“EVALUACIÓN TEÓRICA/EXPERIMENTAL DE LAS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS DEL COMBUSTIBLE JET-A1 Y EL EFECTO GENERADO EN DICHAS PROPIEDADES POR LA PRESENCIA DE AGUA”

ALIRIO YOBANY BENAVIDES CHAVES

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA SEDE MEDELLÍN
FACULTAD DE MINAS, DEPARTAMENTO DE PROCESOS Y ENERGÍA
MEDELLÍN, COLOMBIA
2020

“EVALUACIÓN TEÓRICA/EXPERIMENTAL DE LAS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS DEL COMBUSTIBLE JET-A1 Y EL EFECTO GENERADO EN DICHAS PROPIEDADES POR LA PRESENCIA DE AGUA”

ALIRIO YOBANY BENAVIDES CHAVES

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Doctor en Ingeniería – Sistemas Energéticos

Diretor: Pedro Nel Benjúmea
Ph.D.

Línea de Investigación
Combustibles Líquidos

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA SEDE MEDELLIN
FACULTAD DE MINAS, DEPARTAMENTO DE PROCESOS Y ENERGÍA
MEDELLÍN, COLOMBIA
2020

DEDICATORIA

A mi esposa, mis hijos, mis padres y mis suegros, quienes son mi principal motivación
para salir adelante

AGRADECIMIENTOS

Para agradecer a todas las personas que, con su apoyo, colaboraron y compresión hicieron posible este trabajo, no alcanzarían páginas para nombrar a todas.

Por tanto

GRACIAS

A Dios y A Todos Ustedes

TABLA DE CONTENIDO

LISTA DE TABLAS 11
LISTA DE FIGURAS 13
ABREVIATURAS 15
RESUMEN 21
ABSTRACT 22
TITULO 23
TITLE 23
OBJETIVOS 24
1. INTRODUCCIÓN 25
2. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE 27
2.1. OBTENCIÓN, NATURALEZA QUÍMICA Y CARACTERIZACIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1 28
2.1.1 Obtención del Combustible Jet A1 28
2.1.2. Naturaleza química del combustible Jet A1 30
2.1.3. Caracterización del combustible Jet A1 32
2.1.4. Normatividad legal del combustible Jet A1 37
2.1.5. Comportamiento del agua en el combustible Jet A1 41
2.2. RELACIONES PROPIEDAD COMPOSICIÓN PARA EL COMBUSTIBLE JET A1 45
2.2.1. Técnicas para determinar composición en el combustible Jet A1 46
2.2.2. Relaciones propiedad-composición para el combustible Jet A1 48
2.3. MODELOS TEÓRICOS 50
2.3.1. Gravedad API del combustible Jet A1 51
2.3.2. Calor de combustión del combustible Jet A1 51
2.3.3. Temperatura de inicio de cristalización del combustible Jet A1 52
2.3.4. Punto de inflamación del combustible Jet A1 54
3. TRABAJO EXPERIMENTAL 58
3.1. RECOLECCIÓN DE MUESTRAS DE COMBUSTIBLE JET A1 58
3.2. EVALUACIÓN DE LA COMPOSICIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1 62
3.2.1. Descripción del método 63
3.2.2. Preparación de la muestra 64
3.2.3. Preparación de los estándares 64
3.2.4. Tratamiento de datos de la GC-MS 64
3.3. CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL COMBUSTIBLE JET A1 69
3.3.1. Calor de combustión 70
3.3.2. Destilación 70
3.3.3. Gravedad API 71

