

**ANÁLISIS CINÉTICO DE LA RUPTURA TÉRMICA DEL HEXANO EN EL
DISEÑO DE UN REACTOR TIPO COIL Y SU CORRELACIÓN CON EL ÍNDICE
DE SEVERIDAD**

**DIANA CAROLINA LÓPEZ GARCÍA
YURI LIZETH LOZANO DUARTE**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2015

**ANÁLISIS CINÉTICO DE LA RUPTURA TÉRMICA DEL HEXANO EN EL
DISEÑO DE UN REACTOR TIPO COIL Y SU CORRELACIÓN CON EL ÍNDICE
DE SEVERIDAD**

**DIANA CAROLINA LÓPEZ GARCÍA
YURI LIZETH LOZANO DUARTE**

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

**Director
RAMIRO MARTÍNEZ REY
Ingeniero Químico Ph. D.**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2015

AGRADECIMIENTOS

A Dios, por ser nuestra fuente de sabiduría, fuerza y seguridad en medio de cada paso que damos, por cada puerta que nos ha abierto y cada recurso que ha provisto en nuestro camino.

A nuestros familiares, en especial a nuestros padres por todo el apoyo y respaldo, por su anhelo de vernos avanzar en nuestra vida profesional y cada sacrificio hecho en pro de nuestros sueños.

A nuestro director, el profesor Ramiro Martínez, por guiarnos en la realización de este proyecto e incentivar nuestro interés por la investigación, la excelencia y el trabajo en equipo.

A cada uno de nuestros compañeros, profesores, amigos y personas que nos inspiran a ser mejores, nos enseñan y aportan cosas significativas en nuestras vidas con sus palabras, ayuda y ejemplo.

A todos ellos, *¡Muchas Gracias!*

Diana y Yuri

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	17
1. CONCEPTOS TEÓRICOS	21
1.1 MECANISMO DE RICE-HERZFELD	21
1.2 REACTOR TIPO “COIL”	21
1.3 ÍNDICE DE SEVERIDAD	22
2. DESCRIPCIÓN METODOLÓGICA	23
2.1 SELECCIÓN DE LOS PRODUCTOS PRINCIPALES	24
2.2 DISEÑO DEL MECANISMO DE REACCIÓN	24
2.3 DETERMINACIÓN DEL MODELO CINÉTICO	27
2.4 SELECCIÓN DEL “SOLVER” A UTILIZAR EN MATLAB	29
2.5 DISEÑO DEL REACTOR TIPO “COIL” EN CONDICIONES NO ISOTÉRMICAS Y NO ISOBÁRICAS	32
2.6 DESARROLLO DEL SISTEMA DAE Y APLICACIÓN DE LA FUNCIÓN ODESET DE MATLAB	37
2.7 DETERMINACIÓN DEL ÍNDICE DE SEVERIDAD	39
3. RESULTADOS: PRESENTACIÓN, ANÁLISIS Y DISCUSIÓN	40
3.1 RESULTADOS DE LA CINÉTICA DE REACCIÓN Y SELECCIÓN DEL “SOLVER” A UTILIZAR	40

3.1.1	Análisis de convergencia de los “solver” utilizados	40
3.1.2	Resultados de la cinética de reacción	42
3.2	RESULTADOS PARA EL DISEÑO DEL REACTOR TIPO “COIL” USANDO LA FUNCIÓN ODESET	50
3.3	RESULTADOS PARA EL CÁLCULO DEL ÍNDICE DE SEVERIDAD	55
4.	CONCLUSIONES	57
5.	RECOMENDACIONES	59
	BIBLIOGRAFÍA	60
	ANEXOS	63

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Etapas secuenciales realizadas durante el presente trabajo	23
Figura 2. Concentración del hexano para la ruptura térmica a 650K, usando el “solver” ode15s	40
Figura 3. Concentración del hexano para la ruptura térmica a 650K, usando el “solver” ode23s	41
Figura 4. Concentración del hexano en función del tiempo, para la ruptura térmica en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	42
Figura 5. Concentración del metano en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K.....	43
Figura 6. Concentración del etano en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	44
Figura 7. Concentración del etileno en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K.....	44
Figura 8. Concentración del propileno en función del tiempo para la ruptura térmica en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	45
Figura 9. Concentración del buteno en función del para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	45
Figura 10. Concentración del etileno para la ruptura térmica del hexano a 693 K y 13300 Pa	47
Figura 11. Concentración del metano para la ruptura térmica del hexano a 693 K y 13300 Pa	47
Figura 12. Concentración del propileno para la ruptura térmica del hexano a 693 K y 13300 Pa.....	48
Figura 13. Flujo molar del hexano para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	50
Figura 14. Flujo molar del metano para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	51

Figura 15. Flujo molar del etano para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	52
Figura 16. Flujo molar del etileno para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	52
Figura 17. Flujo molar del propileno para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	53
Figura 18. Flujo molar del buteno para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K	53
Figura 19. Dependencia de la conversión respecto a la temperatura para un reactor tipo “coil”	54

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Reacciones seleccionadas para la ruptura térmica del hexano	26
Tabla 2. Moles iniciales y finales de carbono para cada temperatura en el reactor	49
Tabla 3. Temperatura y tiempo de residencia para el reactor tipo “coil”	55
Tabla 4. Conversión e índice de severidad en la ruptura térmica del hexano en el reactor tipo “coil”	56

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
Anexo A. Parámetros cinéticos	63
Anexo B. Códigos de MATLAB empleados para la resolución del sistema ODE del modelo cinético	64
Anexo C. Entalpía estándar de formación y capacidades caloríficas.....	69
Anexo D. Códigos de MATLAB empleados para la resolución del sistema DAE en el diseño del reactor tipo “coil”	71
Anexo E. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación	80
Anexo F. Balance molar de carbono.....	92

NOTACIÓN

<i>Símbolo</i>	<i>Nombre</i>	<i>Unidad</i>
A	Factor de frecuencia	s^{-1}
A_T	Área transversal del reactor	m^2
C_{pj}	Capacidad calorífica del componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	$J/mol\ K$
C_j	Cantidad de carbonos presentes en el componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	
D_{jm}	Difusividad binaria efectiva	m^2/s
d_t	Diámetro interno del reactor	m
E	Energía de activación	J/mol
f	Factor de Fanning	
F_j	Flujo molar del componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	mol/s
F_T	Flujo molar total	mol/s
ΔH_f^o	Entalpía estándar de formación	J/mol
ΔH_{fj}	Entalpía de formación del componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	J/mol
ΔH_{rxni}	Entalpía de la reacción i , desde $i = 1, 2, \dots, 32$	J/mol
ΔH_j	Entalpía de reacción del componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	J/mol
k_i	Constante de velocidad de la reacción i , desde $i = 1, 2, \dots, 32$	s^{-1}
M	Peso molecular de la mezcla	kg/mol
p_t	Presión en el reactor	Pa
$q(z)$	Flux de calor	J/m^2s
R	Constante universal de los gases	$Pa\ m^3/mol\ K$
n_{C_0}	Moles iniciales de carbono	mol

n_{c_f}	Moles finales de carbono	<i>mol</i>
Re	Número de Reynolds	
R_i	Radical libre	
r_j	Velocidad de reacción del componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	<i>mol/m³s</i>
u	Velocidad lineal	<i>m/s</i>
U	Coefficiente global de transferencia de calor	<i>J/m²s K</i>
Y_j	Concentración del componente j , desde $j = 1, 2, \dots, 18$	<i>mol/m³</i>
SI	Índice de severidad	
t	Tiempo de residencia	<i>s</i>
T	Temperatura en el reactor	<i>K</i>
T_0	Temperatura inicial	<i>K</i>
T_R	Temperatura de fluido inmediato a la pared	<i>K</i>
T_w	Temperatura de la pared	<i>K</i>
v	Velocidad del fluido	<i>m/s</i>
V	Volumen del reactor	<i>m³</i>
x	Conversión	
z	Longitud del reactor	<i>m</i>
α_{ij}	Coefficiente estequiométrico	
μ	Viscosidad de la mezcla gaseosa	<i>kg/m s</i>
ρ_g	Densidad de la mezcla gaseosa	<i>kg/m³</i>

RESUMEN

TÍTULO: ANÁLISIS CINÉTICO DE LA RUPTURA TÉRMICA DEL HEXANO EN EL DISEÑO DE UN REACTOR TIPO COIL Y SU CORRELACIÓN CON EL ÍNDICE DE SEVERIDAD*

AUTORES: LÓPEZ GARCÍA, Diana Carolina, y, LOZANO DUARTE, Yuri Lizeth**

PALABRAS CLAVES: Hexano, ruptura térmica, modelo cinético, reactor coil, severidad.

DESCRIPCIÓN:

En este trabajo, se realizó un estudio de la ruptura térmica del hexano, un proceso importante dentro de la industria petroquímica. La determinación de la cinética de reacción, el diseño de un reactor tipo "coil" y el cálculo del índice de severidad son los tres objetivos propuestos. El desarrollo del tema inicio con la identificación de los productos principales del proceso a partir de investigaciones previas consultadas, lo que permitió proponer un mecanismo de reacción con radicales libres basado exclusivamente en la obtención de dichos productos. Seguidamente, se obtuvo el modelo cinético representado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, el cual se resolvió usando el programa MATLAB, específicamente el "solver" **ode23s**, el cual fue elegido como el más óptimo, en comparación con **ode15s**, en la resolución del problema "stiff" que surgió en este caso.

Una vez fue conocida la cinética, el diseño del reactor "coil" en condiciones no isotérmicas y no isobáricas tomo lugar mediante el planteamiento del sistema DAE, compuesto por ecuaciones algebraicas y diferenciales que representaron los balances del sistema así como las diferentes condiciones de operación, el cual se resolvió también usando el programa MATLAB, con el "solver" **ode23s** junto con la aplicación de la función **odeset**. Finalmente, se realizó el cálculo del índice de severidad, el cual es usado para relacionar la conversión, la temperatura y el tiempo de residencia dentro del reactor "coil" y es considerado como una medida cualitativa del proceso, útil a la hora de tomar decisiones concernientes a la operación del reactor.

* Proyecto de Grado.

** Facultad de ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Ramiro Martínez Rey

ABSTRACT

TITLE: KINETIC ANALYSIS OF THE THERMAL CRACKING OF HEXANE IN THE REACTOR COIL TYPE DESIGN AND HIS CORRELATION WITH THE SEVERITY INDEX*

AUTHORS: LÓPEZ GARCÍA, Diana Carolina, y, LOZANO DUARTE, Yuri Lizeth**

KEYWORDS: Hexane, thermal cracking, kinetic model, coil reactor, severity

DESCRIPTION:

In this work, a study of the thermal cracking of hexane has been performed, an important process inside the petrochemical industry. The determination of the kinetic reaction, the reactor coil type design, and the severity index calculus are the proposed objectives. The development of the problematic began with the identification of the main products from previous consulted researches, which allowed proposing a reaction mechanism with free radicals based solely on the obtention of these products. Then the kinetic model represented by an ordinary differential equations system of first order was obtained, and was solved using the MATLAB program, specifically the solver **ode23s**, which was chosen as the optimum, compared with **ode15s**, in the solution the stiff problem presented in this case.

Once the kinetic was known, the coil reactor design in non-isothermal and non-isobaric conditions took place through the **DAE** system proposed, composed by algebraic and differential equations representing the balance system and the different operation conditions, which is also solved using MATLAB program, and the solver **ode23s**, with the **odeset** function implementation. Finally, the severity index was calculated, which is used to relate the temperature and residence time inside the coil reactor and is considered as a qualitative measure of the process, so useful at the time to making decisions concerning to reactor operation.

*Bachelor thesis.

** Physicochemical engineering Faculty, Chemical Engineering School, Project Director: Ramiro Martinez.

INTRODUCCIÓN

La industria de los hidrocarburos representa un renglón destacado dentro de la sociedad actual; múltiples aplicaciones de estas sustancias confirman su importancia. Combustibles, pinturas, cosméticos, productos farmacéuticos, fertilizantes, entre muchas otras más industrias requieren de los hidrocarburos para poder sustentar su producción; por lo que los procesos como la ruptura térmica, enfocados en la obtención de estos valiosos componentes resultan atractivos y necesarios.

La ruptura térmica es una tecnología a la cual se le ha prestado atención por bastante tiempo, debido a su utilidad en la obtención de diversos productos a partir de materias primas pesadas y menos valiosas. Largas cadenas de hidrocarburos a altas temperaturas son inestables y rompen sus enlaces, transformándose en moléculas más pequeñas con bajo punto de ebullición, como la gasolina, el queroseno y otros combustibles industriales ligeros; esto ocurre gracias a una serie de reacciones químicas en cadena, en las que los radicales libres (especies químicas con electrones desapareados y tiempos de vida extremadamente cortos)⁽⁷⁾ actúan como intermediarios. El hexano, como un hidrocarburo de cadena intermedia juega un papel importante en los procesos petroquímicos. En el caso de la ruptura térmica resulta de interés debido a la cantidad de carbonos presentes en su cadena, por lo que puede ser considerado como un compuesto representativo de los hidrocarburos alifáticos, los cuales constituyen una fracción considerable de los crudos usados en este tipo de procesos;⁽¹⁰⁾ razón por la cual existe un conocimiento razonable del esquema de reacción y un conjunto de datos termodinámicos y cinéticos suficientemente detallados.⁽³⁾ Los productos obtenidos en la ruptura térmica del hexano, son en su mayoría hidrocarburos insaturados, como el propileno y el etileno, de gran importancia a nivel industrial debido a que son usados como materia prima en las plantas de polimerización en donde se

produce la gasolina de alto octanaje, entre otros procesos destacados dentro de la refinería.⁽¹⁶⁾

Ahora bien, proponer un modelo cinético que describa cualquier proceso de ruptura térmica es un desafío dentro de esta área, puesto que la presencia de los radicales libres hace que la cantidad de etapas de reacción sea extensa en la mayoría de los casos aún teniendo en cuenta ciertas simplificaciones; es así como el mecanismo de reacción requiere de especial cuidado, puesto que no todas las reacciones termodinámicamente posibles son cinéticamente factibles dentro del proceso.⁽²⁾ Para la ruptura térmica del hexano, dos de los trabajos destacados son el realizado por K. H. Eber, H. J. Ederer y G. Isbarn⁽⁴⁾ en 1983 con 240 reacciones y el desarrollado por F. Billaud, K. Elyahyaoui y F. Baronnet⁽³⁾ en 1990 con un sistema de 28 reacciones. Una complicación adicional en el modelo cinético surge durante el planteamiento y el desarrollo del sistema de ecuaciones diferenciales que representan las velocidades de reacción, puesto que además de ser extenso presenta el llamado problema “stiff”, en el que la resolución numérica por algunos métodos exige una disminución significativa del paso de integración para evitar inestabilidades.⁽¹⁸⁾ Esto ocurre cuando las concentraciones de los radicales libres son mucho más pequeñas que las de las especies moleculares.⁽¹⁷⁾

Una mirada hacia cómo se ha tratado el proceso de la ruptura térmica inicia en 1934, donde K. F. Herzfeld y F. O. Rice⁽⁸⁾ diseñan un mecanismo que puede ser usado para explicar la cinética de las reacciones con radicales libres, el cual fue adoptado para los procesos de ruptura térmica. Posteriormente, K. M. Sundaram y G. F. Froment⁽¹⁷⁾ en 1978, desarrollan modelos cinéticos para la descomposición térmica de hidrocarburos gaseosos junto con una aplicación especial para la ruptura del etano. De ahí en adelante, diferentes investigadores, han hecho estudios cinéticos, tanto teóricos como experimentales para varios hidrocarburos;

en los últimos treinta años, las investigaciones sobre el mecanismo de reacción y la cinética de la ruptura térmica han sido cada vez más profundas.

En este trabajo se estudia la ruptura térmica del hexano, descrita por 32 reacciones en las que intervienen 18 componentes, de los cuales uno de ellos es el reactivo, 5 corresponden a los productos principales, y los 12 restantes son los radicales libres presentes en este proceso. Los productos principales fueron seleccionados a partir de la información recopilada en investigaciones disponibles en la literatura, con el fin de establecer un mecanismo de reacción basado exclusivamente en la producción de las especies principales, el cual consta de 18 ecuaciones diferenciales correspondientes a las velocidades de reacción de cada especie y es solucionado usando el “solver” **ode23s** de MATLAB; se desarrolla también un modelo matemático a partir del cual se diseña un reactor tipo “coil” teniendo en cuenta las condiciones típicas de operación de éste en la industria para un proceso no isobárico y no isotérmico generando un sistema de ecuaciones Diferenciales-Algebraicas (conocido por su sigla en inglés, DAE, “Differential-Algebraic Equation System”) de 20 ecuaciones diferenciales y 35 ecuaciones algebraicas; por último se determina el índice de severidad del proceso el cual es un factor cualitativo importante usado en la industria para medir la eficacia de la ruptura térmica basado en dos variables importantes que son la temperatura y el tiempo de residencia en el reactor; todo esto se lleva a cabo dentro de un rango de temperatura de 650 a 850 K (condición típica para este tipo de procesos)⁽¹⁹⁾.

Uno de los aportes más significativos del trabajo realizado es que durante el desarrollo del modelo cinético fue posible llevar a cabo un análisis de convergencia entre los métodos numéricos disponibles para dar solución al problema “stiff”, los cuales específicamente fueron los métodos correspondientes a los “solver” **ode15s** y **ode23s** y de esta manera garantizar que la solución fuera la más óptima usando el “solver” **ode23s** de MATLAB para un sistema de 18

ecuaciones diferenciales; además de la actualización con respecto a investigaciones previas consultadas de los datos cinéticos de 12 de las 32 reacciones consideradas; así mismo, en el diseño del reactor “coil” se destaca la aplicación de la función **odeset** de MATLAB la cual modifica la configuración de los “solver” utilizados para la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales y permite resolver el sistema **DAE** que resulta en este caso, con 20 ecuaciones diferenciales y 35 ecuaciones algebraicas, que representan los diferentes balances y condiciones de operación del proceso. Todo esto, junto con el cálculo del índice de severidad le otorga a este trabajo un enfoque industrial atractivo, al usar las herramientas computacionales para predecir el comportamiento del proceso a diferentes condiciones de operación.

1. CONCEPTOS TEÓRICOS

1.1 MECANISMO DE RICE-HERZFELD

Esquema que explica el comportamiento de las reacciones con radicales libres, consta de tres pasos esenciales: iniciación, propagación y terminación. De acuerdo con sus autores,⁽⁸⁾ la forma más rápida en que reacciona un radical libre con una molécula que contenga hidrógeno es por medio de la abstracción del átomo de hidrógeno, seguido de la descomposición del nuevo radical en una molécula olefínica y otro radical libre, hasta concluir el proceso con la formación de productos finales mediante la combinación de parejas de radicales libres.

