850.0	
271.	HCNO+H<=>OH+HCN	2.70E+11	.2	2120.0	
272.	HCNO+H<=>NH2+CO	1.70E+14	-.8	2890.0	
273.	HOCN+H<=>H+HNCO	2.00E+07	2.0	2000.0	
274.	HCCO+NO<=>HCNO+CO	9.00E+12	.0	.0	
275.	CH3+N<=>H2CN+H	6.10E+14	-.3	290.0	
276.	CH3+N<=>HCN+H2	3.70E+12	.1	-90.0	
277.	NH3+H<=>NH2+H2	5.40E+05	2.4	9915.0	
278.	NH3+OH<=>NH2+H2O	5.00E+07	1.6	955.0	
279.	NH3+O<=>NH2+OH	9.40E+06	1.9	6460.0	
280.	NH+CO2<=>HNO+CO	1.00E+13	.0	14350.0	
281.	CN+NO2<=>NCO+NO	6.16E+15	-.8	345.0	
282.	NCO+NO2<=>N2O+CO2	3.25E+12	.0	-705.0	
283.	N+CO2<=>NO+CO	3.00E+12	.0	11300.0	
284.	O+CH3=>H+H2+CO	3.37E+13	.0	.0	
285.	O+C2H4<=>H+CH2CHO	6.70E+06	1.8	220.0	
286.	O+C2H5<=>H+CH3CHO	1.10E+14	.0	.0	
287.	OH+HO2<=>O2+H2O	5.00E+15	.0	17330.0	
	Declared duplicate reaction...				
288.	OH+CH3=>H2+CH2O	8.00E+09	.5	-1755.0	
289.	CH+H2(+M)<=>CH3(+M)	1.97E+12	.4	-370.0	
	Low pressure limit:	.48200E+26	-.28000E+01	.59000E+03	
	TROE centering:	.57800E+00	.12200E+03	.25350E+04	
	.93650E+04				
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
290.	CH2+O2=>2H+CO2	5.80E+12	.0	1500.0	
291.	CH2+O2<=>O+CH2O	2.40E+12	.0	1500.0	
292.	CH2+CH2=>2H+C2H2	2.00E+14	.0	10989.0	

293. CH <sub>2</sub> (S)+H <sub>2</sub> O=>H <sub>2</sub> +CH <sub>2</sub> O	6.82E+10	.3	-935.0
294. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O <sub>2</sub> <=>O+CH <sub>2</sub> CHO	3.03E+11	.3	11.0
295. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O <sub>2</sub> <=>HO <sub>2</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	1.34E+06	1.6	-384.0
296. O+CH <sub>3</sub> CHO<=>OH+CH <sub>2</sub> CHO	2.92E+12	.0	1808.0
297. O+CH <sub>3</sub> CHO=>OH+CH <sub>3</sub> +CO	2.92E+12	.0	1808.0
298. O <sub>2</sub> +CH <sub>3</sub> CHO=>HO <sub>2</sub> +CH <sub>3</sub> +CO	3.01E+13	.0	39150.0
299. H+CH <sub>3</sub> CHO<=>CH <sub>2</sub> CHO+H <sub>2</sub>	2.05E+09	1.2	2405.0
300. H+CH <sub>3</sub> CHO=>CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> +CO	2.05E+09	1.2	2405.0
301. OH+CH <sub>3</sub> CHO=>CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O+CO	2.34E+10	.7	-1113.0
302. HO <sub>2</sub> +CH <sub>3</sub> CHO=>CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +CO	3.01E+12	.0	
11923.0			
303. CH <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub> CHO=>CH <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub> +CO	2.72E+06	1.8	5920.0
304. H+CH <sub>2</sub> CO(+M)<=>CH <sub>2</sub> CHO(+M)	4.87E+11	.4	-1755.0
Low pressure limit:	.10120E+43	-.76300E+01	.38540E+04
TROE centering:	.46500E+00	.20100E+03	.17730E+04
.53330E+04			
H <sub>2</sub>	Enhanced by	2.000E+00	
H <sub>2</sub> O	Enhanced by	6.000E+00	
CH <sub>4</sub>	Enhanced by	2.000E+00	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO <sub>2</sub>	Enhanced by	2.000E+00	
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	Enhanced by	3.000E+00	
AR	Enhanced by	7.000E-01	
305. O+CH <sub>2</sub> CHO=>H+CH <sub>2</sub> +CO <sub>2</sub>	1.50E+14	.0	.0
306. O <sub>2</sub> +CH <sub>2</sub> CHO=>OH+CO+CH <sub>2</sub> O	1.81E+10	.0	.0
307. O <sub>2</sub> +CH <sub>2</sub> CHO=>OH+2HCO	2.35E+10	.0	.0
308. H+CH <sub>2</sub> CHO<=>CH <sub>3</sub> +HCO	2.20E+13	.0	.0
309. H+CH <sub>2</sub> CHO<=>CH <sub>2</sub> CO+H <sub>2</sub>	1.10E+13	.0	.0
310. OH+CH <sub>2</sub> CHO<=>H <sub>2</sub> O+CH <sub>2</sub> CO	1.20E+13	.0	.0
311. OH+CH <sub>2</sub> CHO<=>HCO+CH <sub>2</sub> OH	3.01E+13	.0	.0
312. CH <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> (+M)<=>C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (+M)	9.43E+12	.0	.0
Low pressure limit:	.27100E+75	-.16820E+02	.13065E+05
TROE centering:	.15270E+00	.29100E+03	.27420E+04
.77480E+04			
H <sub>2</sub>	Enhanced by	2.000E+00	
H <sub>2</sub> O	Enhanced by	6.000E+00	
CH <sub>4</sub>	Enhanced by	2.000E+00	
CO	Enhanced by	1.500E+00	
CO <sub>2</sub>	Enhanced by	2.000E+00	
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	Enhanced by	3.000E+00	
AR	Enhanced by	7.000E-01	
313. O+C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> <=>OH+C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	1.93E+05	2.7	3716.0