3.3.4. Punto de congelamiento 71
3.3.5. Punto de inflamación 72
3.3.6. Viscosidad cinemática 72
3.3.7. Temperatura de inicio de cristalización 73
3.3.8. Humedad 74
3.4. EFECTO GENERADO EN EL JET A1 POR UN PROCESO DE MEZCLADO CON AGUA 75
3.4.1. Diseño de experimentos para verificar el efecto contacto agua combustible Jet A1 75
3.4.2. Evaluación de conformidad del combustible Jet A1 78
3.5. METODOLOGÍA USADA EN ANALISIS ESTADÍSTICO 79
3.5.1. Análisis Univariado. 79
3.5.2. Análisis Multivariado. 82
3.5.3. Análisis de componentes principales (PCA) 83
3.5.4. Pruebas de bondad de ajuste 85
3.5.5. Análisis de regresión. 86
3.6. MEDICIÓN DE LA EXACTITUD DE LOS MODELOS 90
3.6.1. Error del pronostico 90
3.6.2. Comparación con un programa de pruebas de aptitud 91
4. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS 92
4.1. EVALUACIÓN EXPERIMENTAL DEL COMBUSTIBLE JET A1 93
4.1.1. Evaluación de la composición 93
4.1.2. Evaluación de la composición por número de carbono 103
4.1.3. Caracterización fisicoquímica 105
4.1.4. Análisis estadístico por composición de componentes 115
4.1.5. Análisis estadístico por composición de carbonos 122
4.1.6. Comparación de resultados de composición 130
4.2. EFECTO GENERADO EN EL JET A1 POR UN PROCESO DE MEZCLADO CON AGUA 132
4.2.1. Diseño de experimentos 132
4.2.2. Evaluación composicional y evaluación de la conformidad 133
4.2.3. Análisis estadístico 143
4.2.4. Pruebas de verificación 153
4.3. EVALUACIÓN TEÓRICA DEL COMBUSTIBLE JET A1 160
4.3.1. Evaluación de las propiedades fisicoquímicas 160
4.3.2. Medición de exactitud de las relaciones propiedad composición 171
5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVA DE FUTURO 175
BIBLIOGRAFIA 179
ANEXOS 182

LISTA DE TABLAS

- Tabla 1. Especificaciones para Jet A y Jet A1 norma ASTM D 1655 38
- Tabla 2. Especificaciones para Jet A y Jet A1 norma DEF STAN 91-91 39
- Tabla 3. Especificaciones para Jet A1 norma NTC 1899 40
- Tabla 4. Matriz de componentes utilizada por Shi et al. (2017) 48
- Tabla 5. Propiedades de componentes puros 57
- Tabla 6. Muestras recolectadas de combustible Jet A1 59
- Tabla 7. Pruebas de calidad para Jet A1 70
- Tabla 8. Pre-ensayos realizados 76
- Tabla 9. Diseño de experimentos 77
- Tabla 10. Especificaciones de calidad 78
- Tabla 11. Tabla ANOVA para la Regresión Lineal 88
- Tabla 12. Programa de pruebas de aptitud 91
- Tabla 13. Clases de hidrocarburos identificadas por GC-MS 93
- Tabla 14. Valores totales por clase de hidrocarburos (% masa) 93
- Tabla 15: Valores promedio de composición del Jet A1 por número de carbono 104
- Tabla 16. Caracterización fisicoquímica – Destilación (°C) 106
- Tabla 17. Caracterización fisicoquímica – Otras propiedades.....108
- Tabla 18. Caracterización fisicoquímica – Otras propiedades.....118
- Tabla 19. Regresiones individuales - componentes 120
- Tabla 20. Componentes que afectan las propiedades fisicoquímicas 121
- Tabla 21. Condiciones de correlación – No. Carbonos 123
- Tabla 22. Análisis de componentes principales para las variables de entrada correlacionadas – No. Carbonos.....124
- Tabla 23. Regresiones individuales – No. Carbonos.....126
- Tabla 24. Composición por No. Carbonos que afectan las propiedades fisicoquímicas 129
- Tabla 25. Comparación de resultados obtenidos - componentes.....131
- Tabla 26. Diseño de experimentos realizado 132
- Tabla 27. Resultados por familia de hidrocarburos generados por proceso de mezclado agua - Jet A1 134
- Tabla 28. Medidas estadísticas univariadas en el proceso de mezclado agua-Jet A1 144
- Tabla 29. Prueba Kruskal-Wallis (*indica diferencias estadísticamente significativas) 146
- Tabla 30. Efecto de la cantidad de agua agregada sobre las variables observadas 151

- Tabla 31. Análisis de humedad - efecto contacto agua 154
- Tabla 32. Análisis de componentes principales para las variables de entrada 156
- Tabla 33. Regresiones individuales composición propiedades 157
- Tabla 34. Resumen de las variables con más peso en cada componente. 158
- Tabla 35. Relaciones propiedad composición Gravedad API.....160
- Tabla 36. Relaciones propiedad composición Calor de combustión bruto 162
- Tabla 37. Relaciones propiedad composición punto de congelamiento 163
- Tabla 38. Relaciones propiedad composición Tco 165
- Tabla 39. Relaciones propiedad composición punto de inflamación 166
- Tabla 40. Relaciones propiedad composición viscosidad cinematica a -20 °C 168
- Tabla 41. Relaciones propiedad composición destilación 169
- Tabla 42. Errores en las relaciones propiedad composición 171
- Tabla 43. Comparación con programa de pruebas de aptitud ASTM 172