1.2 REACTOR TIPO “COIL”

Se caracteriza porque maneja temperaturas altas y tiempos de residencia cortos para obtener mayor cantidad de productos deseados; está compuesto a grandes rasgos por un horno en el cual se encuentra una tubería en forma de bobina donde se dan las reacciones de la ruptura térmica con una longitud de máximo 100[m]⁽¹⁹⁾. Dicha bobina se simula de acuerdo al modelado de un reactor de flujo pistón (PFR), el cual puede considerarse como una representación simplificada e idealizada del movimiento de un fluido en el que todos sus elementos se mueven con una velocidad uniforme a lo largo de líneas de corriente paralelas; por lo que se considera un mecanismo de transporte con flujo perfectamente ordenado, donde no hay mezcla en dirección axial y todos los elementos de fluido tienen el mismo tiempo de residencia dentro del reactor.⁽⁶⁾

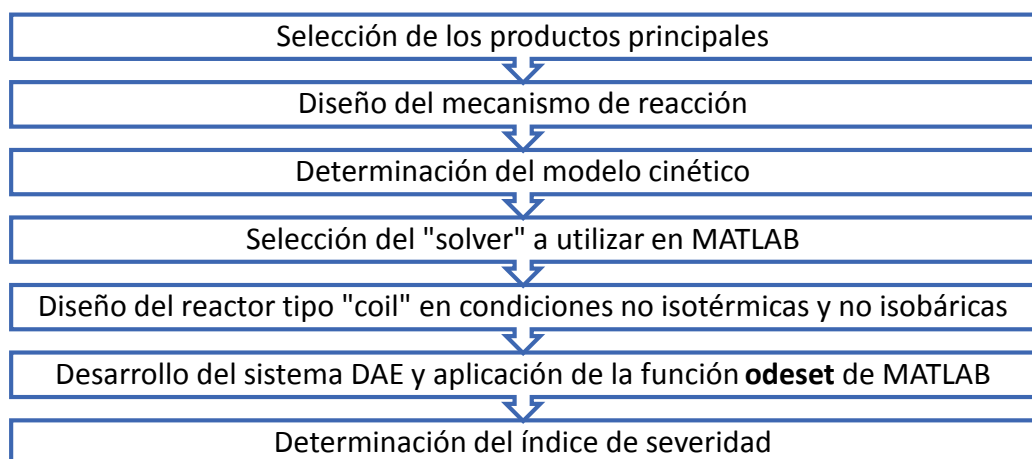
1.3 ÍNDICE DE SEVERIDAD

Hace referencia a un factor que relaciona la temperatura y el tiempo de residencia en el reactor y determina la conversión y las características del producto obtenido; una temperatura alta involucra un tiempo de residencia más corto para poder alcanzar una conversión dada, y viceversa.⁽¹³⁾ Desde un punto de vista operativo, la temperatura y el tiempo de residencia están relacionados también con la composición del alimento, la presión del reactor, el caudal de alimentación de hidrocarburos, entre otros, de tal manera que la severidad caracteriza las principales variables de operación y las vincula a la distribución de los productos; convirtiéndose en el aspecto más importante en el control avanzado del proceso de ruptura térmica. Así pues, a nivel industrial, mantener el índice de severidad en un valor controlado permite obtener múltiples beneficios como proteger el horno contra el exceso de ruptura térmica, extendiendo el tiempo de vida de las bobinas y el horno como tal y mejorar la eficiencia de la producción de la planta.⁽¹¹⁾

2. DESCRIPCIÓN METODOLÓGICA

El desarrollo de este trabajo se basó en siete etapas secuenciales, tal como se muestra en la Figura 1. En primer lugar, se tomó una decisión acerca de los productos principales considerados en este estudio y posteriormente se diseñó el mecanismo de reacción y se determinó el modelo cinético del proceso de ruptura térmica del hexano. Dada la magnitud del sistema de ecuaciones diferenciales resultante, se debió utilizar una herramienta computacional para poder solucionarlo; así que se consideró el programa MATLAB y los “solver” **ode15s** y **ode23s** como dos posibles opciones. A través de un análisis de convergencia se seleccionó cuál de estos dos “solver” fue el mejor para este caso y se resolvió el modelo cinético. Seguidamente, se realizó el diseño de un reactor tipo “coil” en condiciones no isotérmicas y no isobáricas, obteniéndose un sistema de ecuaciones Diferenciales-Algebraicas (DAE), que también requirió el uso de MATLAB pero esta vez con la aplicación de su función **odeset**. Finalmente, en la última etapa se determinó el índice de severidad a partir de los resultados obtenidos en el reactor “coil”

Figura 1. Etapas secuenciales realizadas durante el presente trabajo



2.1 SELECCIÓN DE LOS PRODUCTOS PRINCIPALES

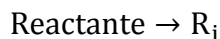
Una de las investigaciones destacadas respecto a la ruptura térmica del hexano y que ha servido como base para los estudios desarrollados por otros autores, es la realizada por K. H. Ebert, H. J. Ederer y G. Isbarn⁽⁴⁾, donde los resultados experimentales señalan la obtención de cinco productos principales en este proceso, a saber: metano, etano, etileno, propileno y buteno. Referencias previas a esta investigación, además de ser bastante antiguas, presentan resultados contradictorios, donde no existe un acuerdo en relación a los compuestos obtenidos en mayor proporción. Así pues, para este trabajo se consideró también que estos cinco productos son los que principalmente se dan en la ruptura térmica del hexano; y por lo tanto, el mecanismo de reacción diseñado se enfocó en la producción de los mismos.

2.2 DISEÑO DEL MECANISMO DE REACCIÓN

Tal como se mencionó en la introducción, el mecanismo de Rice-Herzfeld es utilizado para describir las reacciones que involucran radicales libres y está basado en tres pasos principales:

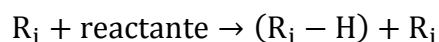
Iniciación:

- Rompimiento de los enlaces

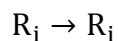


Propagación:

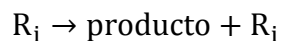
- Abstracción del hidrógeno



- Isomerización de radicales libres:

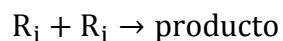


- Descomposición de radicales libres:

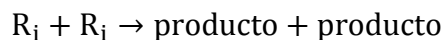


Terminación:

- Recombinación de radicales libres:



- Desproporcionamiento de los radicales libres:



Donde R_i representa cualquier radical libre involucrado en las reacciones. Los radicales libres reaccionan con casi cualquier molécula que se encuentran; como resultado de ello, su presencia puede dar lugar a una magnitud considerable de etapas de reacción; sin embargo, el comportamiento global de las reacciones está dominado sólo por algunos de los radicales libres.⁽⁷⁾ En la Tabla 1 se presenta el listado de las 32 reacciones resultantes.

Tabla 1. Reacciones seleccionadas para la ruptura térmica del hexano

<p><u>Iniciación:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>Rompimiento de los enlaces</i> $\text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_1} \text{CH}_3^* + 1 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \quad (1)$ $\text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_2} \text{C}_2\text{H}_5^* + 1 - \text{C}_4\text{H}_9^* \quad (2)$ $\text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_3} 1 - \text{C}_3\text{H}_7^* + 1 - \text{C}_3\text{H}_7^* \quad (3)$	<ul style="list-style-type: none"> <i>Descomposición de radicales libres</i> $\text{C}_2\text{H}_5^* \xrightarrow{k_{17}} \text{H}^* + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (17)$ $1 - \text{C}_3\text{H}_7^* \xrightarrow{k_{18}} \text{H}^* + \text{C}_3\text{H}_6 \quad (18)$ $1 - \text{C}_3\text{H}_7^* \xrightarrow{k_{19}} \text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (19)$
<p><u>Propagación:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>Abstracción de Hidrógeno</i> $\text{CH}_3^* + \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_4} \text{CH}_4 + 1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (4)$ $\text{CH}_3^* + \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_5} \text{CH}_4 + 2 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (5)$ $\text{CH}_3^* + \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_6} \text{CH}_4 + 3 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (6)$ $\text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_7} \text{C}_2\text{H}_6 + 1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (7)$ $\text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_8} \text{C}_2\text{H}_6 + 2 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (8)$ $\text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_9} \text{C}_2\text{H}_6 + 3 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (9)$ $\text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_6 \xrightarrow{k_{10}} \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5^* \quad (10)$	$1 - \text{C}_4\text{H}_9^* \xrightarrow{k_{20}} \text{H}^* + 1 - \text{C}_4\text{H}_8 \quad (20)$ $1 - \text{C}_4\text{H}_9^* \xrightarrow{k_{21}} \text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (21)$ $1 - \text{C}_4\text{H}_9^* \xrightarrow{k_{22}} \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_3^* \quad (22)$ $1 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \xrightarrow{k_{23}} 1 - \text{C}_3\text{H}_7^* + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (23)$ $2 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \xrightarrow{k_{24}} \text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_3\text{H}_6 \quad (24)$ $3 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \xrightarrow{k_{25}} \text{CH}_3^* + 1 - \text{C}_4\text{H}_8 \quad (25)$ $1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{26}} 1 - \text{C}_4\text{H}_9^* + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (26)$ $2 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{27}} 1 - \text{C}_3\text{H}_7^* + \text{C}_3\text{H}_6 \quad (27)$ $3 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{28}} \text{C}_2\text{H}_5^* + 1 - \text{C}_4\text{H}_8 \quad (28)$
<ul style="list-style-type: none"> <i>Isomerización de radicales libres</i> $1 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \xrightarrow{k_{11}} 2 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \quad (11)$ $2 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \xrightarrow{k_{12}} 1 - \text{C}_5\text{H}_{11}^* \quad (12)$ $1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{13}} 2 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (13)$ $2 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{14}} 1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (14)$ $1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{15}} 3 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (15)$ $3 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \xrightarrow{k_{16}} 1 - \text{C}_6\text{H}_{13}^* \quad (16)$	<p><u>Terminación:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>Recombinación de radicales libres</i> $\text{H}^* + \text{H}^* \xrightarrow{k_{29}} \text{H}_2 \quad (29)$ $\text{CH}_3^* + \text{CH}_3^* \xrightarrow{k_{30}} \text{C}_2\text{H}_6 \quad (30)$ <ul style="list-style-type: none"> <i>Desproporcionamiento de los radicales libres</i> $\text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_5^* \xrightarrow{k_{31}} \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (31)$ $\text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_2\text{H}_5^* \xrightarrow{k_{32}} \text{C}_2\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4 \quad (32)$

Durante la iniciación, ocurren tres reacciones unimoleculares, donde los enlaces C-C del hexano se rompen para dar lugar a diferentes radicales libres: CH_3^* y $1 - \text{C}_5\text{H}_{11}^*$ si la ruptura es en el primer carbono, C_2H_5^* y $1 - \text{C}_4\text{H}_9^*$ si es en el segundo carbono y dos radicales $1 - \text{C}_3\text{H}_7^*$ si es en el tercer carbono. Posteriormente, ocurre la abstracción de hidrógeno por parte de los radicales libres al hexano, produciendo formas isométricas del radical hexilo, además de CH_4 y C_2H_6 como los primeros productos formados; una vez obtenido el C_2H_6 , este compuesto cede un átomo de hidrógeno al radical CH_3^* para producir el CH_4 . La abstracción de hidrógeno realizada por radicales diferentes a CH_3^* y C_2H_5^* se desprecia, dado que no contribuye a la formación de los cinco productos más importantes que se han escogido previamente. Las reacciones de isomerización de radicales se han añadido, puesto que se ha demostrado en investigaciones consultadas que tienen una influencia importante sobre la distribución de los productos y la velocidad de reacción global.⁽⁴⁾ Seguidamente, en la descomposición de la radicales, se producen los alquenos C_2H_4 , C_3H_6 y $1 - \text{C}_4\text{H}_8$ junto con otros radicales libres que participan posteriormente en la etapa de terminación por medio de la recombinación y el desproporcionamiento para dar lugar a los alcanos CH_4 y C_2H_6 , además del alqueno C_2H_4 y pequeñas cantidades de H_2 .

2.3 DETERMINACIÓN DEL MODELO CINÉTICO

Una vez se plantearon las reacciones, se formularon las expresiones para la velocidad de producción y/o consumo de cada una de las especies moleculares y radicales libres que intervenían en las reacciones; obteniéndose un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, el cual fue escrito usando la terminología propuesta por Wei y Prater,⁽⁶⁾ tal como se muestra a continuación en las ecuaciones 33 a 50.

$$\frac{dY_1}{dt} = -(k_1 + k_2 + k_3)Y_1 - (k_4 + k_5 + k_6)Y_1Y_2 - (k_7 + k_8 + k_9)Y_1Y_6 \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \frac{dY_2}{dt} = & k_1Y_1 - (k_4 + k_5 + k_6)Y_1Y_2 - k_{10}Y_2Y_{14} + k_{19}Y_8 + k_{22}Y_7 + k_{25}Y_5 \\ & - k_{30}Y_2^2 - k_{31}Y_2Y_6 \end{aligned} \quad (34)$$

$$\frac{dY_3}{dt} = k_1Y_1 - (k_{11} + k_{23})Y_3 + k_{12}Y_4 \quad (35)$$

$$\frac{dY_4}{dt} = k_{11}Y_3 - (k_{12} + k_{24})Y_4 \quad (36)$$

$$\frac{dY_5}{dt} = -k_{24}Y_5 \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \frac{dY_6}{dt} = & k_2Y_1 - (k_7 + k_8 + k_9)Y_1Y_6 + k_{10}Y_2Y_{14} - k_{17}Y_6 + k_{21}Y_7 + k_{24}Y_4 \\ & + k_{28}Y_{11} - k_{31}Y_2Y_6 - k_{32}Y_6^2 \end{aligned} \quad (38)$$

$$\frac{dY_7}{dt} = k_2Y_1 - (k_{20} + k_{21} + k_{22})Y_7 + k_{26}Y_9 \quad (39)$$

$$\frac{dY_8}{dt} = \frac{1}{2}k_3Y_1 - (k_{18} + k_{19})Y_8 + k_{23}Y_3 + k_{27}Y_{10} \quad (40)$$

$$\frac{dY_9}{dt} = k_4Y_1Y_2 + k_7Y_1Y_6 - (k_{13} + k_{15} + k_{26})Y_9 + k_{14}Y_{10} + k_{16}Y_{11} \quad (41)$$

$$\frac{dY_{10}}{dt} = k_5Y_1Y_2 + k_8Y_1Y_6 + k_{13}Y_9 - (k_{14} + k_{27})Y_{10} \quad (42)$$

$$\frac{dY_{11}}{dt} = k_6Y_1Y_2 + k_9Y_1Y_6 + k_{15}Y_9 - (k_{16} + k_{28})Y_{11} \quad (43)$$

$$\frac{dY_{12}}{dt} = k_{17}Y_6 + k_{18}Y_8 + k_{20}Y_7 - k_{29}Y_{12}^2 \quad (44)$$

$$\frac{dY_{13}}{dt} = (k_4 + k_5 + k_6)Y_1Y_2 + k_{10}Y_2Y_{14} + k_{31}Y_2Y_6 \quad (45)$$

$$\frac{dY_{14}}{dt} = (k_7 + k_8 + k_9)Y_1Y_6 - k_{10}Y_2Y_{14} + k_{30}Y_2^2 + k_{32}Y_6^2 \quad (46)$$

$$\frac{dY_{15}}{dt} = k_{17}Y_6 + k_{19}Y_8 + k_{21}Y_7 + k_{23}Y_3 + k_{26}Y_9 + k_{31}Y_2Y_6 + k_{32}Y_6^2 \quad (47)$$

$$\frac{dY_{16}}{dt} = k_{18}Y_8 + k_{22}Y_7 + k_{24}Y_4 + k_{27}Y_{10} \quad (48)$$

$$\frac{dY_{17}}{dt} = k_{20}Y_7 + k_{25}Y_5 + k_{28}Y_{11} \quad (49)$$

$$\frac{dY_{18}}{dt} = k_{29}Y_{12}^2 \quad (50)$$

Donde:

Y_1	Concentración de hexano (C_6H_{14})	Y_{10}	Concentración de 2-hexil ($2 - C_6H_{13}^*$)
Y_2	Concentración de metil (CH_3^*)	Y_{11}	Concentración de 3-hexil ($3 - C_6H_{13}^*$)
Y_3	Concentración de 1-pentil ($1 - C_5H_{11}^*$)	Y_{12}	Concentración del radical hidrógeno (H^*)
Y_4	Concentración de 2-pentil ($2 - C_5H_{11}^*$)	Y_{13}	Concentración de metano (CH_4)
Y_5	Concentración de 3-pentil ($3 - C_5H_{11}^*$)	Y_{14}	Concentración de etano (C_2H_6)
Y_6	Concentración de etil ($C_2H_5^*$)	Y_{15}	Concentración de propano (C_3H_8)
Y_7	Concentración de 1-butil ($1 - C_4H_9^*$)	Y_{16}	Concentración de propileno (C_3H_6)
Y_8	Concentración de 1-propil ($1 - C_3H_7^*$)	Y_{17}	Concentración de buteno (C_4H_8)
Y_9	Concentración de 1-hexil ($1 - C_6H_{13}^*$)	Y_{18}	Concentración de hidrógeno (H_2)

2.4 SELECCIÓN DEL “SOLVER” A UTILIZAR EN MATLAB

Como se mencionó previamente en la introducción una característica sobresaliente de este sistema de ecuaciones diferenciales es que presenta un problema “stiff”, en donde la variable o variables que se desean conocer cambian lentamente, mientras que las demás variables del sistema presentan un cambio

rápido. En muchos casos, las variables de cambio rápido son transitorias, desaparecen rápidamente, después de lo cual los componentes de variación lenta dominan el proceso, lo que genera eigenvalores negativos en la matriz de solución jacobiana, puesto que las ecuaciones difieren en varios órdenes de magnitud; por lo que es necesario que el método numérico que intenta resolver eficientemente el problema “stiff” tenga pasos más pequeños y realice más cálculos por cada uno de ellos; generalmente los métodos de solución para problemas “stiff” son implícitos y en cada paso se usan operaciones en la matriz jacobiana que resuelven un sistema de ecuaciones diferenciales simultáneas, el cual ayuda a predecir la evolución de la solución llegando así a resultados satisfactorios.⁽¹²⁾ En este caso, las variables que se desearon conocer son las concentraciones de los productos y las variables que cambiaron rápidamente son las concentraciones de los radicales libres.

Los “solver” **ode15s** y **ode23s** de MATLAB, son funciones diseñadas para resolver este tipo de sistemas, cada uno con diferentes particularidades:

- **Ode15s** usa fórmulas de diferenciación numérica, también conocidas como método multipaso “Gear” y es del tipo predictor-corrector,⁽¹⁸⁾ el cual combina un método explícito con uno implícito, donde el explícito predice una aproximación de la solución y el método implícito la corrige.
- **Ode23s** usa el método numérico Rosenbrock de orden 2, capaz de aumentar significativamente las etapas de iteración con un paso muy pequeño en cada una para lograr una mayor consistencia en los resultados usando métodos lineales implícitos,⁽⁵⁾ lo que conlleva a matrices jacobianas con eigenvalores positivos que generan estabilidad en el sistema de ecuaciones reduciendo así los problemas “stiff”.⁽²⁰⁾

Estas funciones (**ode15s** y **ode23s**) se usaron en el trabajo con el fin de dar solución al problema planteado y para su correcto funcionamiento se crearon dos códigos en el editor de MATLAB, el primer código con las siguientes especificaciones:

- i) Una matriz con las concentraciones iniciales de las especies deseadas (Y_j) en la que se definió la concentración inicial de hexano $Y_1(0) = 56,061 \text{ mol/m}^3$ a partir del modelo de gas ideal ya que se trabajan altas temperaturas y presiones bajas:

$$Y_1(0) = \frac{P_0}{RT_0} \quad (51)$$

Con una presión inicial $P_0 = 302961,750 \text{ Pa}$ y una temperatura inicial $T_0 = 650 \text{ K}$ (estos valores corresponden a condiciones iniciales típicas en este tipo de procesos de ruptura térmica)⁽⁴⁾ y las concentraciones iniciales de las otras especies como cero.

- ii) Un vector con dos componentes en los cuales se especificó el intervalo en el que se evaluó la variable; en este caso fue el tiempo de residencia que va de 0 a 1,5 [s] y se especificó como **tspan**.
- iii) El “solver” utilizado (**ode15s** u **ode23s**) en el que se llamó al segundo código, el cual corresponde al sistema de ecuaciones que se planteó en las ecuaciones 33 a 50 donde las constantes de velocidad se determinaron a partir de la expresión formulada por Arrhenius:⁽⁶⁾

$$k = Ae^{-\frac{E}{RT}} \quad (52)$$

Los valores de A y E, fueron tomados de investigaciones previas hechas por los autores K. H. Ebert, H. J. Ederer y G. Isbarn,⁽⁴⁾ en un intervalo de temperatura de 650 a 850 K, pero en este trabajo se realizó una actualización en los datos de las reacciones 1, 2, 3, 13, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24 y 30, los cuales fueron consultados en el banco de datos del NIST (National Institute of Standards and Technology).⁽¹⁾ La recopilación de los valores de los factores de frecuencia y las energías de activación usados aquí, se encuentran en el Anexo 1. Además, los códigos de MATLAB realizados en esta sección para la cinética del proceso se pueden observar en el Anexo 2.