314.	$\text{H}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_7+\text{H}_2$	1.32E+06	2.5	6756.0
315.	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_7+\text{H}_2\text{O}$	3.16E+07	1.8	934.0
316.	$\text{C}_3\text{H}_7+\text{H}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_8$	3.78E+02	2.7	1500.0
317.	$\text{CH}_3+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_7+\text{CH}_4$	9.03E-01	3.6	7154.0
318.	$\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_7(+\text{M})$	2.55E+06	1.6	5700.0
	Low pressure limit:	.30000E+64	-.14600E+02	.18170E+05
	TROE centering:	.18940E+00	.27700E+03	.87480E+04
	.78910E+04			
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
319.	$\text{O}+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{CH}_2\text{O}$	9.64E+13	.0	.0
320.	$\text{H}+\text{C}_3\text{H}_7(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_8(+\text{M})$	3.61E+13	.0	.0
	Low pressure limit:	.44200E+62	-.13545E+02	.11357E+05
	TROE centering:	.31500E+00	.36900E+03	.32850E+04
	.66670E+04			
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
321.	$\text{H}+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_5$	4.06E+06	2.2	890.0
322.	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{CH}_2\text{OH}$	2.41E+13	.0	.0
323.	$\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{C}_3\text{H}_8$	2.55E+10	.3	-943.0
324.	$\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_5+\text{CH}_2\text{O}$	2.41E+13	.0	.0
325.	$\text{CH}_3+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons 2\text{C}_2\text{H}_5$	1.93E+13	-.3	.0

NOTE: A units mole-cm-sec-K, E units cal/mole

NO ERRORS FOUND ON INPUT...CHEMKIN LINKING FILE WRITTEN.