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1. Esquema de una refinería moderna 30
- Figura 2. Solubilidad del agua vs Temperatura para combustibles Jet..... 43
- Figura 3. Imágenes de enfriamiento de gotas de agua en combustible Jet A1 45
- Figura 4. % de muestras de Jet A1 tomadas en cada región 61
- Figura 5. Muestras de Jet A1 tomadas en cada región por cada mes..... 62
- Figura 6. Esquema GC-MS..... 63
- Figura 7. Cromatograma para una muestra de Jet A1 65
- Figura 8. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z de 85 compuestos parafínicos identificados (0 a 26) minutos 66
- Figura 9. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z de 91 compuestos aromáticos identificados (2 a 14) minutos 67
- Figura 10. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z de 141 compuestos naftalenos identificados (15 a 20) minutos 68
- Figura 11. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z (128 y 141) compuestos naftalenos e indanos identificados (12 a 20) minutos..... 69
- Figura 12. Termograma para una muestra de Jet A1..... 74
- Figura 13. Esquema de resultados 92
- Figura 14. Composición del Jet A1 por clase de hidrocarburo 96
- Figura 15. Evaluación de componentes parafínicos principales 99
- Figura 16. Evaluación de componentes nafténicos principales 100
- Figura 17. Evaluación de componentes aromáticos principales 101
- Figura 18. Evaluación de componentes naftalenos principales 102
- Figura 19. Composición del Jet A1 por número de carbono.....103
- Figura 20. Contenido de aromáticos 110
- Figura 21. Calor de combustión 111
- Figura 22. Gravedad API 111
- Figura 23. Punto de inflamación 112
- Figura 24. Destilación 113
- Figura 25. Punto de congelamiento y temperatura de inicio de cristalización.114
- Figura 26. Viscosidad a -20 °C 115
- Figura 27. Matriz de correlaciones de la variable de salida – propiedades fisicoquímicas 116
- Figura 28. Matriz de correlaciones de la variable entrada - componentes.....117
- Figura 29. Matriz de correlaciones variable de salida – No. Carbono.....122
- Figura 30. Efecto en familia de hidrocarburos por proceso de mezclado agua - Jet A1 135

- Figura 31. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en componentes individuales.....137
- Figura 32. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1.....138
- Figura 33. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en la destilación ..140
- Figura 34. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en la gravedad API y punto de inflamación.....141
- Figura 35. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en las propiedades de fluidez 142
- Figura 36. Box-plot por muestra.....145
- Figura 37. Box-plot por muestra (*indica diferencias estadísticamente significativas) 146
- Figura 38. Box-plot particularizada para nafténicos (*indica diferencias estadísticamente significativas) 148
- Figura 39. Matriz de correlaciones generada para evaluar el efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 149
- Figura 40. Biplot.....150
- Figura 41. Matriz de correlaciones de las variables de entrada efecto composición propiedades 155
- Figura 42. Comportamiento relaciones propiedad composición Gravedad API 161
- Figura 43. Comportamiento relaciones propiedad composición calor de combustión bruto 163
- Figura 44. Comportamiento relaciones propiedad composición punto de congelamiento 164
- Figura 45. Comportamiento relaciones propiedad composición “Tco”.....166
- Figura 46. Comportamiento relaciones propiedad composición punto de Inflamación 167
- Figura 47. Comportamiento relaciones propiedad composición viscosidad ...168
- Figura 48. Comportamiento relaciones propiedad composición destilación ...170

ABREVIATURAS

AGO	Destilado pesado atmosférico
ASTM	American Society of Testing Materials
AVTUR	Combustible de turbina de aviación
C NMR:	Resonancia magnética nuclear de carbón
CGSB	Canadian General Standards Board
DEF STAN	Defence Standars
DSC	Differential Scanning Calorimetry
FAME	Metilester de ácido graso
FID.	Detector de ionización de llama
FT	Transformada de Fourier
FTIR:	Espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier
GC	Cromatografía de gases
GC*GC	cromatografía de gases bidimensional
GC*GC:	Cromatografía de gases bidimensional
GC-MS:	Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas
GCxGC-MS/FID	Cromatografía de gases bidimensional comprensiva acoplada con espectrometría de masas
GRNN:	Regresiones generales de redes neuronales
H NMR:	Resonancia magnética nuclear de protones
HPLC	Cromatografía liquida de alta resolución
IEC	International Electrotechnical Commission
IR	Espectroscopia infrarroja
ISO	International Organization for Standardization
LC:	Cromatografía liquida
MAD	Error absoluto promedio
MAPE	Error absoluto porcentual promedio
MS	Espectrometría de masas
MSE	Error cuadrático medio
NIR	Espectroscopia de infrarrojo cercano
NIR:	Espectroscopia de infrarrojo cercano
NMR	Resonancia magnética Nuclear
NTC	Normas Técnica Colombiana
ONAC	Organismo Nacional de Acreditación
PLS	Mínimos cuadrados parciales
PLS:	Mínimos cuadrados parciales
RMSE	Raíz cuadrada del error cuadrático medio
Tco	Temperatura de inicio de cristalización