2.5 DISEÑO DEL REACTOR “COIL” EN CONDICIONES NO ISOTÉRMICAS Y NO ISOBÁRICAS

Para la simulación del reactor “coil” en condiciones no isotérmicas y no isobáricas también fue necesario desarrollar dos códigos en el editor de MATLAB; en el primer código se planteó el sistema de ecuaciones que definieron el proceso con una presión inicial de 302.961,750 [Pa] en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 [K], para ello, se requirió definir lo siguiente:

El balance molar pudo deducirse a partir de la forma general de la ecuación de continuidad:⁽⁶⁾

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} + \nabla \cdot C_j u - \rho_f D_{jm} \nabla^2 \left(\frac{C_j}{\rho_f} \right) = R_j \quad (53)$$

Dado que en el reactor “coil” sólo se consideró el movimiento en la dirección axial y que $D_{jm} \rightarrow 0$ (puesto que el transporte de materia por difusión es despreciable en este caso) y asumiendo además la condición de estado estable, se tiene que:

$$\frac{dC_j u}{dz} = R_j \quad (54)$$

Donde:

$$C_j u = \frac{F_j}{A_T} \quad (55)$$

Entonces, reemplazando se obtiene finalmente el balance molar por componente para el reactor "coil":

$$\frac{dF_j}{dz} = r_j \frac{\pi d_t^2}{4} \quad (56)$$

r_j fue dada por las ecuaciones 33 a 50, con las concentraciones Y_j definidas en términos de los flujos molares F_j , así:

$$Y_j = Y_1(0) \frac{F_j}{F_T} \quad (57)$$

Con F_T definido a partir del balance molar global:

$$F_T = \sum_{j=1}^{18} F_j \quad (58)$$

Seguidamente, el balance de energía, tiene la forma general: ⁽⁶⁾

$$\sum_j Y_j C_{pj} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \sum_j (-\Delta H_j) r_j + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_j J_j \nabla H_j + Q_{rad} \quad (59)$$

Se consideró que la transferencia de calor por difusión es muy pequeña, por lo que el término de difusividad tiende a cero; se despreció la transferencia de calor por radiación, se asumió la condición de estado estable y se tuvo en cuenta sólo la dirección axial, que es donde predomina la transferencia de energía; por tanto, el balance se redujo a:

$$\sum_j Y_j u C_{pj} \frac{dT}{dz} = \sum_j (-\Delta H_j) r_j + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (60)$$

Donde:

$$Y_j \cdot u = N_j \quad (61)$$

El término $\nabla \cdot (\lambda \nabla T)$ representó el transporte de calor por conducción y se aproximó como una condición de frontera para geometrías cilíndricas de la siguiente forma:

$$\lambda \nabla T = \frac{4}{d_t} U(T_w - T_R) \quad (62)$$

Donde:

$$U(T_w - T_R) = q(z) \quad (63)$$

Reemplazando las ecuaciones 55, 61, 62 y 63 en la ecuación 60, se obtuvo el balance de energía para el reactor "coil":

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{\sum_j F_j C_{pj}} \left[q(z) \pi d_t + \frac{\pi d_t^2}{4} \sum_j (-\Delta H_j) r_j \right] \quad (64)$$

$-\Delta H_j$ Está dado por la suma del calor de cada reacción ΔH_{rxn_i} donde intervino el componente j:

$$-\Delta H_j = - \sum \Delta H_{rxn_i} \quad (65)$$

Donde:

$$-\Delta H_{rxn_i} = - \sum_j \alpha_{ij} \Delta H_{fj} \quad (66)$$

Con la ayuda de la Ley de Hess se halló la entalpía de formación del componente j a la temperatura deseada, así:

$$\Delta H_{fj} = \Delta H_f^o + \int_{T_{ref}}^T C_{pj} dT \quad (67)$$

ΔH_f^o y C_{pj} para las especies moleculares son determinados a partir de los datos recopilados por J. M. Smith, H. C. Van Ness y M. M. Abbott,⁽¹⁵⁾ mientras que para el caso de los radicales libres se usó el método de contribución de grupos propuesto por Thin et al.⁽¹⁴⁾ El listado de estos valores se encuentra en el Anexo 3. Por otro lado, la caída de presión en este tipo de reactores es en la mayoría de los casos muy alta, por lo que se estableció una expresión que predijera el valor para el caso de interés de este trabajo. De forma general, y asumiendo que los efectos en el cambio de elevación son insignificantes, la ecuación de Fanning pudo ser usada dentro de la ecuación de Bernoulli, así: ⁽⁶⁾

$$-\frac{dp_t}{dz} = 2f\alpha \frac{\rho_g u^2}{d_t} + \alpha \rho_g u \frac{du}{dz} \quad (68)$$

Donde:

$$u = \frac{\rho_g v R T}{M p_t} \quad (69)$$

$$\frac{du}{dz} = \frac{\rho_g v R}{p_t} \left[T \frac{\sum_j \frac{dF_j}{dz}}{\rho_g v A_T} + \frac{1}{M} \frac{dT}{dz} \right] - \frac{\rho_g v R T}{M p_t^2} \frac{dp_t}{dz} \quad (70)$$

Reemplazando y ordenando se obtuvo finalmente la ecuación para la caída de presión en el reactor “coil”:

$$\frac{dp_t}{dz} = \frac{\sum_j \frac{dF_j}{dz} + \frac{1}{M} \left[\frac{1}{T} \frac{dT}{dz} + \frac{2f}{d_t} \right]}{\frac{1}{M p_t} - \frac{p_t}{\alpha (\rho_g v)^2 R T}} \quad (71)$$

El valor del factor de conversión, α , depende de las unidades de p_t y u ; para este caso, donde se usó el sistema internacional, se tuvo que $\alpha = 1$ y $d_t = 0,108 [m]$, el cual está en el rango de valor para este equipo.⁽¹⁹⁾ En cuanto a f , pudo ser determinado a partir de la siguiente ecuación para flujo turbulento, la cual es una modificación de la correlación de Blasius:

$$f = 0,046 Re^{-0,2} \quad (72)$$

Donde:

$$Re = \frac{d_t \rho_g v}{\mu} \quad (73)$$

Así pues, se obtuvieron 20 ecuaciones diferenciales, representadas por los 18 balances molares (descritos por la ecuación 56), el balance de energía (dado por la ecuación 64) y la expresión para la caída de presión (mostrada en la ecuación 71); las cuales requirieron de una serie de ecuaciones algebraicas para complementar su definición, como por ejemplo, las ecuaciones 33 a 50, la ecuación 58, 65 y 72 , entre otras, que previamente se han expuesto, para un total de 35 ecuaciones algebraicas. De esta manera, se estableció un sistema de ecuaciones Diferenciales-Algebraicas (Differential Algebraic Equation System, DAE) que representó el modelado para el reactor tipo “coil” para el proceso de ruptura térmica del hexano.

2.6 DESARROLLO DEL SISTEMA DAE Y APLICACIÓN DE LA FUNCIÓN ODESET DE MATLAB

Los sistemas DAE son llamados también sistemas descriptores, singulares, generalizados o implícitos; pueden resolverse a través de los mismos métodos numéricos empleados para la solución de sistemas diferenciales ordinarios, sin embargo, en algunos casos, pueden tener ciertas propiedades que hacen que estos métodos numéricos fracasen. Para el desarrollo del segundo código se siguieron los siguientes pasos:

- i) Fue necesario usar la función **odeset** que modifica los “solver” **ode** para resolver ecuaciones diferenciales y ecuaciones algebraicas simultáneamente.⁽⁹⁾ Esta función toma pares de argumentos que especifican muchas opciones diferentes de los “solver” para ecuaciones diferenciales ordinarias de MATLAB,⁽¹²⁾ los cuales se usan dependiendo del sistema de ecuaciones que se tenga; específicamente para este sistema se usaron los siguientes pares de argumentos: **‘MStateDependence’** el cual

se usa cuando la matriz solución depende de los cambios en las variables que se desean conocer y **'strong'** puesto que la matriz solución dependió de las dos variables que se desean conocer; **'MassSingular'** sirve para especificar que la matriz solución es singular, es decir que su determinante es cero; en el presente trabajo la matriz solución no es singular por lo tanto su valor debió ser **'no'**; por último se usa el argumento **'Refine'** que incrementa el número de los puntos en la gráfica solución haciendo que el "solver" tenga mayor número de iteraciones generando una curva más suave y **'1'** puesto que necesita enteros positivos y es el número recomendado por MATLAB para el "solver" **ode23s**.

- ii) También se hizo necesario especificar las condiciones iniciales del sistema en una matriz con los flujos iniciales en la cual el flujo inicial de hexano fue $F_1(0) = 20 \text{ moles/s}$ y los flujos de las demás especies iguales a cero.
- iii) Se escribió un vector en el que se especificó el intervalo de la longitud del reactor, el cual iba de 0 a 95 [m] y se nombró como **zspan**.
- iv) Por último, se debió llamar al primer código en el que se definió el sistema de ecuaciones a resolver por **ode23s**. Dichos códigos pueden consultarse en el Anexo 4.

La conversión fue determinada, a partir de la siguiente expresión usando el perfil de flujo obtenido mediante la simulación:

$$x = \frac{F_1(0) - F_1}{F_1(0)} \quad (74)$$

2.7 DETERMINACIÓN DEL ÍNDICE DE SEVERIDAD

La severidad está definida por la relación existente entre la temperatura de operación y el tiempo de residencia, dando un carácter cualitativo al grado de conversión del proceso. La severidad equivalente o índice de severidad es la correlación que permite calcular este parámetro y está dada por la siguiente expresión: ⁽¹³⁾

$$SI = \sum t \left[e^{\left(\frac{-E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right)} \right] \quad (75)$$

Donde el tiempo de residencia se calculó con los perfiles de temperatura y presión en el reactor para una longitud final de $L = 95 [m]$ por medio de la siguiente expresión: ⁽¹⁹⁾

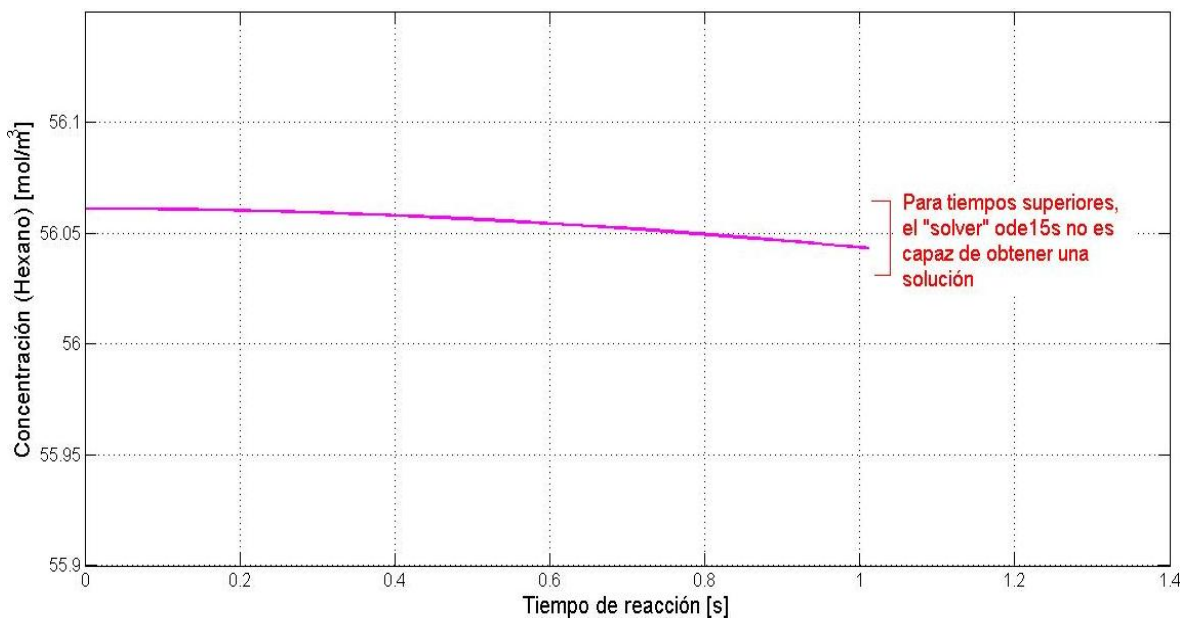
$$t = A_T \int_0^L \frac{p_t}{F_T RT} dz \quad (76)$$

3. RESULTADOS: PRESENTACIÓN, ANÁLISIS Y DISCUSIÓN

3.1 RESULTADOS DE LA CINÉTICA DE REACCIÓN Y SELECCIÓN DEL “SOLVER” A UTILIZAR

3.1.1 Análisis de convergencia de los “solver” utilizados. Dado que la ruptura térmica es un proceso endotérmico, a bajas temperaturas la transformación del hexano en productos deseados es muy baja, por lo que era de esperarse que la variación de la concentración del hexano con respecto al tiempo de residencia establecido previamente en el proceso en la página 18 fuese mínima; en las Figuras 2 y 3 se obtuvo esta variación usando el “solver” **ode15s** y **ode23s** respectivamente.

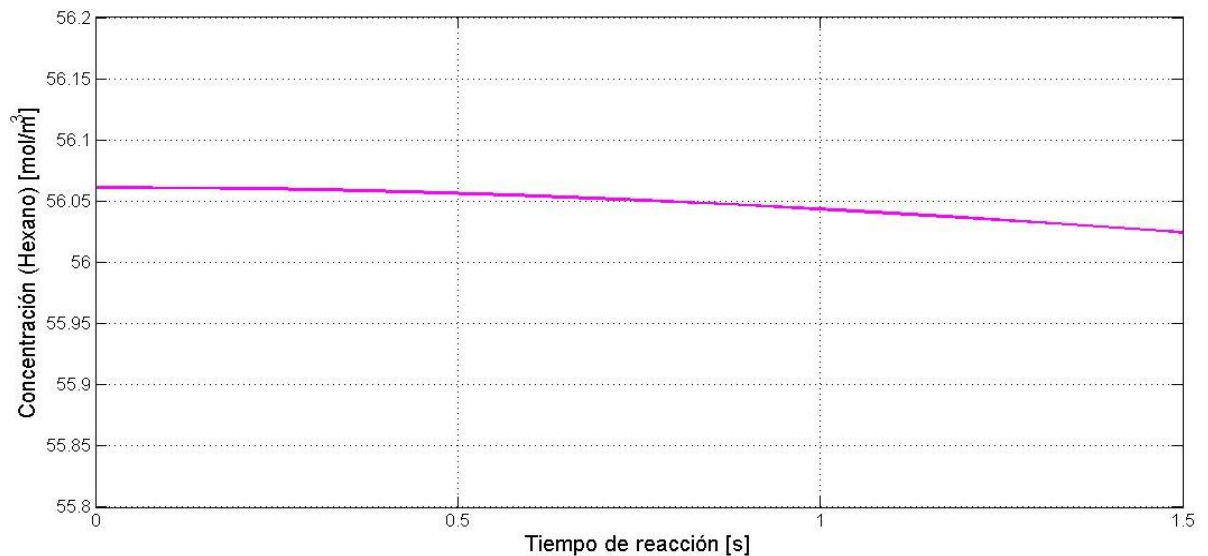
Figura 2. Concentración del hexano para la ruptura térmica a 650K, usando el “solver” ode15s



En la figura 2 se pudo notar que la curva obtenida no abarca todo el intervalo de tiempo estipulado, es decir, el “solver” **ode15s** no pudo

obtener valores de concentración para tiempos superiores a 1[s]. Esto se debió a las fallas que presenta este “solver” en la resolución del sistema “stiff” de ecuaciones diferenciales puesto que no pudo tomar un paso de iteración menor a la variación de la concentración de algunas de las especies deseadas presentes en el proceso estudiado. Esto se hizo evidente en la alerta que mostró el programa MATLAB cuando se corrió la simulación con este “solver”.

Figura 3. Concentración del hexano para la ruptura térmica a 650K, usando el “solver” ode23s

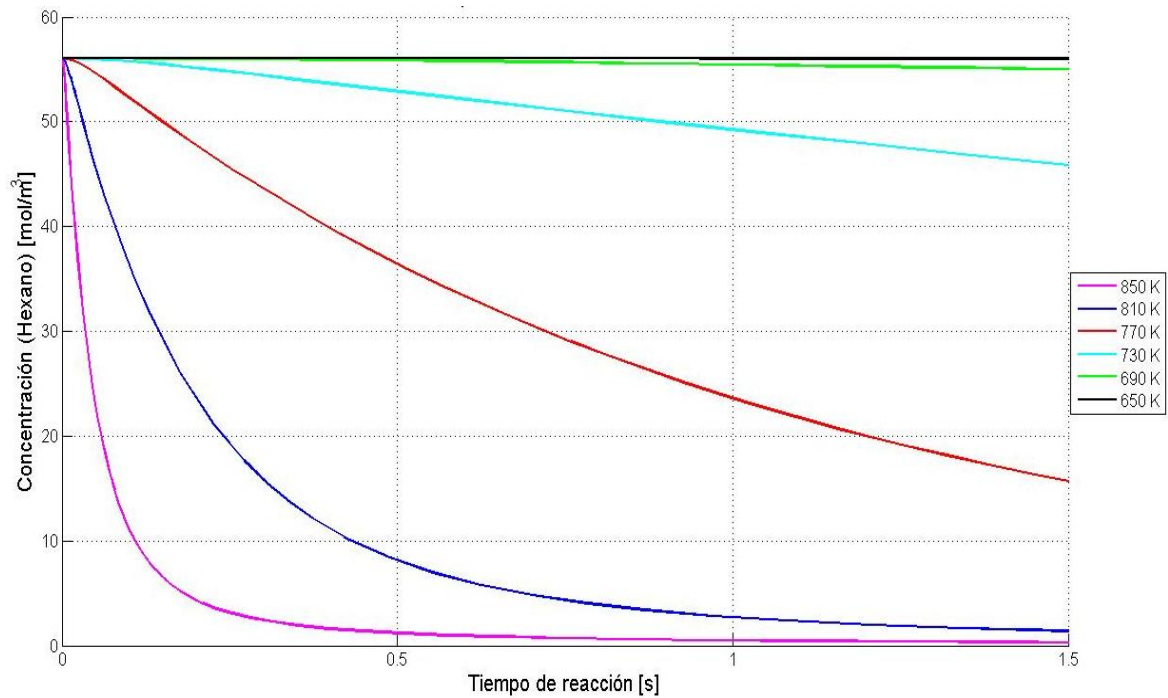


Por otro lado, en la Figura 3 se pudo ver que la curva de concentración versus tiempo se obtuvo para tiempos mayores a 1 [s], cuando se utilizó el “solver” **ode23s**, e incluso, para tiempos mayores a 1,5 [s], que fue el tiempo máximo utilizado en este trabajo. Esto se debió gracias a que el método Rosenbrock de orden 2 utilizado por el “solver” **ode23s** fue capaz de disminuir el paso de iteración, lo que conllevó a eigenvalores positivos en la matriz solución ⁽²⁰⁾ generando estabilidad en el sistema.

Debido a los anteriores resultados, en este trabajo se escogió al **ode23s** como el mejor “solver” para la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales del proceso de ruptura térmica del hexano.

3.1.2 Resultados de la cinética de reacción. En las Figuras 4 a 9 se obtuvieron las curvas para la concentración del hexano y los cinco productos principales de la ruptura térmica: metano, etano, etileno, propileno y buteno, respectivamente, en función del tiempo para diferentes valores de temperatura en el intervalo de 650 a 850 [K], usando el “solver” **ode23s**.

Figura 4. Concentración del hexano en función del tiempo, para la ruptura térmica en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K



En la Figura 4, se verificó la influencia de la temperatura sobre la concentración del hexano a través del tiempo, dado que a mayores

temperaturas, el consumo de este reactivo y su transformación en las especies deseadas como productos fue mayor. Se observó un comportamiento exponencial en las curvas correspondientes a las temperaturas de 850 y 810 [K], mostrando un decremento hasta llegar a tiempos entre 1 y 1,5 [s] en los cuales los valores de concentración se estabilizaron acercándose a cero, ya que la transformación del hexano a productos fue casi completa; mientras que para las temperaturas menores como 650 y 690 [K], la concentración permaneció casi invariable dado por líneas rectas en la figura, en las cuales se reflejó que para estos valores de temperatura fue necesario un intervalo mayor de tiempo para que se diera la transformación del reactivo deseada y así se pudo apreciar la caída exponencial del modelo cinético.