WORKING SPACE REQUIREMENTS ARE

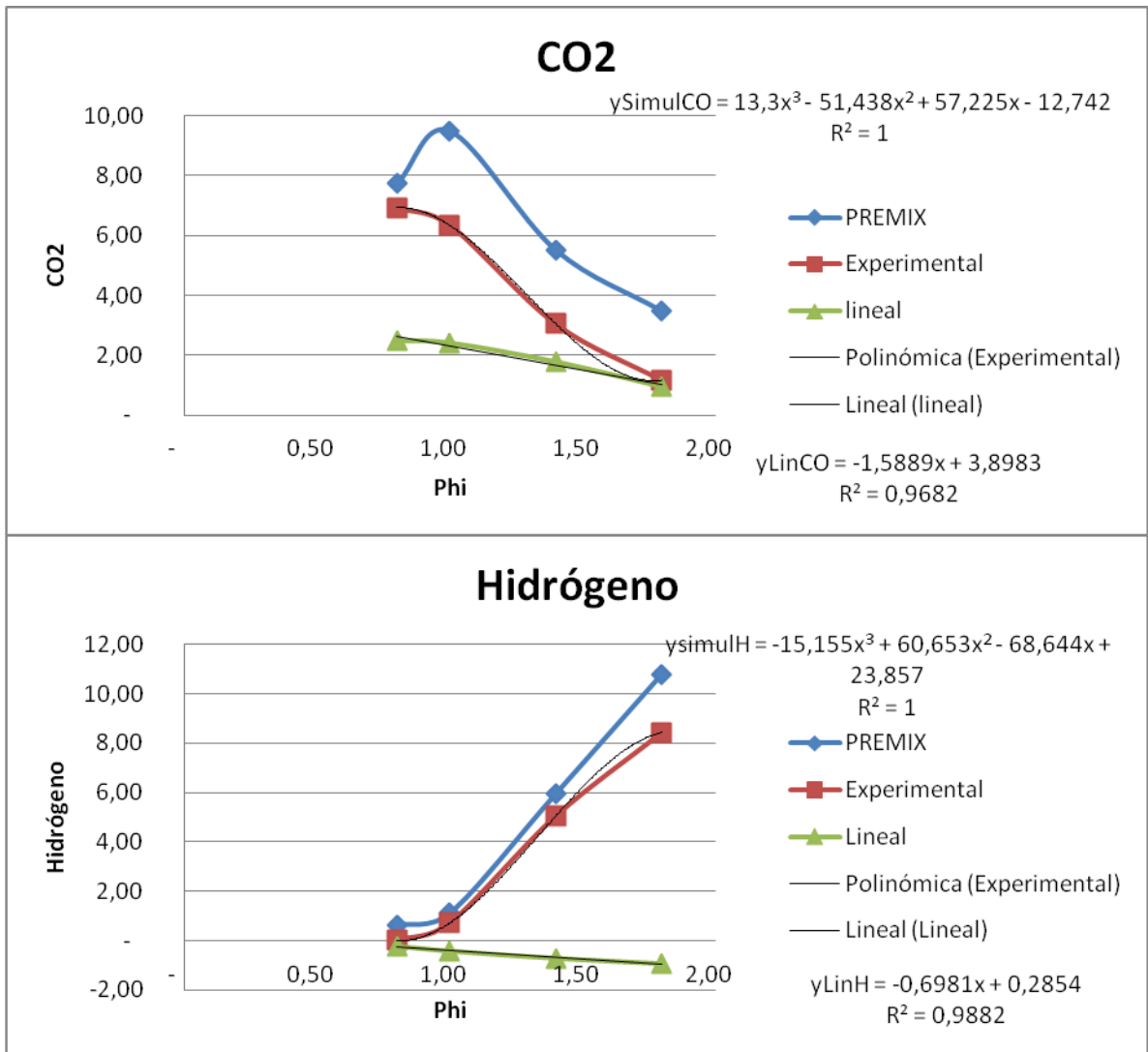
INTEGER: 5554

REAL: 5066  
CHARACTER: 58

## ANEXO E. ANÁLISIS DEL MODELO

Para comprobar si el modelo es adecuado para el análisis del problema de estudio, se analizó la relación estadística ente los parámetros de análisis experimentales y simulados en PREMIX de acuerdo al siguiente proceso.

- Determinación de la ecuación que explica el comportamiento de las emisiones y generación de hidrógeno con base en la simulación del proceso de combustión ( $y_{\text{simulCO}}$ ,  $y_{\text{simulH}}$ )



- Linealización de las ecuaciones (aplicando logaritmos), y análisis de tendencia y correlación de los datos experimentales linealizados

- Análisis estadístico de regresión

<i>Estadísticas de la regresión Emisiones</i>	
Coefficiente de correlación múltiple	0,98395
Coefficiente de determinación R <sup>2</sup>	0,96816
R <sup>2</sup> ajustado	0,95224
Error típico	0,15650
Observaciones	4

ANÁLISIS DE VARIANZA

	<i>Grados de libertad</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>	<i>Valor crítico de F</i>
Regresión	1	1,48949004	1,48949004	60,81
Residuos	2	0,04898487	0,02449244	4287
Total	3	1,53847492		0,01604873

	<i>Coefficientes</i>	<i>Error típico</i>	<i>Estadístico t</i>	<i>Probabilidad inferior 95%</i>	<i>Superior 95%</i>	<i>Inferior 95,0%</i>	<i>Superior 95,0%</i>
Intercepción	3,89829952	0,26643302	14,6314432	0,0046386	2,75193078	5,04466827	2,75193078
Variable X 1	-1,58888621	0,20374642	-7,79835159	0,0160487	2,4655363	0,71223613	2,46553613

<i>Estadísticas de la regresión Hidrógeno</i>	
---	--

Coeficiente de correlación múltiple	0,99410
Coeficiente de determinación R <sup>2</sup>	0,98824
R <sup>2</sup> ajustado	0,98237
Error típico	0,04134
Observaciones	777
	4