UNE	Una Norma Española
VGO	Destilado pesado de vacío

- **Abreviaturas composición Jet A1**

PT	Parafínicos Totales
CT	Nafténicos totales
AT	Aromáticos Totales
NT	Naftalenos Totales
IT	Indanos y Tetralinas totales
P1	Heptane
P2	Heptane, 3-methyl-
P3	Octane
P4	Heptane, 2,6-dimethyl-
P5	Heptane, 2,3-dimethyl-
P6	Octane, 2-methyl-
P7	Octane, 3-methyl-
P8	Nonane
P9	Octane, 3,6-dimethyl-
P10	Nonane, 2-methyl-
P11	Decane
P12	Decane, 2-methyl-
P13	Decane, 3-methyl-
P14	Undecane
P15	Undecane, 2-methyl-
P16	Undecane, 3-methyl-
P17	Dodecane
P18	Tridecane
P19	Tetradecane
P20	Pentadecane
C1	Cyclohexane, methyl-
C2	Cyclohexane, ethyl-
C3	Cyclohexane, propyl-
C4	Cyclohexane, butyl-
C5	Cyclohexane, pentyl-
C6	Cyclohexane, hexyl-
C7	Cyclohexane, octyl-
C8	Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-
C9	Cyclohexane, 1,3,5-trimethyl-
C10	1-Ethyl-4-methylcyclohexane
A1	Benzene, 1,2,4-trimethyl-
A2	Benzene, 1,2,3-trimethyl
A3	Benzene, 1-ethyl-2-methyl,1

A4	Benzene, 1-methyl-3-propyl-
A5	Toluene
A6	o-Xylene
A7	p-Xylene
N1	Naphthalene, decahydro-, trans-
N2	Naphthalene, decahydro-2-methyl-
N3	Naphthalene, 2-methyl-
N4	Naphthalene, 1-methyl

- **Abreviaturas composición Jet A1 proceso de mezclado Agua-Jet A1**

Parafínico 1	Heptane
Parafínico 2	Heptane, 2-methyl-
Parafínico 3	Hexane, 2,5-dimethyl-
Parafínico 4	Octane
Parafínico 5	Isooctane
Parafínico 6	Hexane, 2,3,4-trimethyl-
Parafínico 7	Heptane, 2,6-dimethyl-
Parafínico 8	Heptane, 2,3-dimethyl-
Parafínico 9	Octane, 2-Methyl-
Parafínico 10	Nonane
Parafínico 11	Octane, 3,6-dimethyl-
Parafínico 12	Heptane, 3-ethyl-2-methyl-
Parafínico 13	Nonane, 2-methyl-
Parafínico 14	Nonane, 3-methyl-
Parafínico 15	Decane
Parafínico 16	Nonane, 2,6-dimethyl-
Parafínico 17	Nonane, 3,7-dimethyl-
Parafínico 18	Decane, 5-methyl-
Parafínico 19	Decane, 4-methyl-
Parafínico 20	Decane, 2-methyl-
Parafínico 21	Decane, 3-methyl-
Parafínico 22	Undecane
Parafínico 23	Decane, 2,6-methyl-
Parafínico 24	Undecane, 7-methyl-
Parafínico 25	Decane, 3,7-dimethyl-
Parafínico 26	Undecane, 6-methyl-
Parafínico 27	Undecane, 5-methyl-
Parafínico 28	Undecane, 4-methyl-
Parafínico 29	Undecane, 2-methyl-
Parafínico 30	Undecane, 3-methyl-
Parafínico 31	Undecane, 4,8-dimethyl-