Figura 5. Concentración del metano en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

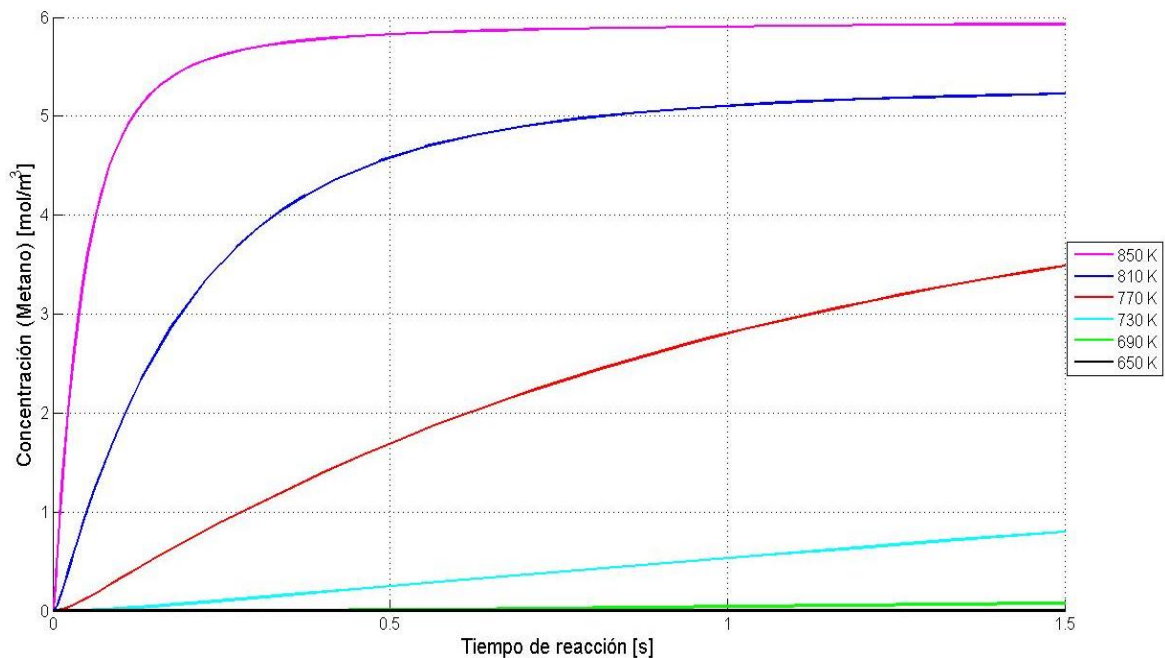


Figura 6. Concentración del etano en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

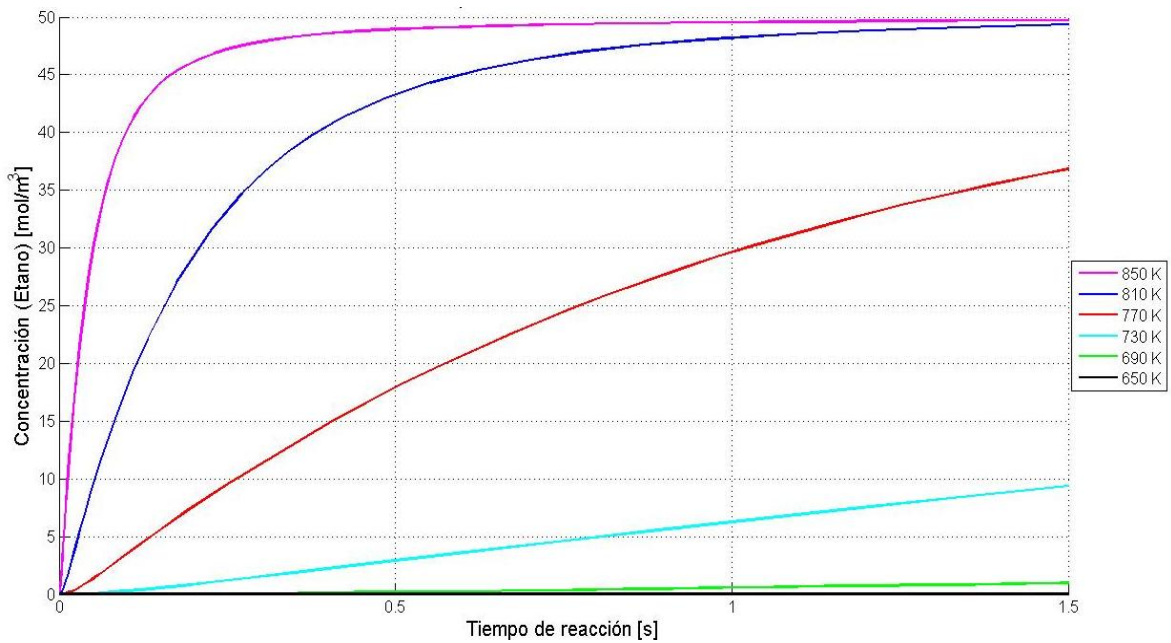


Figura 7. Concentración del etileno en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

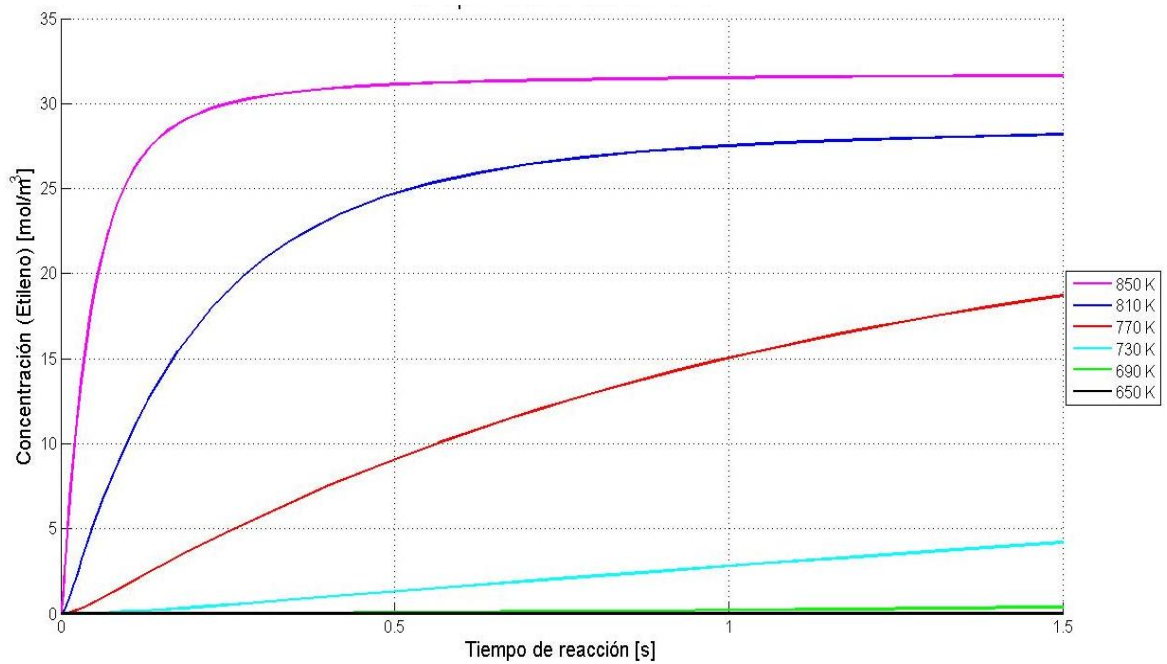


Figura 8. Concentración del propileno en función del tiempo para la ruptura térmica en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

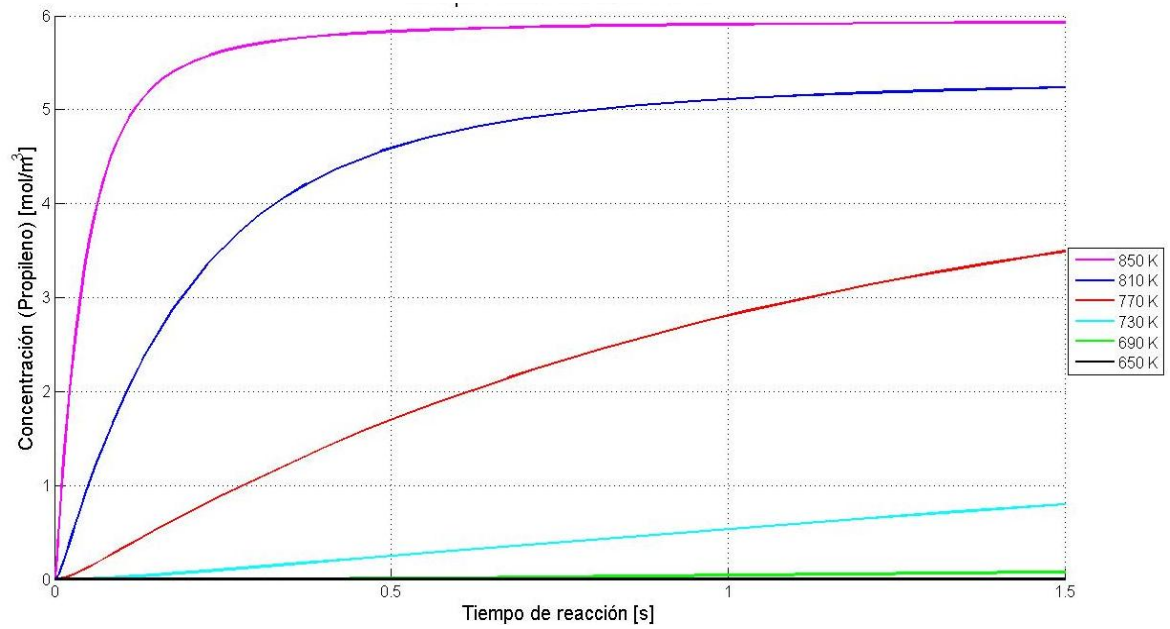
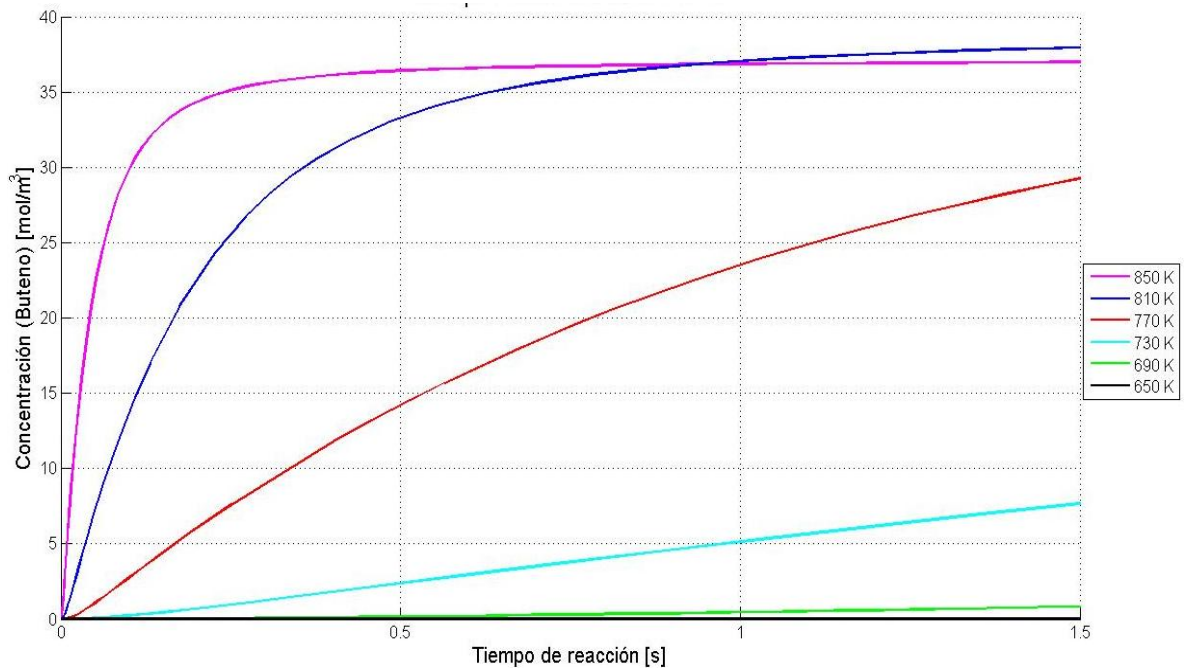


Figura 9. Concentración del buteno en función del tiempo para la ruptura térmica del hexano en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K



En las Figuras 5 a 9 se pudo apreciar que el producto con mayor concentración fue el etano, seguido del buteno y el etileno; mientras que los productos con menor concentración fueron el metano y el propileno. A diferencia de lo que ocurrió en la Figura 4, en estas curvas, se vio un claro aumento exponencial en la concentración de los productos conforme se incrementó el tiempo para cada temperatura dada; además, se verificó que la concentración también aumentaba cuando se incrementaba la temperatura. Para la temperatura de 850 [K] se observó un incremento muy pronunciado entre 0 y 0,5 [s]; después de 0,5 [s] la concentración tendió a estabilizarse en un valor constante puesto que requirió de un menor tiempo para la transformación del hexano en productos con respecto a las demás temperaturas trabajadas. Para el caso del etano, el producto mayoritario, la concentración en el intervalo de 0,5 a 1,5 [s] permaneció en valores cercanos a 50 [mol/m³]. Sin embargo, para las temperaturas de 650 y 690 [K] no fue posible apreciar este comportamiento, lo que indicó que se requiere de mayor tiempo de reacción para poder lograr la transformación de materia prima en productos deseados; con esto, se apreció un efecto inversamente proporcional entre estas dos variables con respecto a la concentración.

F. Billaud, K. Elyahyaoui y F. Baronnet,⁽³⁾ han reportado en su investigación, resultados experimentales para un modelo cinético de la ruptura térmica del hexano en condiciones de temperatura inicial a 693 [K] y presión inicial a 13.300 [Pa], dichos resultados al ser comparados con los perfiles de concentración obtenidos en el presente trabajo, presentaron ciertas similitudes. En las Figuras 10 a 12 a continuación, se muestran las curvas de la concentración en función del tiempo para la cinética de la ruptura térmica del hexano con los datos

experimentales consultados y los resultados obtenidos con la simulación realizada en este trabajo con el “solver” **ode23s**, para el etileno, metano y propileno, respectivamente.

Figura 10. Concentración del etileno para la ruptura térmica del hexano a 693 K y 13300 Pa

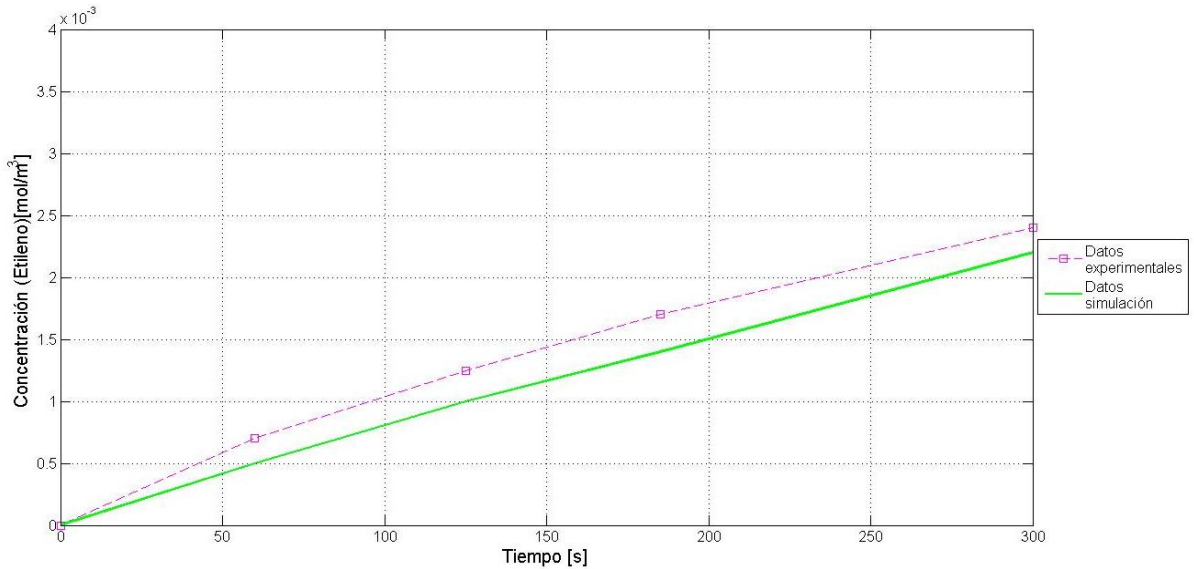


Figura 11. Concentración del metano para la ruptura térmica del hexano a 693 K y 13300 Pa

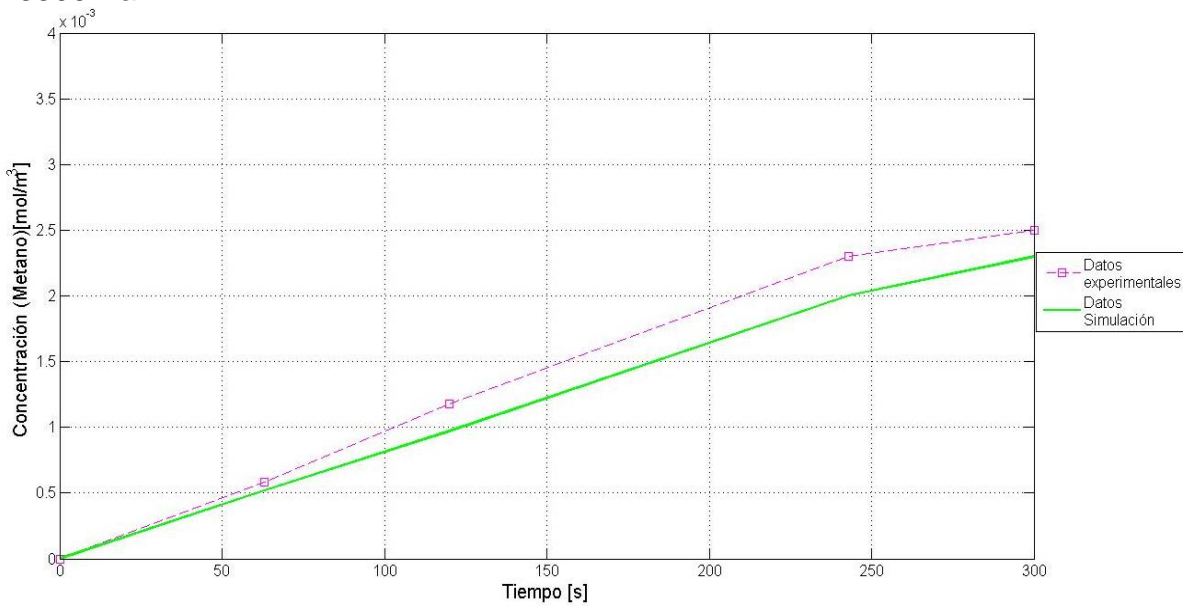
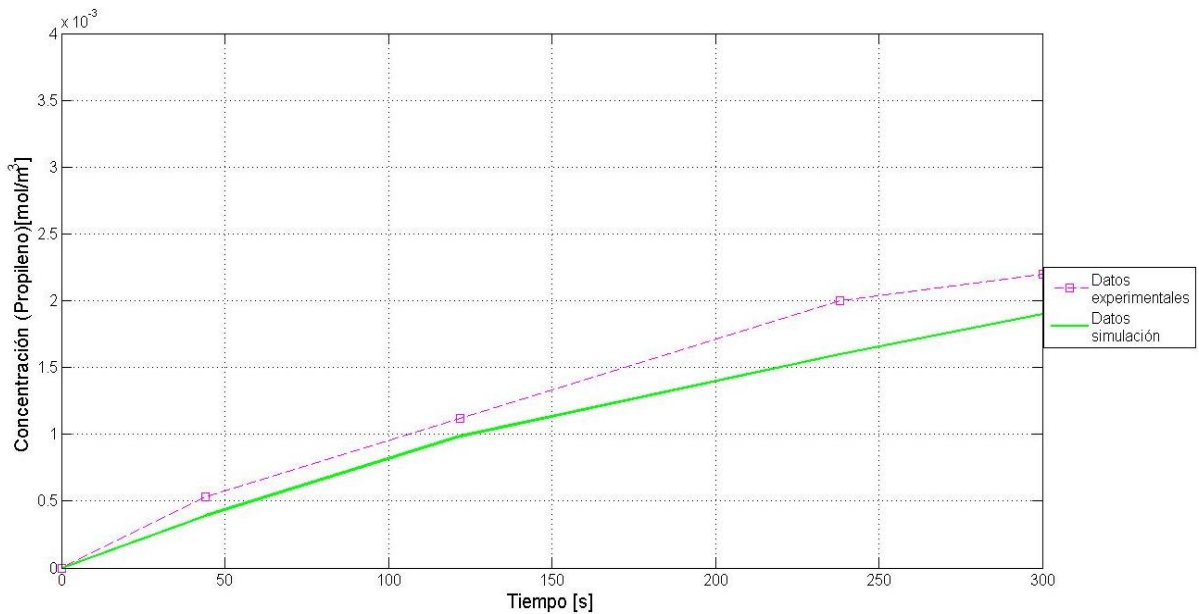


Figura 12. Concentración del propileno para la ruptura térmica del hexano a 693 K y 13300 Pa



Donde un error promedio del 34,8% fue obtenido para el caso del etileno, mientras que para el metano y el propileno se alcanzó un error promedio del 16,6% y 17,9%, respectivamente. Por lo tanto, pudo verse una concordancia aceptable entre los resultados obtenidos en la simulación realizada con valores experimentales dados por otros estudios; los resultados mostraron que el “solver” escogido es eficiente para resolver el sistema en un intervalo de tiempo más amplio. Las curvas de las Figuras 9 a 11 fueron obtenidas a 693 [K] y 13.300 Pa, puesto que la información experimental estaba disponible sólo a estas condiciones.