ANÁLISIS DE VARIANZA

	<i>Grados de libertad</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>	<i>Valor crítico de F</i>
Regresión	1	0,28750226	0,28750226	168,16553
Residuos	2	0,00341928	0,00170964	0,00589
Total	3	0,29092154		

	<i>Coefficientes</i>	<i>Error típico</i>	<i>Estadístico t</i>	<i>Probabilidad inferior 95%</i>	<i>Superior 95%</i>	<i>Inferior 95,0%</i>	<i>Superior 95,0%</i>
Intercepción	0,2853835	0,07039214	4,05419545	0,0557968	-	-	-
Variable X 1	0,69806301	0,05383022	12,9678656	0,005894	0,92967574	0,46645029	0,588248944

## ANEXO F. REGLAS DE CONOCIMIENTO PARA EL MODELO DE LÓGICA DIFUSA.

```
[System]
Name='modelo ecoef3'
Type='mamdani'
Version=2.0
NumInputs=3
NumOutputs=1
NumRules=90
AndMethod='min'
OrMethod='max'
ImpMethod='min'
AggMethod='max'
DefuzzMethod='centroid'
```

```
[Input1]
Name='Eficiencia_Energética'
Range=[70 98]
NumMFs=5
MF1='Muy_bajo': 'gaussmf', [2.974 70]
MF2='Bajo': 'gaussmf', [2.97 77]
MF3='Medio': 'gaussmf', [2.974 84]
MF4='Alto': 'gaussmf', [2.97 91]
MF5='Muy_alto': 'gaussmf', [2.97 97.9]
```

```
[Input2]
Name='CO_2'
Range=[9 11.1]
NumMFs=5
MF1='Muy_Bajo': 'gaussmf', [0.223 9]
MF2='Bajo': 'gaussmf', [0.223 9.525]
MF3='Medio': 'gaussmf', [0.223 10.05]
MF4='Alto': 'gaussmf', [0.223 10.57]
MF5='Muy_Alto': 'gaussmf', [0.223 11.1]
```

```
[Input3]
Name='Temperatura'
Range=[1910 2120]
NumMFs=5
MF1='Muy_Bajo': 'gaussmf', [22.3 1910]
```

MF2='Bajo':'gausmf',[22.3 1963]  
MF3='Medio':'gausmf',[22.3 2015]  
MF4='Alto':'gausmf',[22.3 2068]  
MF5='Muy\_Alto':'gausmf',[22.3 2120]

[Output1]

Name='Ecoeficiencia'

Range=[0 1]

NumMFs=5

MF1='Muy\_Bajo':'gausmf',[0.1062 0]

MF2='Bajo':'gausmf',[0.1062 0.25]

MF3='Medio':'gausmf',[0.1062 0.5]

MF4='Alto':'gausmf',[0.1062 0.75]

MF5='Muy\_Alto':'gausmf',[0.1062 1]

[Rules]