Con respecto a los otros productos principales (etano y buteno), la comparación con los resultados experimentales no fue satisfactoria (errores mayores al 50%), debido fundamentalmente a que los objetivos

perseguidos por cada investigación fueron diferentes. En el caso del trabajo de F. Billaud, K. Elyahyaoui y F. Baronnet,⁽³⁾ se quería ver la influencia de las reacciones de autoinhibición en el proceso, mientras que en el presente trabajo, se planteó un mecanismo de reacción para el diseño posterior de un reactor tipo “coil” en el que se favoreció exclusivamente la obtención de los productos mayoritarios.

Por otro lado, en la Tabla 2 se muestra un balance de carbono realizado a partir de los valores de concentración obtenidos de la simulación, el cual cerró con una ligera diferencia entre las moles de carbono a la entrada y las moles de carbono a la salida; lo que indicó una vez más, que el planteamiento de las ecuaciones propuestas en este trabajo fue correcto y que los resultados arrojados por el “solver” **ode23s** fueron satisfactorios. Los cálculos específicos realizados para este balance pueden ser consultados en el Anexo 6.

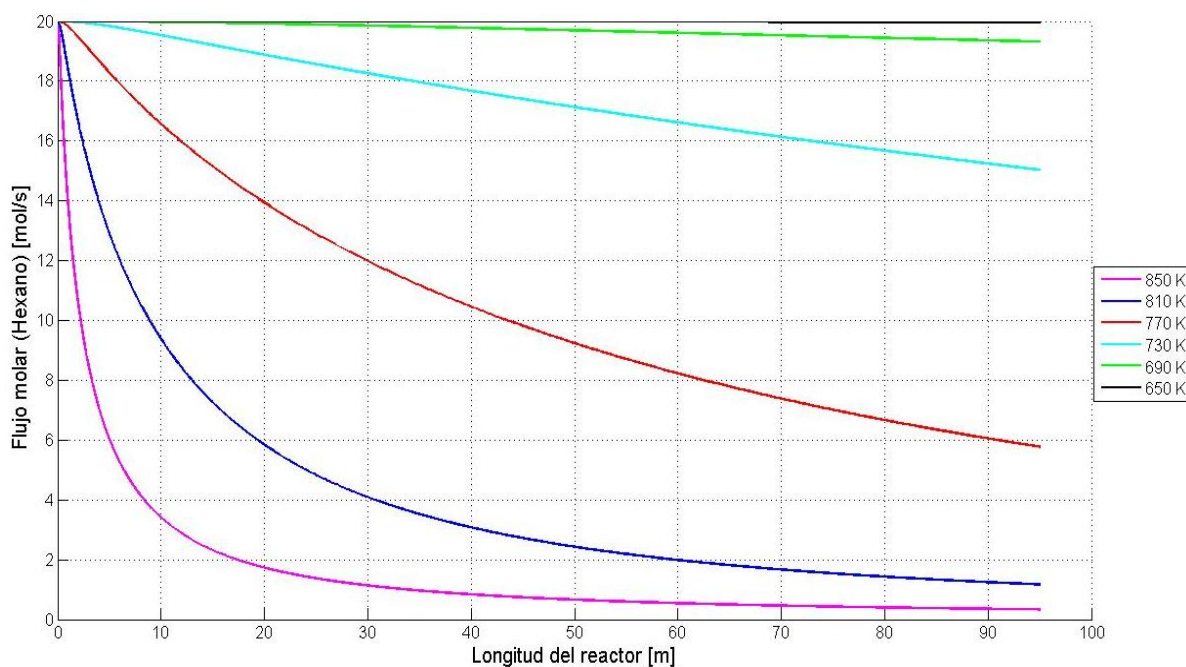
Tabla 2. Moles iniciales y finales de carbono para cada temperatura en el reactor

T [K]	Moles iniciales de carbono	Moles finales de carbono
650	292,736	292,734
690	292,736	292,732
730	292,736	292,726
770	292,736	292,699
810	292,736	292,661
850	292,736	292,599

3.2 RESULTADOS PARA EL DISEÑO DEL REACTOR TIPO “COIL” USANDO LA FUNCIÓN ODESET

En las Figuras 13 a 18 se obtuvieron las curvas para los flujos molares de hexano y los cinco productos principales de la ruptura térmica: metano, etano, etileno, propileno y buteno, respectivamente, a través de la longitud del reactor para diferentes valores de temperatura en el rango de 650 a 850 K, en las cuales se apreció que los mayores productos obtenidos son el etano, etileno y buteno concordando con los resultados de la cinética de reacción presentados en la sección 3.1.2.

Figura 13. Flujo molar del hexano para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K



En la figura anterior se pudo apreciar cómo el consumo del hexano se vio afectado por la temperatura, ya que a temperaturas de 650 y 690 [K], las menores dentro del rango considerado, el flujo molar del hexano fue mínimo, con lo que se pudo

decir que a éstas temperaturas el flujo molar siguió siendo el inicial, pero a medida que aumentó la temperatura el flujo molar iba disminuyendo hasta que llegó a la línea de 850 [K] en la que el consumo del hexano fue casi completo puesto que su valor final se acercó a cero, lo que reiteró la dependencia del proceso de la ruptura térmica hacia la temperatura ya que para obtener un mayor consumo de materia prima fue necesario someter el proceso a temperaturas altas.

Figura 14. Flujo molar del metano para la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

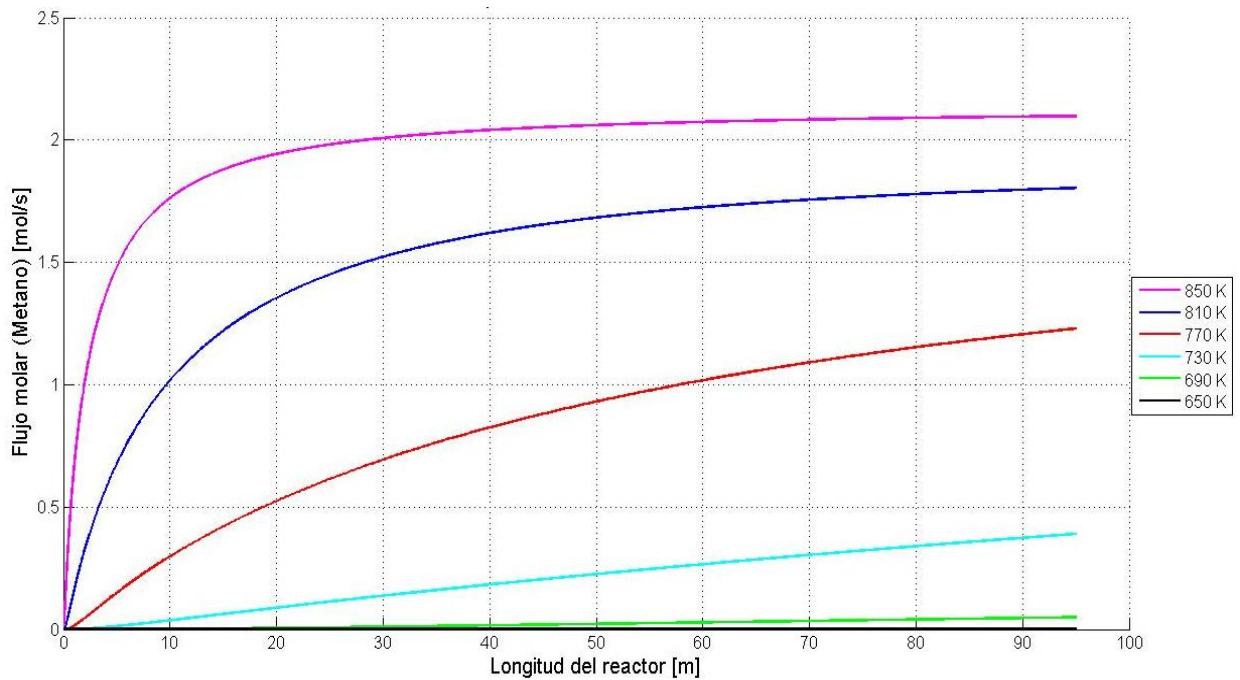


Figura 15. Flujo molar del etano para la ruptura térmica en un reactor tipo "coil" en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

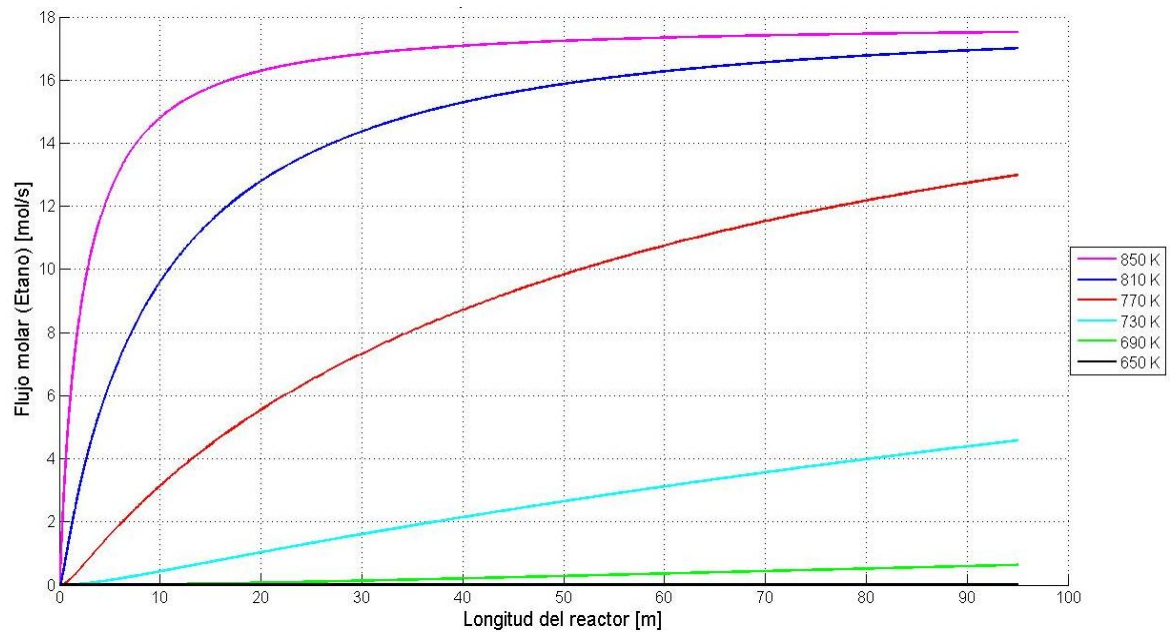


Figura 16. Flujo molar del etileno para la ruptura térmica en un reactor tipo "coil" en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

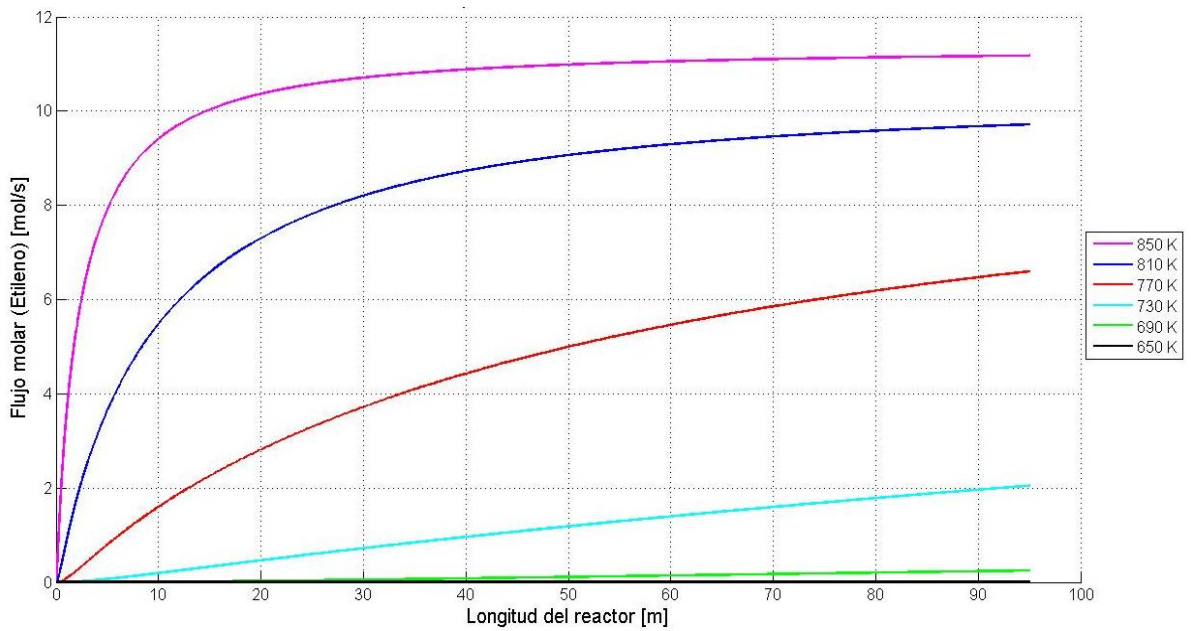


Figura 17. Flujo molar del propileno para la ruptura térmica en un reactor tipo "coil" en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K

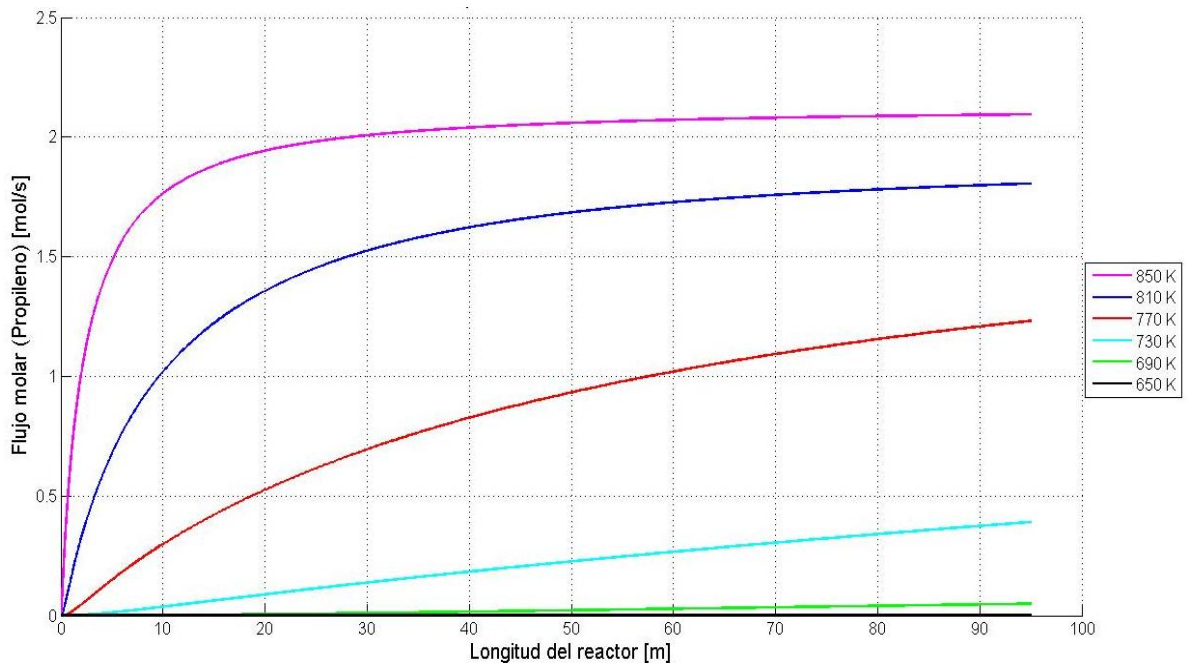
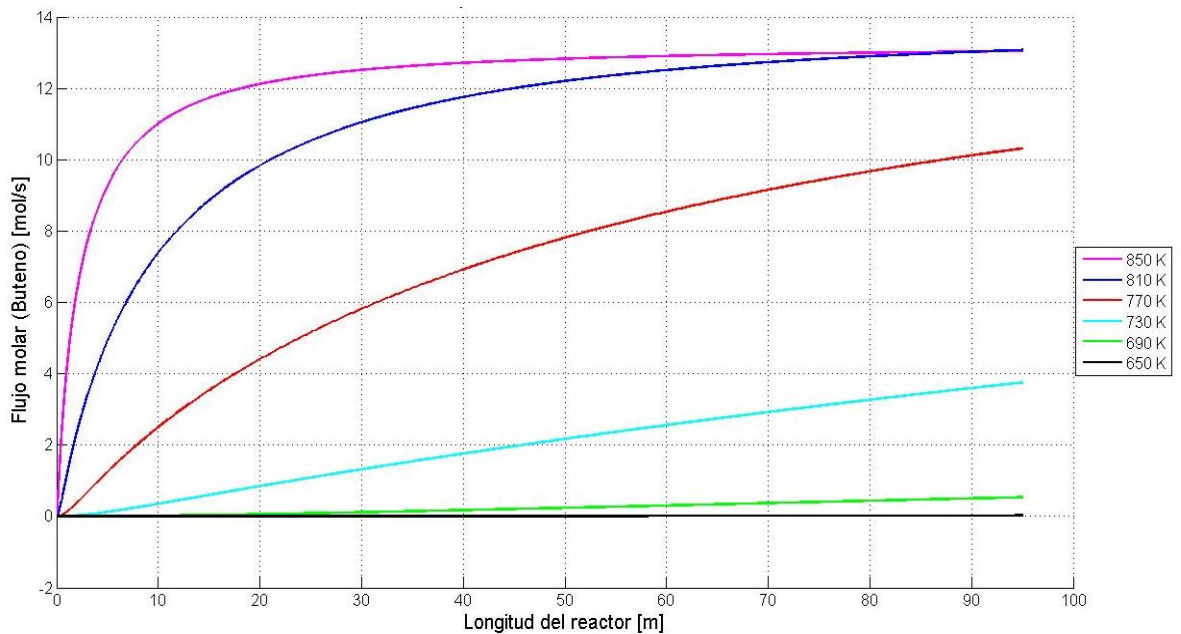


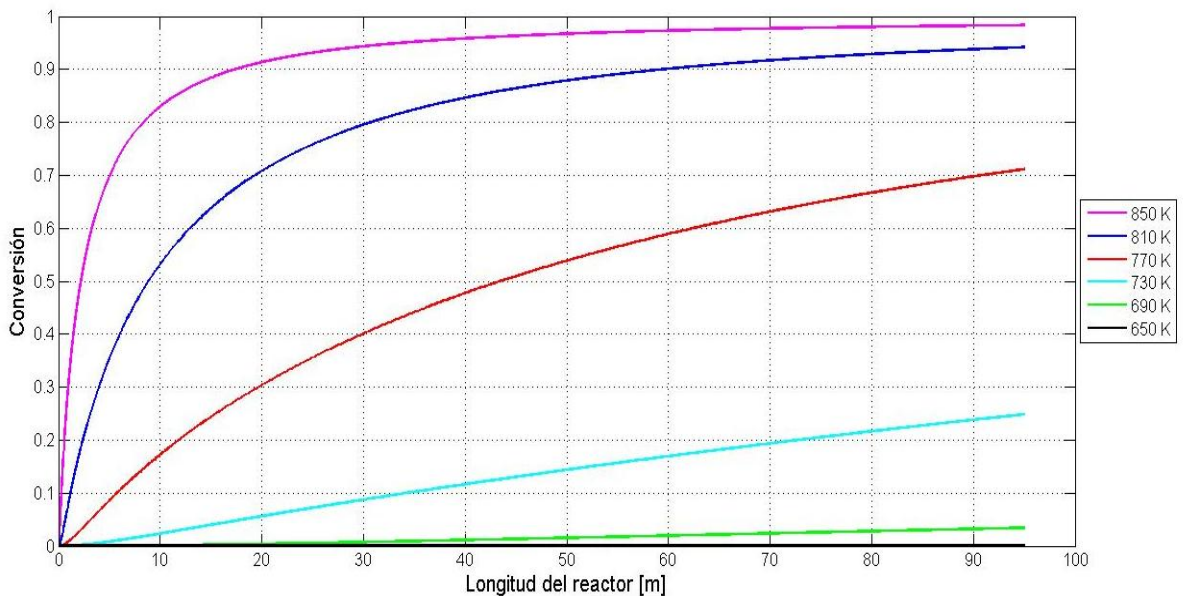
Figura 18. Flujo molar del buteno para la ruptura térmica en un reactor tipo "coil" en un intervalo de temperaturas de 650 a 850 K



De las figuras 14 a 18 se pudo observar cómo se favoreció la transformación del hexano en los productos deseados con el aumento de la temperatura, ya que el flujo molar de los productos a bajas temperaturas fue casi nulo, pero con el aumento de la temperatura el flujo de los productos aumentó considerablemente, demostrando que el comportamiento de los compuestos en el diseño de reactor tipo “coil” concuerda con el comportamiento de la cinética planteada y las características típicas del proceso, en el que a mayores temperaturas se obtuvo una mayor transformación de la materia prima en productos.