1 0 0, 1 (1) : 1

2 1 0, 2 (1) : 1

2 1 5, 1 (1) : 1

2 2 1, 2 (1) : 1

2 2 2, 2 (1) : 1

2 2 3, 2 (1) : 1

2 2 4, 2 (1) : 1

2 2 5, 1 (1) : 1

2 3 1, 2 (1) : 1

2 3 2, 2 (1) : 1

2 3 3, 2 (1) : 1

2 3 4, 2 (1) : 1

2 3 5, 1 (1) : 1

2 4 0, 2 (1) : 1

2 5 1, 2 (1) : 1

2 5 2, 1 (1) : 1

2 5 3, 1 (1) : 1

2 5 4, 1 (1) : 1

2 5 5, 1 (1) : 1

3 1 1, 2 (1) : 1

3 1 2, 3 (1) : 1

3 1 3, 3 (1) : 1

3 1 4, 4 (1) : 1

3 1 5, 1 (1) : 1

3 2 1, 2 (1) : 1

3 2 2, 3 (1) : 1  
3 2 3, 3 (1) : 1  
3 2 4, 4 (1) : 1  
3 2 5, 1 (1) : 1  
3 3 1, 2 (1) : 1  
3 3 2, 3 (1) : 1  
3 3 3, 3 (1) : 1  
3 3 4, 4 (1) : 1  
3 3 5, 1 (1) : 1  
3 4 1, 2 (1) : 1  
3 4 2, 2 (1) : 1  
3 4 3, 2 (1) : 1  
3 4 4, 2 (1) : 1  
3 4 5, 1 (1) : 1  
3 5 1, 1 (1) : 1  
3 5 2, 1 (1) : 1  
3 5 3, 1 (1) : 1  
3 5 4, 1 (1) : 1  
3 5 5, 1 (1) : 1  
4 1 1, 2 (1) : 1  
4 1 2, 3 (1) : 1  
4 1 3, 4 (1) : 1  
4 1 4, 5 (1) : 1  
4 1 5, 1 (1) : 1  
4 2 1, 2 (1) : 1  
4 2 2, 3 (1) : 1  
4 2 3, 3 (1) : 1  
4 2 4, 4 (1) : 1  
4 2 5, 1 (1) : 1  
4 3 1, 2 (1) : 1  
4 3 2, 3 (1) : 1  
4 3 3, 4 (1) : 1  
4 3 4, 5 (1) : 1  
4 3 5, 1 (1) : 1  
4 4 1, 2 (1) : 1  
4 4 2, 2 (1) : 1  
4 4 3, 2 (1) : 1  
4 4 4, 2 (1) : 1  
4 4 5, 1 (1) : 1  
4 5 0, 1 (1) : 1  
5 1 1, 2 (1) : 1

5 1 2, 3 (1) : 1  
5 1 3, 3 (1) : 1  
5 1 4, 2 (1) : 1  
5 1 5, 1 (1) : 1  
5 2 1, 2 (1) : 1  
5 2 2, 2 (1) : 1  
5 2 3, 2 (1) : 1  
5 2 4, 2 (1) : 1  
5 2 5, 1 (1) : 1  
5 3 1, 2 (1) : 1  
5 3 2, 2 (1) : 1  
5 3 3, 2 (1) : 1  
5 3 4, 2 (1) : 1  
5 3 5, 1 (1) : 1  
5 4 -1, 2 (1) : 1  
5 4 -2, 2 (1) : 1  
5 4 -3, 2 (1) : 1  
5 4 -4, 2 (1) : 1  
5 4 -5, 1 (1) : 1  
5 5 -1, 1 (1) : 1  
5 5 -2, 1 (1) : 1  
5 5 -3, 1 (1) : 1  
5 5 -4, 1 (1) : 1  
5 5 -5, 1 (1) : 1

## ANEXO G. DISEÑO DE LA RED COMBUSTIBLE

Caso de validación

### 1. Areas

AREA
Cracking
Petroquímica
Refinación
Gas de Campo
Generación de Hidrógeno

Las cinco áreas de proceso tienen la siguiente participación de aportes a la red combustible: Cracking 40% - Petroquímica 37% - Refinación 18% - Gas de Campo 4% - Generación de Hidrógeno 1%

### 2. Evaluación de Corrientes

#### INVENTARIO DE ÁREAS DE PROCESO Y CORRIENTES

#### EVALUACIÓN DE CORRIENTES

ID	CORRIENTES APORTANTES DE GAS COMBUSTIBLE PC	Resultado PC
1	U-2700:(FI-27512) GLP DE D-2755 A GAS COMB.	Corriente a evaluación
2	U-2700:(FI-27553) PROPANO DESVIO DE T-2756 A GAS COMB.	Corriente a evaluación
3	U-2870:(FR-28714) GAS DE COLA DE T-2871	Corriente a evaluación
4	U-4200: (FET- PIC43005) GAS ESPONJA DE UOP II	Corriente a evaluación
5	U-4200:(FIC-42537) PROPANO DE T-	Corriente a evaluación

	4255		
6	U550:(U550-GC_FT_55302) Gas Combustible 350# a lado frio		Corriente a evaluación
7	U-1300: (FI-13035) GAS RESIDUAL DE D-1310		Corriente a evaluación
8	U-1100:(FCAL-1100-03) GAS DE CIMA DE D-1103		Corriente a evaluación
9	U-1110:(FCAL-1110-03) GAS DE CIMA DE D-1113		Corriente a evaluación
10	U-1120:(FCAL-1120-02) GAS DE CIMA DEL D-1123		Corriente a evaluación
11	U-4100: (FET-41000) ETANO A GAS COMBUSTIBLE		Corriente a evaluación
12	U-4100:(FR-41177) GAS RESID. 75# A D-4102		Corriente a evaluación
13	U-4300:(FI-43011) GAS DE COLA DE D-4306	679,65	Corriente descartable
14	U-2700:(FETTEA6) GAS-PILOTOS A TEA No.6	2690,47	Corriente descartable
15	U-2760:(FI-27547) GAS COMBUSTIBLE A H-2751	2690,47	Corriente descartable
16	U-2880:(FI-28812) GAS COMBUSTIBLE A H-2881	2690,47	Corriente descartable
17	U-4200:(FI-42074) GAS COMBUSTIBLE A H-4201	679,65	Corriente descartable
18	U-4300:(FI-43006) GAS COMBUSTIBLE A H-4301	679,65	Corriente descartable
19	U-4360:(FI-43718) GAS COMBUSTIBLE A H-4362	679,65	Corriente descartable
20	U-4360:(FI-43807) GAS-PILOTOS A TEA No. 7	679,65	Corriente descartable
21	U-1150: (FR-11512) HIDROGENO DE D-1160	294,38	Corriente descartable

22	U-4100:(FRC-41126) GAS RICO EN METANO DE D-4114	711,59	Corriente descartable
23	U-4100:(FRC-41128) GAS RICO EN H2 DE D-4134	320,50	Corriente descartable
24	U-2500:(FI-25031) GAS COMBUSTIBLE A H-2501	2690,47	Corriente descartable
25	U-2800:(FI-28040) GAS COMBUSTIBLE A H-2801	2690,47	Corriente descartable
26	U-1150:(FIC-11501) GAS RESID. 350 A D-1154	745,24	Corriente descartable
27	U-2600:(FI-26001) GAS RESID. 350 A R-2601	745,24	Corriente descartable
28	U-300:(FI-03063) GAS RESIDUAL DE MODELO IV	1263,62	Corriente tipo
29	U-4300:(FIC-43022) ETANO-ETILENO DE D-4303	1567,52	Corriente tipo
30	U550:(U550- GC_FI_55077) Gas Combustible de D- 562 Producto a Refinería	1266,34	Corriente tipo
31	U-300:(FETTEA1) GAS-PILOTOS A TEA 1	1251,06	Corriente tipo
32	U-470:(FI-47013) GAS COMBUSTIBLE A H-472	1133,47	Corriente tipo
33	U-470:(FI-47140) GAS COMBUSTIBLE A H-487	1133,47	Corriente tipo
34	U-500:(FI-50085) GAS COMBUSTIBLE DE ORTHOFLOW	1266,34	Corriente tipo
35	U-500: (FI-50010) GAS COMBUSTIBLE A R-501	1266,34	Corriente tipo
36	U-500: (FI-50009) GAS COMBUSTIBLE A R-520 VERTICAL J-BEND	1266,34	Corriente tipo

37	U-4100: (FET-41001) ETANO-ETILENO A GAS COMBUSTIBLE	1431,51	Corriente tipo
38	U-4100: (FET-41002) ETILENO A GAS COMBUSTIBLE	1523,02	Corriente tipo
39	U-1000:(FIC-10503) GAS COMBUSTIBLE A H-1001	808,11	Corriente tipo
40	U-1100:(FETTEA3) GAS-PILOTOS A TEA No.3	808,11	Corriente tipo
41	U-1100:(FIC-11004) GAS COMBUSTIBLE A H-1101	808,11	Corriente tipo
42	U-1110:(FIC-11104) GAS COMBUSTIBLE A H-1111	808,11	Corriente tipo
43	U-1120:(FIC-11204) GAS COMBUSTIBLE A H-1121	808,11	Corriente tipo
44	U-1150:(FR-11502) GAS COMBUSTIBLE A H-1151	808,11	Corriente tipo
45	U-4100:(FETTEA4) GAS-PILOTOS A TEA No.4	808,11	Corriente tipo
46	U-4100:(FETTEA5) GAS-PILOTOS A TEA No.5	808,11	Corriente tipo
47	U-700:(FI-7009) GAS COMBUSTIBLE A H- 751/H752	808,11	Corriente tipo
48	U-130 VAC:(FIT- 1310) GAS COMBUSTIBLE A H- 131	1251,06	Corriente tipo
49	U-150 ATM:(FR- 15012) GAS COMBUSTIBLE A H- 150	1251,06	Corriente tipo
50	U-200 ATM:(FI- 268) GAS COMBUSTIBLE A H- 201	1251,06	Corriente tipo
51	U-200 ATM:(FT-271) GAS COMBUSTIBLE A H-202 B	1251,06	Corriente tipo
52	U-200 ATM:(FT-275) GAS COMBUSTIBLE A H-202 A	1251,06	Corriente tipo