Una evidencia más de esto, se obtuvo en la Figura 19, donde la conversión fue favorecida por el aumento en la temperatura, llegando a tomar un valor de 0,98 para la temperatura de 850 K, la más alta dentro del intervalo considerado.

Figura 19. Dependencia de la conversión respecto a la temperatura para un reactor tipo “coil”



3.3 RESULTADOS PARA EL CÁLCULO DEL ÍNDICE DE SEVERIDAD

Como se dijo en la introducción y en la metodología, el índice de severidad depende del tiempo de residencia y la temperatura principalmente, por lo que el tiempo de residencia se calculó con la ayuda de la ecuación 76, para la cual se utilizaron los perfiles de temperatura, presión y flujo total del reactor que se obtuvieron en la simulación para cada punto del reactor a través de su longitud y algunos de estos valores se encuentran en el Anexo 5. En la Tabla 2 se pudo observar la relación existente entre la temperatura y el tiempo de residencia en la ruptura térmica tipo “coil”, ya que a menor temperatura, el proceso requirió un mayor tiempo de residencia y sin embargo no se obtuvieron las cantidades de productos deseados, por el contrario a mayor temperatura hubo menor tiempo de residencia y la transformación de materia prima en productos fue la deseada.

Tabla 3. Temperatura y tiempo de residencia para el reactor tipo “coil”

Temperatura [K]	650	690	730	770	810	850
Tiempo de residencia (s)	53,491	32,609	19,072	14,572	5,368	1,481

Con el tiempo de residencia y el perfil de temperatura en el reactor obtenidos con la simulación, se procedió a calcular el índice de severidad con la ayuda de la ecuación 75. Los valores cualitativos de este índice comenzaron a ser significativos a temperaturas mayores de 770 [K], ya que a esta temperatura existieron valores de conversión considerables y se pudo apreciar la relación existente entre estos dos parámetros. Como se observó en la Tabla 3 mayores temperaturas llevaron a mayores conversiones y por tanto a un valor mayor del índice de severidad, lo que demostró una vez más que la simulación del diseño de reactor tipo “coil” concordó de forma aceptable con las características típicas de

la ruptura térmica en donde altas conversiones están relacionadas a altas temperaturas y por tanto a un valor alto en el índice de severidad.

Tabla 4. Conversión e índice de severidad en la ruptura térmica del hexano en el reactor tipo "coil"

Temperatura (<i>K</i>)	Conversión (<i>x</i>)	Índice de severidad (<i>SI</i>)
770	0,711	7,5
810	0,942	16204,0
850	0,983	56463,0

4. CONCLUSIONES

- El modelo cinético de la ruptura térmica del hexano presentado en este trabajo, el cual se basó exclusivamente en la obtención de metano, etano, etileno, propileno y buteno como productos, mostró una clara dependencia entre la temperatura y el tiempo de residencia; ya que en los resultados se pudo ver que para alcanzar conversiones mayores al 90%, el proceso debió ser sometido a temperaturas altas (810 y 850 K) y cortos tiempos de residencia y al trabajar con temperaturas bajas (650 y 690 K) se requirió de un mayor tiempo de residencia, ajustándose así a las características típicas en las que se da este tipo de proceso; esto junto con los resultados aceptables para el porcentaje de error con respecto a los valores experimentales obtenidos en la bibliografía demostraron que el modelo predijo un comportamiento apto de la ruptura térmica.
- El “solver” **ode23s** fue una herramienta computacional eficaz tanto para la simulación de la cinética de reacción, como para la simulación del reactor tipo “coil” (trabajando en conjunto con la función **odeset**, en éste caso), dado que permitió modelar el proceso de ruptura térmica con diferentes valores de operación, sin que existieran fallas dentro de la ejecución del programa; a diferencia del “solver” **ode15s**, el cual fracasó cuando se consideraron ciertos valores de operación, haciéndolo menos confiable a la hora de resolver este problema en particular.
- El sistema de ecuaciones diferencial algebraico (DAE) que representó el comportamiento de la ruptura térmica en un reactor tipo “coil” diseñado en este trabajo, predijo el proceso dentro de los parámetros de longitud, diámetro interno de reactor, presión, intervalo de temperatura y tiempo de

residencia usados en las refinerías; por lo que la simulación del proceso y los resultados obtenidos representaron un avance importante en la predicción de la ruptura térmica, en la que se es difícil determinar el comportamiento de las especies dentro del reactor.

- Los resultados del índice de severidad hallados en este trabajo para temperaturas de 770, 810 y 850 K, ratificaron la relación que brinda este índice entre las variables temperatura, tiempo de residencia y conversión, puesto que se apreció que a mayor temperatura, mayor conversión y por tanto un mayor valor en el índice de severidad, el cual alcanzó un valor de 56.463 a la temperatura máxima considerada de 850 K con una conversión casi completa del hexano y a un tiempo de residencia de 1,48 [s], lo que demostró que la ecuación matemática para el índice de severidad presentada en este trabajo concordó con lo que se espera en la teoría ampliamente conocida en el sector petroquímico para este parámetro y representó la eficacia del sistema de ecuaciones Diferencial-Algebraico (DAE) utilizado para la simulación del reactor tipo “coil”, ya que sus resultados se encontraron en los intervalos a los cuales se trabaja la ruptura térmica en la industria.

5. RECOMENDACIONES

- Hacer una revisión del mecanismo de reacción desarrollado en este trabajo con el objetivo de ajustarlo, incluyendo reacciones que favorezcan la producción de los componentes que presentan concentraciones bajas (como el metano, por ejemplo), y de esta manera acercar mucho más los resultados de la simulación con los datos experimentales disponibles en la literatura.
- Dado que el hexano es un compuesto representativo de los hidrocarburos alifáticos, la metodología presentada en este trabajo para el modelamiento de su ruptura térmica puede ser usada para realizar la simulación de este proceso para el caso de moléculas más pesadas.
- Se recomienda hacer comparaciones con otras ecuaciones y modelos usados para calcular el índice de severidad, especialmente con los que se estudian y utilizan en los procesos desarrollados por ECOPETROL.

BIBLIOGRAFÍA

1. Base de datos de referencia estándar del NIST. Número 69, <http://webbook.nist.gov/chemistry/> [Consulta: 26 de Agosto de 2014]
2. BELOHLAV, Zdenek; ZAMOSTNY, Petr and HERINK, Tomas. The Kinetic Model of Thermal Cracking for Olefins Production. En: *Chemical Engineering and Processing*. June, 2003. Vol. 42, no. 6, p. 461-473
3. BILLAUD, F; ELYAHYAOUI, K and BARONNET, F. Mechanistic Modeling of the Pyrolysis of the n-Hexane. En: *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. June, 1990. Vol. 19. p. 29-40.
4. EBERT, K. H; EDERER, H. J and ISBARN, G. The Thermal Decomposition of n-Hexane. En: *International Journal of Chemical Kinetics*. May, 1983. Vol. 15, no. 6, p. 475-502.
5. Encyclopedia of Mathematics. The Netherlands, Agosto 31, 1997, Vol. 3. ISBN 0-7923-4709-9.
6. FROMENT, Gilbert F; BISCHOFF. Chemical Reactor Analysis and Design. USA: John Wiley & Sons, Inc, 1979. ISBN 0-471-02447-3.
7. HELFFERICH G, Friedrich. Comprehensive Chemical Kinetics. Volume 38. Minnesota: R. W. Carr, 2001. ISBN 978-0-444-51366-3.
8. HERZFELD, Karl and RICE, Francis. The Thermal Decomposition of Organic Compounds from the Standpoint of Free Radicals. En: *Journal of the American Chemical Society*. February, 1934. Vol. 56, no. 2, p. 284-289.

9. KENNETH, Beers. Numerical Methods for Chemical Engineering. New York: Cambridge University Press, 2007. ISBN 978-0-511-25650-9.
10. MARQUAIRE, Paul-Marie; MULLER, Chantal and COME, Guy-Marie. Kinetics of Hexane Pyrolysis at Very High Pressures. En: *Energy & Fuels*. January, 1990. Vol. 4, p. 2-10.
11. MOHAMMAD, Ghashghae and KARIMZADEH, Ramin. Multivariable Optimization of Thermal Cracking Severity. En: *Chemical Engineering Research and Design*. 2011. Vol. 89, no. 7, p. 1067-1077.
12. MOLER, Cleve. Ordinary Differential Equations. En: Numerical Computing with MATLAB. Reimpresión revisada. Estados Unidos, *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 2004. p. 19.
13. NIÑO, Adriana y DE HOYOS, Ricardo. Evaluación de la adición de Corrientes intermedias como donadores de hidrógeno en la viscorreducción de los fondos demex. Trabajo de grado de Ingeniería Química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química, 2005.
14. REID, Robert C; PRAUSNITZ, John M. and POLING, Bruce E. The Properties of Gases & Liquids. Fourth Edition. New York: McGraw Hill, 1987. ISBN 0-07-051799-1.
15. SMITH, J. M; VAN NESS, H.C. and ABBOTT, M. M. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Cuarta Edición. México: McGraw Hill, 1997. ISBN 968-422-287-4.

16. SPEIGHT, James. The Chemistry and Technology of Petroleum. Third Edition. New York: Marcel Dekker, Inc, 1999. ISBN 0-8247-0217-4.
17. SUNDARAM, Meenakshi and FROMENT, Gilbert. Modeling of Thermal Cracking Kinetics. En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*. August, 1978. Vol. 17, p. 174-182.
18. The Mathworks Inc. Ordinary Differential Equations. En: MATLAB, The Language of Technical Computing. Versión 5. p. 8-10.
19. VAN GEEM, Kevin; REYNIERS, Marie; MARIN, Guy. Two Severity Indices for Scale-Up of Steam Cracking Coils. En: *Industrial and Engineering Chemistry*. 2005. Vol. 44, p. 3402-3411.
20. VERWER, J. G; SPEE, E. J. and BLOM, J. G. A Second-Order Rosenbrock Method Applied to Photochemical Dispersion Problems. En: *Society for Industrial and Applied Mathematics*. March, 1999. Vol. 20, p. 1456-1480.

Anexo A. Parámetros cinéticos

Tabla A1. Factor de frecuencia y energía de activación para cada una de las reacciones consideradas en la ruptura térmica del hexano.

Reacción	A [s ⁻¹]	E[J/mol]	Reacción	A [s ⁻¹]	E[J/mol]
1	8,32 * 10 ¹³	260000	17	8,2 * 10 ¹³	165000
2	8,32 * 10 ¹³	260000	18	1,26 * 10 ¹³	161000
3	8,32 * 10 ¹³	260000	19	1,2 * 10 ¹³	126000
4	1 * 10 ^{9,1}	48534,4	20	1,1 * 10 ¹³	149000
5	1 * 10 ^{8,9}	39748	21	4,92 * 10 ¹³	123000
6	1 * 10 ^{8,6}	39748	22	2 * 10 ¹³	126000
7	1 * 10 ⁸	52718,4	23	1 * 10 ^{12,6}	120080,8
8	1 * 10 ⁸	43513,6	24	4,68 * 10 ¹³	123000
9	1 * 10 ^{7,7}	43513,6	25	1 * 10 ^{13,5}	131796
10	1 * 10 ⁹	58900	26	1 * 10 ^{12,6}	116733,5
11	1 * 10 ¹¹	83680	27	1 * 10 ^{12,6}	116733,5
12	1 * 10 ^{11,1}	95813,6	28	1 * 10 ^{12,6}	116733,5
13	3,73 * 10 ⁸	45900	29	1 * 10 ⁹	0
14	1 * 10 ^{11,1}	69454,4	30	1 * 10 ^{10,7}	11600
15	1 * 10 ¹¹	83680	31	1 * 10 ^{8,9}	0
16	1 * 10 ^{11,1}	95813,6	32	1 * 10 ^{7,7}	0

FUENTES: EBERT, K. H; EDERER, H. J and ISBARN, G. The Thermal Decomposition of n-Hexane. On: International Journal of Chemical Kinetics. May, 1983. vol. 15. p. 475-502.

Base de datos de referencia estándar del NIST. Número 69,
<http://webbook.nist.gov/chemistry/> [Consulta: 26 de Agosto de 2014]

Anexo B. Códigos de MATLAB empleados para la resolución del sistema ODE del modelo cinético

Código 1

```
% Solver para el sistema de ecuaciones en la cinética de reacción para la
% ruptura térmico del hexano
% Autoras: Diana Carolina López García, Yuri Lizeth Lozano Duarte
% Escuela de Ingeniería Química
% Universidad Industrial de Santander
% Octubre 2014

clc;
clear;

%Matriz con valores de concentraciones iniciales de los compuestos [mol/m^3]
y(1)= 56.061;
for i=2:1:18
    y(i)=0;

end

% Rango de valores de tiempo en el que se da el proceso [s]
tspan=[0 1.5];

%Solver utilizado para solución del sistema de ecuaciones
```

```
[t,y]= ode23s(@F,tspan,y);
```

```
hold off
```

```
plot(t,y(:,1),'m')
```

```
xlabel('Tiempo [s]','FontSize',15)
```

```
grid
```

```
ylabel('Concentración [mol/m^3]','FontSize',15)
```

```
title ('Ruptura Térmica del Hexano para 850 K','FontSize',18)
```

```
set(gca,'FontSize',12)
```

Código 2

% Sistema de ecuaciones para la cinética de reacción en la ruptura % térmica
del hexano

% Autoras: Diana Carolina López García, Yuri Lizeth Lozano Duarte

% Escuela de Ingeniería Química

% Universidad Industrial de Santander

% Octubre 2014

% Función para la cinética del proceso

`function` [dy_dt]=F(t,y)

% En esta sección se hace el cálculo de las constantes de velocidad de

% reacción por medio de:

% T= Temperatura [K], E= Energía de activación [J/mol], A= Constante de

% reacción [s⁻¹]

T= 850;

A=[8.32*10¹³ 8.32*10¹³ 8.32*10¹³ 10^{9.1} 10^{8.9} 10^{8.6} 10⁸ 10⁸ 10^{7.7}
10⁹ 10¹¹ 10^{11.1} 3.73*10⁸ 10^{11.1} 10¹¹ 10^{11.1} 8.2*10¹³ 1.26*10¹³
1.2*10¹³ 1.1*10¹³ 4.92*10¹³ 2*10¹³ 10^{12.6} 4.68*10¹³ 10^{13.5} 10^{12.6}
10^{12.6} 10^{12.6} 10⁹ 10^{10.7} 10^{8.4} 10^{7.7}];

E=[260000 260000 260000 48534.4 39748 39748 52718.4 43513.6 43513.6
58900 83680 95813.6 45900 69454.4 83680 95813.6 165000 161000 126000
149000 123000 126000 120080.8 123000 131796 116733.5 116733.5 116733.5 0
11600 0 0];

`for` j=1:1:32

 k(j)=A(j).*exp(-E(j)./(8.314*T));

end

%Ecuaciones para la velocidad de reacción de cada compuesto [mol/s*m^3]

$$dy_dt(1)=-((k(1)+k(2)+k(3))*y(1))-((k(4)+k(5)+k(6))*y(1)*y(2))-((k(7)+k(8)+k(9))*y(1)*y(6));$$

$$dy_dt(2)=(k(1)*y(1))-((k(4)+k(5)+k(6))*y(2)*y(1))-((k(10)*y(2)*y(14))+k(19)*y(8))+k(22)*y(7)+k(25)*y(5)-(k(30)*((y(2))^2))-k(31)*y(2)*y(6));$$

$$dy_dt(3)=(k(1)*y(1))-((k(11)+k(23))*y(3))+k(12)*y(4);$$

$$dy_dt(4)=(k(11)*y(3))-((k(12)+k(24))*y(4));$$

$$dy_dt(5)=-k(25)*y(5);$$

$$dy_dt(6)=(k(2)*y(1))-((k(7)+k(8)+k(9))*y(1)*y(6))+k(10)*y(2)*y(14)-((k(17)*y(6))+k(21)*y(7))+k(24)*y(4)+k(28)*y(11))-k(31)*y(2)*y(6)-(k(32)*((y(6))^2));$$

$$dy_dt(7)=(k(2)*y(1))-((k(20)+k(21)+k(22))*y(7))+k(26)*y(9);$$

$$dy_dt(8)=(0.5*k(3)*y(1))-((k(18)+k(19))*y(8))+k(23)*y(3)+k(27)*y(10);$$

$$dy_dt(9)=(k(4)*y(1)*y(2))+k(7)*y(1)*y(6)-((k(13)+k(15)+k(26))*y(9))+k(14)*y(10)+k(16)*y(11);$$

$$dy_dt(10)=(k(5)*y(1)*y(2))+k(8)*y(1)*y(6))+k(13)*y(9))-((k(14)+k(27))*y(10));$$

dy_dt(11)=(k(6)*y(1)*y(2))+k(9)*y(1)*y(6))+k(15)*y(9))-((k(16)+k(28))*y(11));

dy_dt(12)=(k(17)*y(6))+k(18)*y(8))+k(20)*y(7))-k(29)*((y(12))^2));

dy_dt(13)=((k(4)+k(5)+k(6))*y(1)*y(2))+k(10)*y(2)*y(14))+k(31)*y(2)*y(6));

dy_dt(14)=((k(7)+k(8)+k(9))*y(1)*y(6))-
(k(10)*y(2)*y(14))+k(30)*((y(2))^2))+k(32)*((y(6))^2));

dy_dt(15)=(k(17)*y(6))+k(19)*y(8))+k(21)*y(7))+k(23)*y(3))+k(26)*y(9))+k(31)*y
(2)*y(6))+k(32)*((y(6))^2));

dy_dt(16)=(k(18)*y(8))+k(22)*y(7))+k(24)*y(4))+k(27)*y(10));

dy_dt(17)=(k(20)*y(7))+k(25)*y(5))+k(28)*y(11));

dy_dt(18)=(k(29)*((y(12))^2));

dy_dt=dy_dt';

return

Anexo C. Entalpía estándar de formación y capacidades caloríficas

Tabla A2. Entalpía estándar de formación y capacidades caloríficas de las especies moleculares consideradas en la ruptura térmico del hexano en estado de gas ideal, $\left[\frac{\text{J}}{\text{mol.K}}\right]$

Especie molecular	$\Delta H_f^\circ(298\text{K})$	$C_p(650\text{K})$	$C_p(690\text{K})$	$C_p(730\text{K})$	$C_p(770\text{K})$	$C_p(810\text{K})$	$C_p(850\text{K})$
C_6H_{14}	-166920	256,488	266,871	276,807	286,297	295,340	303,937
CH_4	-74520	55,624	57,679	59,677	61,618	63,501	65,327
C_2H_6	-83820	93,763	97,678	101,446	105,065	108,537	111,860
C_2H_4	52510	74,198	77,028	79,741	82,337	84,816	87,178
C_3H_6	19710	112,025	116,495	120,781	124,882	128,800	132,534
C_4H_8	-540	152,605	158,724	164,580	170,174	175,505	180,574
H_2	0	29,456	29,578	29,703	29,830	29,959	39,090

FUENTE: SMITH, J. M; VAN NESS, H.C. and ABBOTT, M. M. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Cuarta Edición. México: McGraw Hill, 1997. ISBN 968-422-287-4.