53	U-2000 ATM:(FIT-20079) GAS COMBUSTIBLE A H-2001	1251,06	Corriente tipo
54	U-2003 VAC:(FIT-20089) GAS COMBUSTIBLE A H-2002	1251,06	Corriente tipo
55	U-2100 ATM:(FRT-2115) GAS COMBUSTIBLE A H-2101	1251,06	Corriente tipo
56	U-2103 VAC:(FRT-2138) GAS COMBUSTIBLE A H-2102	1251,06	Corriente tipo
57	U-253 VAC:(FI-02549) GAS COMBUSTIBLE A H-254	1251,06	Corriente tipo
58	U250 ATM:(FI-02547) GAS COMBUSTIBLE A H-253	1251,06	Corriente tipo
59	U550:(U550-GC_FT_50300) Gas Combustible de D-588 Purgas Instrumentos Reactor	1145,31	Corriente tipo
60	U550:(U550-GC_FT_55301) Gas Combustible de D-588 a Pilotos H-552	955,31	Corriente tipo
61	U550:(U550-GC_FT_55303) Gas Combustible Payoa purga Cabezal TEA No.2	1145,31	Corriente tipo
62	U550:(U550-GC_FT_55304) Gas Combustible Payoa pilotos TEA No.2	1145,31	Corriente tipo
63	U-1300 PLA:(FI-13047) GAS COMBUSTIBLE A H-1310	1007,57	Corriente tipo
64	U-1300 PLA:(FI-13045) GAS COMBUSTIBLE A H-	1007,57	Corriente tipo

	1309	
65	U-1300 PLA:(FI-13044) GAS COMBUSTIBLE A H-1304	1007,57 Corriente tipo
66	U-1300 PRE:(FI-13041) GAS COMBUSTIBLE A H-1301	1007,57 Corriente tipo
67	U-1300 UNI:(FI-13042) GAS COMBUSTIBLE A H-1302	1007,57 Corriente tipo
68	U-1300 UNI:(FI-13043) GAS COMBUSTIBLE A H-1303	1007,57 Corriente tipo
69	U-1600:(FR-1613) GAS COMBUSTIBLE A H-1601	1007,57 Corriente tipo
70	U-4100:(FR-41014) GAS COMBUSTIBLE A H-4100B	924,36 Corriente tipo
71	U-4100:(FR-41021) GAS COMBUSTIBLE A H-4100C	924,36 Corriente tipo
72	U-2650:(FI-26526) GAS COMBUSTIBLE A H-2651	934,00 Corriente tipo
73	U-2650:(FI-26529) GAS COMBUSTIBLE A H-2652	934,00 Corriente tipo
74	GCB:(FI-38706) GAS GUAJIRA DE ALTA 600 lbs A GCB	906,61 Corriente tipo
75	GCB:(FI-38703) GAS DE CAMPOS (PAYOA-PROVINCIA-CANTAGALLO-LLANITO-OPON-CENTO) A GCB	956,00 Corriente tipo
76	U-2760:(FI-27548) GAS DE COLA DE T-2758	863,34 Corriente tipo

77	U-2760:(FIC-27530) GAS RESIDUAL(Desvio) DE U-2760	1167,67	Corriente tipo
78	U-4200:(FIC-42523) GAS COMBUSTIBLE DE D-4254	1044,66	Corriente tipo
79	U-1300 PLA:(FR- 1344) GAS COMBUSTIBLE A H- 1307	1007,57	Corriente tipo
80	U-4100:(FR-41007) GAS COMBUSTIBLE A H-4100A	924,36	Corriente tipo
81	U-500:(FI-55067) GAS COMBUSTIBLE A H-552	1145,31	Corriente tipo
82	U-2600:(FI-26016) GAS COMBUSTIBLE A H-2601	934,00	Corriente tipo
83	GCB:(FI-38701) CENTRAGAS-GAS- GUAJIRA A GCB	906,61	Corriente tipo
84	U550:(U550- GC_FT_55021) Gas Comb. de D-588 a Quemadores H-552	955,31	Corriente tipo

El inventario de Corrientes permite apreciar un total de 84 Corrientes aportantes. Se descartan en el análisis 3 corrientes de gas (GCB: (FET-GCB-04) GAS COMBUSTIBLE A PLANTA DESHIDRATADORA - ELC. GCB: (FET-GCB-05) GAS A TERMOBARRANCA. ) Ya que estas son

Ejecutar MARCO "PC". Se identifican 57 Corrientes típicas. 12 para evaluación y 15 corrientes descartables

vendidas a terceros  
y no se analizan  
como corrientes de  
aporte a la red  
combustible.