* Las capacidades caloríficas fueron calculadas a partir de la ecuación:

$$\frac{C_p}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2}, \text{ cuyas constantes se encuentran tabuladas en la}$$

fuentes citada.

Tabla A3. Entalpía estándar de formación y capacidades caloríficas de los radicales libres considerados en la ruptura térmica del hexano en estado de gas ideal $\left[\frac{\text{J}}{\text{mol.K}}\right]$

Radical libre	$\Delta H_f^0(298\text{K})$	$C_p(650\text{K})$	$C_p(690\text{K})$	$C_p(730\text{K})$	$C_p(770\text{K})$	$C_p(810\text{K})$	$C_p(850\text{K})$
CH_3^*	-42362	47,303	49,266	51,125	52,886	54,554	56,133
1 - $\text{C}_5\text{H}_{11}^*$	-41922	469,412	496,893	522,705	546,961	569,772	591,241
2 - $\text{C}_5\text{H}_{11}^*$	-92023	133,765	138,920	143,709	148,166	152,319	156,194
3 - $\text{C}_5\text{H}_{11}^*$	-92023	133,765	138,920	143,709	148,166	152,319	156,194
C_2H_5^*	-42252	48,148	50,201	52,131	53,945	55,650	57,254
1 - C_4H_9^*	-42032	49,838	52,071	54,142	56,062	57,844	59,498
1 - C_3H_7^*	-42142	48,993	51,136	53,136	55,004	56,747	58,376
1 - $\text{C}_6\text{H}_{13}^*$	-41812	51,528	53,941	56,153	58,180	60,038	61,741
2 - $\text{C}_6\text{H}_{13}^*$	-91913	134,610	139,855	144,715	149,225	153,416	157,316
3 - $\text{C}_6\text{H}_{13}^*$	-91913	134,610	139,855	144,715	149,225	153,416	157,316
H^*	0	20,786	20,786	20,786	20,786	20,786	20,786

FUENTE: REID, Robert C; PRAUSNITZ, John M. and POLING, Bruce E. The Properties of Gases & Liquids. Fourth Edition. New York: McGraw Hill, 1987. ISBN 0-07-051799-1.

* La entalpía de formación y capacidades caloríficas fueron calculadas a partir de las ecuaciones: $\Delta H_f^0(298\text{K}) = \sum n_j \Delta H_f^0$ y $C_p^0(T) = \sum n_j \left[A + B_1 \cdot \exp\left(\frac{-C_1}{T^{n_1}}\right) - B_2 \cdot \exp\left(\frac{-C_2}{T^{n_2}}\right) \right]$, cuyas constantes se encuentran tabuladas en la fuente citada

Anexo D. Códigos de MATLAB empleados para la resolución del sistema DAE en el diseño del reactor tipo “coil”

Código 1

% Sistema de ecuaciones para el diseño de un reactor PFR para la ruptura
térmica

% del hexano en proceso no isotérmico y no isobárico

% Autoras: Diana Carolina López García, Yuri Lizeth Lozano Duarte

% Escuela de Ingeniería Química

% Universidad Industrial de Santander

% Octubre 2014

% Función para el balance molar del reactor

function [df_dz]=EcuPFR850(z,f)

% En esta sección se hace el cálculo de las constantes de la velocidad de
% reacción por medio de:

% T= Temperatura [K], E= Energía de activación [J/mol], A= Constante de

% reacción [s⁻¹]

T= 850;

R= 8.314;

A=[8.32*10¹³ 8.32*10¹³ 8.32*10¹³ 10^{9.1} 10^{8.9} 10^{8.6} 10⁸ 10⁸ 10^{7.7}
10⁹ 10¹¹ 10^{11.1} 3.73*10⁸ 10^{11.1} 10¹¹ 10^{11.1} 8.2*10¹³ 1.26*10¹³
1.2*10¹³ 1.1*10¹³ 4.92*10¹³ 2*10¹³ 10^{12.6} 4.68*10¹³ 10^{13.5} 10^{12.6}
10^{12.6} 10^{12.6} 10⁹ 10^{10.7} 10^{8.4} 10^{7.7}];

```
E=[260000 260000 260000 48534.4 39748 39748 52718.4 43513.6 43513.6  
58900 83680 95813.6 45900 69454.4 83680 95813.6 165000 161000 126000  
149000 123000 126000 120080.8 123000 131796 116733.5 116733.5 116733.5 0  
11600 0 0];
```

```
for j=1:1:32
```

```
    k(j)=A(j).*exp(-E(j)./(R*T));
```

```
end
```

```
% y= Concentración inicial de hexano [mol/m^3]
```

```
y=56.061;
```

```
% ft= Flujo total, el cual se halla por medio de un balance molar global
```

```
% [mol/s]
```

```
ft=f(1)+f(2)+f(3)+f(4)+f(5)+f(6)+f(7)+f(8)+f(9)+f(10)+f(11)+f(12)+f(13)+f(14)+f(15)+f(  
16)+f(17)+f(18);
```

```
% Concentraciones de reactivos para procesos en fase gaseosa,
```

```
% no isotérmico y no isobárico
```

```
y1=y*(f(1)/ft);
```

```
y2=y*(f(2)/ft);
```

```
y3=y*(f(3)/ft);
```

```
y4=y*(f(4)/ft);
```

```
y5=y*(f(5)/ft);
```

```
y6=y*(f(6)/ft);
```

```
y7=y*(f(7)/ft);
```

```
y8=y*(f(8)/ft);
```

```
y9=y*(f(9)/ft);
```

```
y10=y*(f(10)/ft);
```

$$y11=y*(f(11)/ft);$$

$$y12=y*(f(12)/ft);$$

$$y14=y*(f(14)/ft);$$

% Cálculo de la velocidad de racción de cada compuesto [mol/s*m^3]

$$r1=-((k(1)+k(2)+k(3))*y1)-((k(4)+k(5)+k(6))*y1*y2)-((k(7)+k(8)+k(9))*y1*y6);$$

$$r2=(k(1)*y1)-((k(4)+k(5)+k(6))*y2*y1)-$$
$$(k(10)*y2*y14)+(k(19)*y8)+(k(22)*y7)+(k(25)*y5)-(k(30)*((y2)^2))-(k(31)*y2*y6);$$

$$r3=(k(1)*y1)-((k(11)+k(23))*y3)+(k(12)*y4);$$

$$r4=(k(11)*y3)-((k(12)+k(24))*y4);$$

$$r5=-k(25)*y5;$$

$$r6=(k(2)*y1)-((k(7)+k(8)+k(9))*y1*y6)+(k(10)*y2*y14)-$$
$$(k(17)*y6)+(k(21)*y7)+(k(24)*y4)+(k(28)*y11)-(k(31)*y2*y6)-(k(32)*((y6)^2));$$

$$r7=(k(2)*y1)-((k(20)+k(21)+k(22))*y7)+(k(26)*y9);$$

$$r8=(0.5*k(3)*y1)-((k(18)+k(19))*y8)+(k(23)*y3)+(k(27)*y10);$$

$$r9=(k(4)*y1*y2)+(k(7)*y1*y6)-((k(13)+k(15)+k(26))*y9)+(k(14)*y10)+(k(16)*y11);$$

$$r10=(k(5)*y1*y2)+(k(8)*y1*y6)+(k(13)*y9)-((k(14)+k(27))*y10);$$

$$r11=(k(6)*y1*y2)+(k(9)*y1*y6)+(k(15)*y9)-((k(16)+k(28))*y11);$$

$$r12=(k(17)*y6)+(k(18)*y8)+(k(20)*y7)-(k(29)*((y12)^2));$$

$$r13=((k(4)+k(5)+k(6))*y1*y2)+(k(10)*y2*y14)+(k(31)*y2*y6);$$

$$r14=((k(7)+k(8)+k(9))*y1*y6)-(k(10)*y2*y14)+(k(30)*((y2)^2))+(k(32)*((y6)^2));$$

$$r15=(k(17)*y6)+(k(19)*y8)+(k(21)*y7)+(k(23)*y3)+(k(26)*y9)+(k(31)*y2*y6)+(k(32)*((y6)^2));$$

$$r16=(k(18)*y8)+(k(22)*y7)+(k(24)*y4)+(k(27)*y10);$$

$$r17=(k(20)*y7)+(k(25)*y5)+(k(28)*y11);$$

$$r18=(k(29)*((y12)^2));$$

% Diametro interno del reactor [m]

$$Dt= 0.108;$$

% Balance molar específico de cada compuesto estudiado en el proceso

% [mol/m*s]

$$df_dz(1)=r1*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(2)=r2*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(3)=r3*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(4)=r4*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(5)=r5*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(6)=r6*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(7)=r7*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(8)=r8*((pi*(Dt^2))/4);$$

$$df_dz(9)=r9*((pi*(Dt^2))/4);$$

```

df_dz(10)=r10*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(11)=r11*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(12)=r12*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(13)=r13*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(14)=r14*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(15)=r15*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(16)=r16*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(17)=r17*((pi*(Dt^2))/4);
df_dz(18)=r18*((pi*(Dt^2))/4);

```

```
df_dz=df_dz';
```

%Calor especifico y entalpia para cada compuesto: Cp=[J/mol*K], H=[J/mol]

```

Cp=[303.937 56.133 591.241 156.195 156.195 57.254 59.498 58.376 61.741
157.316 157.316 20.786 65.326 111.860 87.178 132.534 180.574 30.090];

```

```

sfC=(f(1)*Cp(1))+f(13)*Cp(13))+f(14)*Cp(14))+f(15)*Cp(15))+f(16)*Cp(16))+f(17
)*Cp(17))+f(18)*Cp(18));

```

```

H=[74430.159 523162.703 78484.149 88024.539 93563.616 714503.389
606138.832 305040.161 43497.309 37660.880 43199.958 568476.141 -33149.426
30161.185 628596.500 598990.825 524927.075 -442338.104];

```

```
sH=
```

```

(r1*H(1))+r13*H(13))+r14*H(14))+r15*H(15))+r16*H(16))+r17*H(17))+r18*H(18
));

```

% Flux de calor necesario para que se de el proceso [J/s*m^2]

```
q=80000;
```

% Area transversal del reactor [m²]

$$At = (\pi * (Dt^2)) / 4;$$

% Balance de energía en el reactor

$$dT_dz = (1/sfC) * ((q * \pi * Dt) + (At * -sH));$$

$$dT_dz = dT_dz';$$

% Presion inicial del reactor [Pa]

$$P = 302961.750;$$

% Peso Molecular [Kg/mol]

$$PM = 0.08618;$$

% Velocidad del fluido en el reactor [m/s]

$$vs = 1398.296;$$

% Densidad promedio [kg/m³]

$$den = 1.859;$$

% Viscosidad promedio [Kg/m*s]

$$vis = 1.587 * 10^{-5};$$

% Número de Reynolds

$$Re = ((den * vs * Dt) / vis);$$

% Factor de fricción de Fanning

$$facfa = (0.046 * (Re^{-0.2}));$$

% Factor de conversión en la ecuación de caidad de Presion de Fanning

$$\alpha = 1;$$

$$sf = \text{sum}(df_dz);$$

$$G = (den * vs);$$

% Ecuación de Bernoulli

$$dP_{dz} = \left(\frac{sf}{G \cdot At} + \left(\frac{1}{PM} \right) \left(\left(\frac{1}{T} \right) \cdot \left(\frac{dT}{dz} \right) + \left(\frac{2 \cdot \text{facfa}}{Dt} \right) \right) \right) \left(\frac{1}{PM \cdot P} \right) - \left(\frac{P}{\alpha \cdot G^2 \cdot R \cdot T} \right);$$

$dP_{dz} = dP_{dz}';$

return

Código 2

```
% Solver para el sistema de ecuaciones en el diseño de un reactor PFR para la
ruptura térmica
% del hexano en proceso no isotérmico y no isobárico
% Autoras: Diana Carolina López García, Yuri Lizeth Lozano Duarte
% Escuela de Ingeniería Química
% Universidad Industrial de Santander
% Octubre 2014

clc;
clear

% Matriz con valores de flujo inicial de los compuestos [mol/s]
f(1)= 20;
for i=2:1:18
    f(i)=0;

end

% Rango de valor de longitud en el reactor PFR [m]
zspan=[0 95];

%Solver utilizado para solución del sistema de ecuaciones
Options= odeset('Refine','1','MassSingular','no','MStateDependence','strong');
[z,f]= ode23s(@EcuPFR850,zspan,f,Options);
```

```
hold off
plot(z,f(:,1),'m')
xlabel('Longitud del reactor [m]',FontSize,15)
grid
ylabel('Flujo [mol/s]',FontSize,15)
title ('Cracking Hexano para 850 K',FontSize,18)
set(gca,FontSize,12)
```

Anexo E. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación

Tabla A4. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación a 650 K.

Flujo molar total [mol/s]	Temperatura en el reactor [K]	Presión en el reactor [Pa]	Flujo molar total [mol/s]	Temperatura en el reactor [K]	Presión en el reactor [Pa]
20.012	915.719	1048670.62	20.025	1046.699	1419886.35
20.013	923.821	1071407.98	20.025	1047.602	1422427.88
20.013	925.846	1077092.33	20.025	1050.31	1430052.46
20.013	931.962	1094255.85	20.027	1069.423	1483947.09
20.015	950.427	1146077.47	20.028	1079.603	1512692.22
20.016	958.634	1169109.47	20.029	1083.689	1524198.2
20.016	960.686	1174867.47	20.029	1089.818	1541457.16
20.016	966.841	1192141.47	20.031	1106.098	1587443.81
20.018	981.2	1232445.63	20.031	1107.003	1589993.99
20.019	993.494	1266984.05	20.031	1107.185	1590504.02
20.019	999.649	1284257.84	20.032	1108.005	1593411.14
20.02	1001.701	1290015.78	20.032	1108.729	1595451.04
20.022	1022.173	1347571.1	20.032	1109.448	1598300.51
20.023	1029.398	1367950.2	20.032	1109.81	1599320.29
20.023	1029.434	1368051.94	20.032	1110.172	1600340.08
20.023	1029.348	1368407.38	20.032	1111.285	1604227.57
20.023	1029.529	1368916.01	20.032	1111.827	1605757.02
20.023	1029.602	1369119.46	20.032	1112.792	1609153.41
20.023	1029.49	1369378.72	20.032	1113.453	1611563.8
20.023	1029.743	1370090.7	20.032	1113.759	1612292.1
20.023	1029.865	1370727.2	20.032	1122.357	1619045.47
20.023	1029.937	1370930.61	20.033	1114.918	1615166.04
20.023	1029.974	1371032.31	20.033	1116.638	1620019.75
20.023	1030.01	1371134.01	20.033	1117.372	1622098.49
20.023	1030.205	1371974.54	20.033	1117.672	1622824.21

Tabla A4. (Continuación)

20.023	1030.278	1372177.93	20.033	1118.598	1625564.06
20.023	1030.849	1374367.3	20.033	1119.09	1626950.83
20.023	1031.572	1376400.95	20.033	1119.335	1627644.21
20.023	1032.741	1379904.57	20.033	1120.604	1631280.09
20.023	1033.283	1381429.73	20.033	1121.22	1633020.13
20.023	1033.463	1381938.12	20.034	1124.919	1643460.41
20.023	1034.186	1383971.67	20.034	1125.535	1645200.45
20.024	1039.686	1399673.72	20.034	1126.152	1646940.5
20.024	1041.492	1404757.33	20.034	1127.318	1650383.46
20.034	1129.725	1657308.9	20.036	1138.922	1684030.32
20.034	1130.342	1659048.85	20.036	1139.3	1685098.29
20.035	1131.574	1662528.76	20.036	1139.386	1685431.38
20.035	1132.807	1666008.66	20.036	1139.601	1686122.2
20.035	1134.895	1672500.41	20.036	1139.853	1686834.16
20.035	1135.021	1672856.41	20.036	1139.979	1687190.14
20.035	1135.147	1673212.41	20.036	1140.105	1687546.12
20.035	1135.588	1674458.66	20.036	1140.585	1688902.16
20.035	1136.218	1676238.66	20.036	1142.68	1691621.42
20.035	1136.344	1676594.66	20.036	1141.561	1691690.45
20.035	1136.47	1676950.66	20.036	1142.221	1693554.82
20.035	1136.596	1677306.66	20.036	1143.211	1696351.37
20.035	1137.016	1678399.81	20.036	1143.871	1698215.73
20.035	1137.083	1678720.76	20.036	1144.2	1699147.92
20.035	1137.209	1679076.75	20.036	1144.53	1700080.1
20.035	1137.461	1679788.75	20.036	1145.836	1703800.86
20.035	1137.839	1680856.74	20.036	1146.166	1704733.04
20.035	1138.166	1681894.38	20.036	1146.496	1705665.21
20.035	1138.292	1682250.37	20.037	1147.156	1707529.57
20.035	1138.418	1682606.36	20.037	1147.816	1709393.92
20.035	1138.796	1683674.33	20.037	1148.146	1710326.1

Tabla A5. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación a 690 K.

Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]	Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]
20.053	764.149	511785.131	20.094	793.657	594947.199
20.055	765.441	515423.318	20.097	795.404	600061.944
20.056	766.733	519061.503	20.098	796.306	602634.469
20.057	767.379	520880.596	20.107	801.797	618112.16
20.061	769.962	528156.966	20.11	803.627	623271.39
20.067	774.504	540960.196	20.113	805.457	628430.62
20.069	776.04	545286.187	20.117	807.661	635877.735
20.071	777.576	549612.179	20.123	811.389	646424.991
20.074	779.88	556101.165	20.13	815.705	658637.054
20.076	781.416	560427.157	20.132	816.784	661690.07
20.077	782.184	562590.152	20.134	817.863	664743.086
20.083	786.006	573395.181	20.145	822.971	682324.954
20.147	824.039	685372.056	20.515	961.486	1193299.6
20.152	827.243	694513.364	20.519	960.638	1197333.81
20.164	832.22	712024.197	20.527	963.859	1208050.86
20.167	834.334	718106.925	20.531	965.483	1213416.57
20.172	837.066	725964.215	20.555	975.224	1245610.8
20.182	841.043	740877.456	20.575	978.287	1269715.48
20.187	843.748	748720.394	20.579	979.883	1275066.11
20.192	846.453	756563.332	20.587	983.074	1285767.37
20.208	852.68	779074.094	20.595	986.265	1296468.63
20.21	854.017	782987.196	20.611	988.032	1315383.88
20.215	856.691	790813.399	20.619	991.174	1326058.92
20.228	863.376	810378.908	20.627	994.317	1336733.95
20.231	864.856	814710.14	20.655	1001.794	1372199.07
20.235	864.098	818176.649	20.659	1003.347	1377527.13
20.247	870.502	837126.911	20.667	1006.455	1388183.25
20.26	876.906	856077.173	20.675	1009.562	1398839.38
20.267	880.107	865552.304	20.691	1013.644	1419002.92
20.27	878.737	868688.273	20.695	1015.188	1424325.51

Tabla A5. (Continuación)

20.28	883.465	882860.846	20.703	1018.275	1434970.68
20.296	891.345	906481.802	20.707	1019.818	1440293.26
20.3	892.921	911205.993	20.719	1024.449	1456261.01
20.303	894.497	915930.184	20.727	1026.68	1466445.31
20.31	894.059	923443.454	20.734	1029.759	1477086.26
20.329	903.034	950734.088	20.738	1031.298	1482406.73
20.337	906.624	961650.342	20.75	1035.917	1498368.16
20.352	909.633	981234.511	20.754	1037.457	1503688.64
20.356	911.394	986674.605	20.766	1041.966	1519591.36
20.368	916.679	1002994.89	20.77	1043.569	1524947.04
20.38	921.964	1019315.17	20.778	1046.617	1535570.58
20.388	925.487	1030195.36	20.782	1048.156	1540890.88
20.396	924.289	1038531.27	20.79	1051.235	1551531.48
20.427	938.103	1081902	20.794	1052.774	1556851.78
20.431	937.108	1085856.37	20.8	1054.929	1564300.01
20.439	937.969	1095301.6	20.802	1056.416	1568335.72
20.447	941.35	1106105.23	20.804	1056.971	1570251.26
20.459	946.421	1122310.67	20.805	1057.526	1572166.81
20.467	949.802	1133114.29	20.81	1059.19	1577913.45
20.491	954.383	1162526.98	20.811	1059.745	1579828.99
20.814	1060.854	1583660.08	20.822	1064.835	1595506.19
20.815	1061.719	1585743.38	20.825	1065.946	1599338.33
20.82	1063.724	1591674.06	20.83	1067.613	1605086.54
20.821	1064.279	1593590.13	20.831	1068.445	1607151.4

Tabla A6. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación a 730 K.

Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]	Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]
20.273	759.468	386356.972	20.577	776.981	440203.162
20.281	759.993	387841.282	20.598	778.195	443747.969
20.289	760.517	389325.592	20.605	778.599	444929.571
20.293	760.779	390067.748	20.626	777.169	447161.193
20.308	761.828	393036.368	20.64	777.935	449503.071
20.312	762.091	393778.524	20.654	778.701	451844.949
20.324	762.867	396000.169	20.661	779.084	453015.888
20.328	763.13	396742.286	20.689	780.596	457638.098
20.34	763.916	398968.636	20.735	780.202	463894.888
20.348	764.44	400452.87	20.744	780.679	465421.896
20.356	764.965	401937.103	20.753	781.155	466948.904
20.36	765.227	402679.22	20.781	782.584	471529.928
20.374	766.147	405284.114	20.809	780.749	474489.92
20.384	766.761	407124.87	20.818	781.191	476000.151
20.4	767.742	409916.08	20.836	782.086	479025.532
20.405	768.071	410847.251	20.855	782.982	482050.912
20.415	768.728	412709.593	20.894	784.875	488450.34
20.426	769.385	414571.935	20.908	783.344	489575.494
20.441	770.371	417365.448	20.921	781.814	490700.853
20.447	770.699	418296.619	20.962	783.618	497252.92
20.462	771.433	420965.095	20.989	784.824	501622.42
20.468	771.76	421895.28	21.003	785.427	503807.17
20.489	773.066	425616.022	21.03	786.633	508176.67
20.495	773.438	426675.042	21.057	784.938	511105.31
20.509	774.272	429050.75	21.097	783.743	516168.138
20.522	775.107	431426.458	21.11	784.287	518323.248
20.536	774.56	433116.24	21.124	784.83	520478.358
20.543	774.959	434295.151	21.164	786.46	526943.689

Tabla A6. (Continuación)

21.204	784.382	531567.633	22.529	742.178	707584.583
21.238	781.976	535059.423	22.557	742.331	712097.963
21.277	783.387	541363.133	22.613	742.602	721107.189
21.337	785.505	550818.697	22.641	742.738	725611.802
21.356	786.211	553970.552	22.78	743.417	748134.867
21.376	786.916	557122.407	25.57	731.754	1257055.25
21.435	779.598	561891.657	25.591	743.157	1267156.85
21.474	780.784	568083.268	25.633	743.315	1276109.75
21.493	781.377	571179.092	25.696	743.498	1289512.38
21.532	782.563	577370.739	25.738	743.62	1298447.48
21.571	783.749	583562.387	25.78	743.742	1307382.57
21.629	774.168	587208.275	25.8	765.749	1322752.51
21.648	774.64	590243.851	25.883	766.382	1340815.81
21.667	775.112	593279.426	25.903	766.54	1345331.63
21.742	776.94	605045.165	25.944	766.857	1354363.28
21.832	779.182	619469.917	25.954	766.936	1356607.18
21.892	773.595	625569.796	26.005	787.943	1378068.14
21.922	767.474	626967.019	26.015	788.065	1380333.62
22.069	770.203	650508.529	26.025	788.187	1382599.09
22.099	770.748	655216.173	26.045	788.431	1387130.04
22.128	771.293	659923.817	26.075	788.797	1393926.47
22.186	772.382	669339.106	26.095	808.412	1408082.07
22.273	757.413	675216.561	26.115	808.737	1412652.83
22.331	758.091	684427.819	26.125	808.899	1414938.21
22.388	758.77	693639.077	26.165	809.547	1424079.72
22.416	759.109	698244.706	26.175	809.709	1426365.1

Tabla A7. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación a 770 K.

Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]	Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]
20.789	780.559	332989.053	20.898	781.588	335915.207
20.798	780.653	333255.065	20.908	781.682	336181.222
20.808	780.747	333521.079	20.918	781.776	336447.236
20.818	780.84	333787.094	20.928	781.843	336701.044
20.838	781.027	334319.122	20.96	782.137	337540.06
20.858	781.214	334851.15	20.973	782.259	337888.5
20.868	781.308	335117.165	21.605	783.819	352551.784
20.878	781.401	335383.179	21.641	784.077	353474.963
20.898	781.588	335915.207	21.659	784.205	353936.552
20.908	781.682	336181.222	21.677	784.334	354398.141
20.918	781.776	336447.236	21.695	784.463	354859.73
20.928	781.843	336701.044	21.762	778.863	353743.583
20.96	782.137	337540.06	21.788	778.975	354385.994
20.973	782.259	337888.5	21.814	779.087	355028.316
20.986	782.382	338236.94	21.84	779.199	355670.637
21	782.504	338585.38	21.893	779.423	356955.28
21.026	782.749	339282.26	21.919	779.535	357597.602
21.039	782.871	339630.7	21.945	779.647	358239.923
21.053	782.993	339979.141	21.97	779.76	358882.245
21.066	783.116	340327.581	22.048	773.257	357629.293
21.106	783.338	341305.811	22.074	773.296	358237.207
21.119	783.458	341652.862	22.099	773.332	358844.229
21.132	783.579	342000.686	22.125	773.368	359451.252
21.145	783.7	342348.511	22.176	773.44	360665.297
21.172	783.942	343044.16	22.201	773.477	361272.319
21.185	784.063	343391.984	22.227	773.513	361879.342
21.198	784.184	343739.809	22.277	773.585	363093.387
21.225	784.425	344435.458	36.981	120.674	900223.411
21.251	784.667	345131.107	37.014	117.512	903132.006
21.265	784.788	345478.932	37.046	114.35	906040.554

Tabla A7. (Continuación)

21.278	784.29	345538.683	37.079	111.188	908949.121
21.296	784.45	346014.758	37.143	281.397	996900.506
21.333	784.769	346966.908	37.175	279.075	1000199.58
21.351	784.929	347442.983	37.238	274.429	1006797.67
21.388	785.249	348395.133	37.269	272.106	1010096.71
21.406	785.408	348871.208	37.331	267.46	1016694.8
21.442	785.728	349823.357	37.362	265.138	1019993.85
21.46	785.888	350299.432	37.392	262.815	1023292.9
21.479	786.048	350775.507	37.422	260.492	1026591.93
21.497	786.207	351251.582	37.483	400.601	1100548.85
21.533	783.306	350705.973	37.513	398.932	1104152.21
21.569	783.562	351628.606	37.542	397.263	1107755.56
21.587	783.691	352090.195	37.572	395.594	1111358.92
37.63	392.256	1118565.64	38.006	594.993	1271605.92
37.66	390.587	1122169.02	38.022	594.566	1273965.65
37.688	388.918	1125772.36	38.03	594.353	1275145.51
37.717	387.25	1129375.72	38.038	594.14	1276325.39
37.774	502.548	1191793.38	38.046	593.927	1277505.24
37.802	501.392	1195635.39	38.061	635.403	1299368.15
37.83	500.236	1199477.4	38.069	675.035	1319095.56
37.858	499.08	1203319.41	38.077	674.92	1320321.32
37.914	496.768	1211003.43	38.085	674.805	1321547.09
37.941	495.612	1214845.44	38.1	674.576	1323998.62
37.959	494.865	1217327.43	38.108	674.462	1325224.38
37.967	494.528	1218449.38	38.116	674.347	1326450.14
37.983	595.632	1268066.33	38.123	674.233	1327675.91
37.991	595.419	1269246.2	38.139	674.004	1330127.43
37.999	595.206	1270426.06	38.146	695.67	1341491.74

Tabla A8. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación a 810 K.

Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]	Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]
24.275	818.928	328350.752	25.263	821.057	334777.541
24.299	818.98	328499.32	25.347	821.26	335360.908
24.346	819.084	328796.451	25.472	821.564	336235.959
24.393	819.189	329093.584	25.514	821.665	336527.643
24.464	819.345	329539.283	25.596	821.868	337111.011
24.487	819.398	329687.85	25.678	822.071	337694.378
24.534	819.502	329984.982	25.799	822.375	338569.429
24.58	819.607	330282.115	25.839	822.476	338861.113
24.649	819.763	330727.814	25.919	822.679	339444.48
24.672	819.816	330876.381	25.998	822.881	340027.847
24.718	819.92	331173.513	26.116	822.247	340492.28
24.763	820.025	331470.646	26.155	822.343	340781.429
24.831	820.181	331916.345	26.232	822.53	341357.861
24.853	820.234	332064.911	26.309	822.718	341934.915
24.919	820.389	332505.772	26.423	823.001	342800.496
25.006	820.449	333027.439	26.461	823.095	343089.023
25.135	820.753	333902.49	26.535	823.283	343666.077
26.72	823.754	345108.712	44.452	958.003	1344652.69
26.756	823.848	345397.238	44.461	958.66	1349270.01
26.828	824.036	345974.292	44.474	959.644	1356195.99
26.943	824.343	346913.818	44.478	959.972	1358504.65
27.114	824.803	348323.105	44.486	960.628	1363121.96
27.17	824.956	348792.868	44.495	961.284	1367739.29
27.282	821.917	348269.99	44.502	961.862	1371808.61
27.392	822.157	349180.138	44.504	962.055	1373165.05
27.556	822.516	350545.361	44.509	996.993	1391003.69
27.61	822.635	351000.436	44.514	1027.315	1406820.64
27.718	822.875	351910.584	44.521	1028.137	1410996.76
27.824	823.114	352820.733	44.524	1028.411	1412388.8

Tabla A8. (Continuación)

27.982	823.473	354185.956	44.528	1028.959	1415172.89
28.034	823.593	354641.03	44.531	1029.233	1416564.93
28.137	823.832	355551.179	44.538	1030.055	1420741.05
28.239	824.072	356461.327	44.54	1030.329	1422133.09
28.39	824.431	357826.55	44.542	1030.603	1423525.14
28.439	824.551	358281.624	44.547	1031.151	1426309.22
28.538	824.79	359191.773	44.551	1031.7	1429093.3
28.636	816.606	356419.814	44.554	1031.974	1430485.34
44.286	746.586	1176333.78	44.556	1032.248	1431877.38
44.311	745.824	1186825.75	44.561	1079.178	1454965.52
44.326	745.367	1193120.92	44.565	1079.84	1457799.55
44.331	809.735	1223461.59	44.567	1080.171	1459216.57
44.341	863.378	1251270.56	44.57	1080.502	1460633.59
44.351	863.628	1255710.1	44.574	1081.164	1463467.62
44.365	864.003	1262369.41	44.579	1081.826	1466301.65
44.37	864.128	1264589.18	44.581	1082.158	1467718.67
44.38	864.378	1269028.72	44.583	1082.489	1469135.68
44.389	864.628	1273468.26	44.587	1083.151	1471969.72
44.403	865.002	1280127.58	44.592	1083.813	1474803.75
44.407	865.127	1282347.35	44.594	1084.144	1476220.77
44.417	865.377	1286786.89	44.596	1084.475	1477637.78
44.426	865.627	1291226.43	44.6	1085.137	1480471.82
44.439	957.019	1337726.71	44.605	1096.891	1488160.78
44.443	957.347	1340035.37	44.607	1107.671	1494152.15

Tabla A9. Perfiles de flujo total, temperatura y presión obtenidos en la simulación a 850 K.

Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]	Flujo molar total [<i>mol/s</i>]	Temperatura en el reactor [<i>K</i>]	Presión en el reactor [<i>Pa</i>]
46.1281	916.3297	390013.072	46.2251	1091.3771	406642.576
46.1302	916.3297	390013.072	46.2281	1091.3771	406642.576
46.1322	916.3297	390013.072	46.2296	1091.3771	406642.576
46.1343	916.3297	390013.072	46.2325	1091.3771	406642.576
46.1383	916.3297	390013.072	46.234	1091.3771	406642.576
46.1423	916.3297	390013.072	46.2369	1145.873	411819.686
46.1442	916.3297	390013.072	46.2384	1145.873	411819.686
46.1462	916.3297	390013.072	46.2441	1145.873	411819.686
46.1501	916.3297	390013.072	46.2455	1145.873	411819.686
46.152	916.3297	390013.072	46.2469	1145.873	411819.686
46.1539	916.3297	390013.074	46.2483	1145.873	411819.686
46.1558	916.3297	390013.073	46.2511	1145.873	411819.686
46.1615	916.3297	390013.073	46.2524	1145.873	411819.686
46.167	972.6925	395367.541	46.2538	1145.873	411819.686
46.1688	1017.1812	399593.967	46.2565	1145.873	411819.685
46.1706	1017.1812	399593.967	46.2592	1145.873	411819.685
46.1741	1017.1812	399593.967	46.2605	1145.873	411819.684
46.1759	1017.1812	399593.967	46.2618	1145.873	411819.686
46.1794	1017.1812	399593.967	46.2632	1145.873	411819.686
46.1811	1017.1812	399593.967	46.2671	1185.8425	415616.789
46.1846	1017.1812	399593.967	46.2697	1185.8425	415616.789
46.1863	1017.1812	399593.967	46.271	1185.8425	415616.789
46.188	1017.1812	399593.967	46.2735	1185.8425	415616.789
46.1897	1017.1812	399593.967	46.2761	1185.8425	415616.789
46.1931	1017.1812	399593.968	46.2773	1185.8425	415616.789
46.1964	1017.1812	399593.967	46.2786	1185.8425	415616.789
46.1981	1017.1812	399593.967	46.2798	1185.8425	415616.789
46.1997	1017.1812	399593.967	46.2835	1185.8425	415616.788
46.2063	1091.3771	406642.576	46.2848	1185.8425	415616.788

Tabla A9. (Continuación)

46.2079	1091.3771	406642.576	46.286	1185.8425	415616.789
46.2095	1091.3771	406642.576	46.2872	1185.8425	415616.787
46.2127	1091.3771	406642.576	46.2896	1185.8425	415616.789
46.2158	1091.3771	406642.576	46.2908	1201.4978	417104.04
46.2174	1091.3771	406642.576	46.292	1213.8581	418278.266
46.2189	1091.3771	406642.576	46.2956	1213.8581	418278.266
46.3014	1213.8581	418278.266	46.3221	1232.3247	420032.601
46.3025	1213.8581	418278.266	46.3227	1232.3247	420032.599
46.3059	1213.8581	418278.266	46.3233	1232.3248	420032.601
46.307	1213.8581	418278.265	46.3239	1232.3248	420032.601
46.3081	1213.858	418278.265	46.3257	1245.1293	421249.034
46.3087	1213.8581	418278.265	46.3262	1245.1293	421249.034
46.31	1213.858	418278.264	46.3268	1245.1293	421249.034
46.3106	1213.8581	418278.266	46.328	1245.1293	421249.034
46.3112	1213.8581	418278.266	46.3291	1245.1293	421249.034
46.3118	1224.0116	419242.856	46.3297	1245.1293	421249.034
46.3137	1232.3248	420032.601	46.3309	1245.1293	421249.034
46.3149	1232.3248	420032.601	46.3314	1245.1293	421249.034
46.3161	1232.3248	420032.601	46.3331	1245.1293	421249.033
46.3167	1232.3248	420032.601	46.3337	1245.1293	421249.034
46.3191	1232.3248	420032.601	46.3343	1245.1293	421249.034
46.3197	1232.3248	420032.601	46.3348	1245.1293	421249.032
46.3203	1232.3247	420032.6	46.3365	1247.9642	421518.348
46.3209	1232.3247	420032.6	46.3371	1250.6444	421772.968

Anexo F. Balance molar de carbono

Las moles iniciales de carbono, n_{C_0} , que ingresan al proceso de ruptura térmica del hexano, están dadas por la siguiente expresión:

$$n_{C_0} = C_1 \cdot Y_1(0) \cdot V \quad (77)$$

Y dado que el hexano es el reactivo principal, dichas moles iniciales de carbono son aportadas únicamente por éste componente. Por lo tanto, sabiendo que la cantidad de carbonos presentes en el hexano es $C_1 = 6$, que la concentración inicial del hexano es $Y_1(0) = 56,061 \text{ mol}/\text{m}^3$ y el volumen del reactor es $V = 0,870 \text{ [m}^3\text{]}$, se obtiene que las moles iniciales de carbono son $n_{C_0} = 292,736 \text{ mol}$.

De manera análoga, las moles finales de carbono, n_{C_f} , se determinan por la ecuación que se presenta a continuación:

$$n_{C_f} = \left(\sum C_j \cdot Y_j \right) \cdot V \quad (78)$$

En donde se consideran los valores de $C_j \cdot Y_j$ para el reactivo y los cinco productos principales; es decir, la ecuación 77 es una simplificación de la ecuación 78. Así pues, el balance molar de carbono, está dado por:

$$n_{C_0} = n_{C_f} \quad (78)$$

Los valores de Y_j , son obtenidos de a partir de la simulación realizada para la sección de determinación de la cinética de reacción y se presentan a continuación en las Tablas de la A10, a la A14, para las diferentes temperaturas consideradas en este trabajo.

Tabla A10. Concentración final del hexano y los productos principales para 650 K

Compuesto	Concentración, Y_j , en [mol/m^3]
C_6H_{14}	56,043
CH_4	0,001
C_2H_6	0,017
C_2H_4	0,006
C_3H_6	0,001
C_4H_8	0,014

Tabla A11. Concentración final del hexano y los productos principales para 690 K

Compuesto	Concentración, Y_j , en [mol/m^3]
C_6H_{14}	55,000
CH_4	0,076
C_2H_6	0,985
C_2H_4	0,384
C_3H_6	0,077
C_4H_8	0,831

Tabla A12. Concentración final del hexano y los productos principales para 730 K

Compuesto	Concentración, Y_j , en [mol/m^3]
C_6H_{14}	45,871
CH_4	0,800
C_2H_6	9,386
C_2H_4	4,200
C_3H_6	0,801
C_4H_8	7,690

Tabla A13. Concentración final del hexano y los productos principales para 810 K

Compuesto	Concentración, Y_j , en [mol/m^3]
C_6H_{14}	1,424
CH_4	5,229
C_2H_6	49,350
C_2H_4	28,176
C_3H_6	5,236
C_4H_8	37,937

Tabla A14. Concentración final del hexano y los productos principales para 850 K

Compuesto	Concentración, Y_j , en [mol/m^3]
C_6H_{14}	0,311
CH_4	5,929
C_2H_6	49,714
C_2H_4	31,637
C_3H_6	5,930
C_4H_8	36,982

Una vez conocidos estos valores de concentración, y sabiendo el número de carbonos presentes en cada compuesto, así como el volumen del reactor, es posible determinar las moles finales de carbono para cada temperatura. En la tabla A15 se encuentran dichos valores.

Tabla A15. Moles finales de carbono para cada temperatura considerada en la simulación

Temperatura, [K]	Moles finales de carbono, n_{C_f}
650	292,734
690	292,732
730	292,726
770	292,699
810	292,661
850	292,599