### 3. Evaluación de Mezclas

ID		Indice de Wobbe	Criterio	Mezcla seleccionada
28	0,0648	4963,968171	Corriente descartable	
29	0,0743	5750,673143	Corriente descartable	
30	0,0645	4986,208881	Corriente descartable	
31	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
32	0,0517	4984,99536	Corriente descartable	
33	0,0517	4984,99536	Corriente descartable	
34	0,0645	4986,208881	Corriente descartable	
35	0,0645	4986,208881	Corriente descartable	
36	0,0645	4986,208881	Corriente descartable	
37	0,0674	5513,970495	Corriente descartable	
38	0,0724	5660,259253	Corriente descartable	
39	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
40	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
41	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
42	0,0457	3780,179138	Corriente	

			descartable	
43	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
44	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
45	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
46	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
47	0,0457	3780,179138	Corriente descartable	
48	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
49	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
50	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
51	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
52	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
53	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
54	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
55	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
56	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
57	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
58	0,0648	4914,627832	Corriente descartable	
59	0,058	4755,640927	intercambiable	
60	0,0431	4601,566353	intercambiable	
61	0,058	4755,640927	intercambiable	
62	0,058	4755,640927	intercambiable	
63	0,0468	4657,493973	intercambiable	
64	0,0468	4657,493973	intercambiable	
65	0,0468	4657,493973	intercambiable	
66	0,0468	4657,493973	intercambiable	

67	0,0468	4657,493973	intercambiable	
68	0,0468	4657,493973	intercambiable	
69	0,0468	4657,493973	intercambiable	
70	0,0477	4232,353696	intercambiable	
71	0,0477	4232,353696	intercambiable	
72	0,044	4452,670292	intercambiable	
73	0,044	4452,670292	intercambiable	
74	0,0415	4450,373457	intercambiable	
75	0,0444	4536,97522	intercambiable	
76	0,0449	4074,353367	intercambiable	1
77	0,0656	4558,985414	intercambiable	1
78	0,056	4414,494219	intercambiable	1
79	0,0468	4657,493973	intercambiable	1
80	0,0477	4232,353696	intercambiable	1
81	0,058	4755,640927	intercambiable	1
82	0,044	4452,670292	intercambiable	1
83	0,0415	4450,373457	intercambiable	Gas de Referencia
84	0,0431	4601,566353	intercambiable	Gas de Referencia

Evaluando criterio de intercambiabilidad en las corrientes tipo, se identifican 26 corrientes intercambiables (Índice de Wobbe entre 4000-4900 BTU/Pie3) Al analizar la composición de las mezclas se establece que las 26 corrientes están representadas por 9 mezclas, de las cuales, 2 corresponden a Gas Natural (Gas de referencia) EJECUTAR MACRO 1.

#### 4. Ecoeficiencia

	Eficiencia	Emisiones	Temperatura	Indice Ecoeficiencia
76	87,44	6,48	1510	Temperatura fuera de Rango

77	87,65	8,76	1680	Temperatura fuera de Rango
78	87,6	7,84	1674	Temperatura fuera de Rango
79	87,32	7,56	1350	Temperatura fuera de Rango
80	87,38	6,93	1300	Temperatura fuera de Rango
81	87,68	8,59	1810	0,251
82	87,27	7,01	2000	0,661
83	87,25	6,8	2019	0,676
84	87,28	6,8	2019	0,677

Al aplicar criterios de Ecoeficiencia, se alcanza a descubrir que de las mezclas analizadas, aunque los valores de emisiones y eficiencia son similares, para 5 mezclas los valores de temperatura no son suficientes para cumplir los requerimientos del proceso. La Mezcla U-2600:(FI-26016) GAS COMBUSTIBLE A H-2601 proveniente del área de refinación, alcanza el mayor valor de Ecoeficiencia (Además de los gases de Referencia) por lo cual es la mejor candidata a ser utilizada como mezcla combustible. La mezcla U-500:(FI-55067) GAS COMBUSTIBLE A H-552 proveniente del área de Cracking, con un menor valor de ecoeficiencia, por sus propiedades puede ser utilizada en combinación con Gas natural

## Observaciones

Durante el estudio se encontraron 58 corrientes denominadas como gas combustible, las cuales son comunmente desviadas a otros procesos dentro de la planta de operaciones.

Por esto es necesario destacar que este diseño de red, y los procesos aquí aplicados, son válidos para el estudio de los hornos H2801B y H2801A. Para equipos y procesos diferentes debe aplicarse el proceso de diseño nuevamente tomando en cuenta las características operacionales particulares del proceso