Parafínico 32	Dodecane
Parafínico 33	Undecane, 2,4-dimethyl-
Parafínico 34	Undecane, 2,6-dimethyl-
Parafínico 35	Undecane, 4,7-dimethyl-
Parafínico 36	Dodecane, 6-methyl-
Parafínico 37	Dodecane, 5-methyl-
Parafínico 38	Dodecane, 4-methyl-
Parafínico 39	Dodecane, 2-methyl-
Parafínico 40	Dodecane, 3-methyl-
Parafínico 41	Tridecane, 7-methyl-
Parafínico 42	Tridecane
Parafínico 43	Tridecane, 6-methyl-
Parafínico 44	Tridecane, 8-methyl-
Parafínico 45	Tridecane, 5-methyl-
Parafínico 46	Tridecane, 4-methyl-
Parafínico 47	Tridecane, 2-methyl-
Parafínico 48	Undecane, 2,9-dimethyl-
Parafínico 49	Dodecane, 2,6,11-trimethyl-
Parafínico 50	Tetradecane
Parafínico 51	Tridecane, 4,8-dimethyl-
Parafínico 52	Pentadecane, 7-methyl-
Parafínico 53	Pentadecane
Parafínico 54	Hexadecane
Parafínico 55	Heptadecane
Parafínico 56	Octadecane
Nafténico 1	Cyclopentane methyl-
Nafténico 2	Cyclohexane, methyl-
Nafténico 3	Cyclohexane, trans-1,4-dimethyl-
Nafténico 4	Cyclohexane, ethyl-
Nafténico 5	Cyclohexane, 1,1,4-Trimethyl-
Nafténico 6	Cyclohexane, 1,2,4-Trimethyl-
Nafténico 7	Cyclohexane, 1-ethyl-3-methyl
Nafténico 8	Cyclohexane, 1-ethyl-4-methyl
Nafténico 9	Bicyclo[4.2.0]octane, 7-Methyl
Nafténico 10	Cyclohexane,propyl
Nafténico 11	Cyclohexane, 1,1,2,3-tetramethyl-
Nafténico 12	Cyclohexane, butyl-
Nafténico 13	Cyclohexane, 1-ethyl-2-methyl-
Nafténico 14	Cyclohexane, pentyl-
Nafténico 15	Cyclohexane, hexyl-
Nafténico 16	Cyclooctane, methyl-
Nafténico 17	Cyclopentane, (3-methylbutylidene)-
Nafténico 18	Cyclohexane, 1,1,4,4-tetramethyl-

Nafténico 19	Cyclohexane, (2-ethyl-1-methyl-1-butenyl)-
Nafténico 20	Cyclopentene Methyl ethyl
Nafténico 21	Cyclohexane, Heptyl-
Aromático 1	Benzene
Aromático 2	Toluene
Aromático 3	p-xylene
Aromático 4	o-Xylene
Aromático 5	Benzene, isopropyl
Aromático 6	Benzene, propyl-
Aromático 7	Benzene, 1-methyl-3-ethyl-
Aromático 8	Benzene, buthyl-
Aromático 9	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-
Aromático 10	Benzene, 1-methyl-ethyl-
Aromático 11	Benzene, 1,2,3-trimethyl-
Aromático 12	Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-
Aromático 13	Benzene, 1-methyl-3-propyl-
Aromático 14	Benzene 1-methyl-4-propyl-
Aromático 15	Benzene 1,3-dimethyl-5-ethyl-
Aromático 16	Benzene 1-methyl-2-propyl-
Aromático 17	Benzene, methyl-isopropyl-
Aromático 18	Benzene, 1,2-dimethyl-4-ethyl-
Aromático 19	Benzene, (1,1-dimethylisopropyl)-
Aromático 20	Benzene, 1,2-dimethyl-3-ethyl-
Aromático 21	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-
Aromático 22	Benzene, 1-methyl-propyl-
Aromático 23	Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-
Aromático 24	Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-
Aromático 25	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-
Aromático 26	Benzene, (1,2,2-trimethylpropyl)-
Aromático 27	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-
Aromático 28	Benzene, (1,1-dimethylpropyl)-
Aromático 29	Benzene, 1,4-diethyl-2-methyl-
Aromático 30	Benzene, 1-methyl 4-(1-methylisopropyl)
Aromático 31	Benzene, (3-methyl-2-butenyl)-
Naftaleno 1	Naphthalene, decahydro-
Naftaleno 2	Naphthalene, decahydro-2-methyl-
Naftaleno 3	Naphthalene
Naftaleno 4	Naphthalene, decahydro-1-methyl-
Naftaleno 5	Naphthalene, 2-methyl-
Naftaleno 6	Naphthalene, 1-methyl-
Naftaleno 7	Naphthalene, 1,3-dimethyl-
Naftaleno 8	Naphthalene, 1,2-dimethyl
Naftaleno 9	Naphthalene, 2,3-dimethyl-

Naftaleno 10	Naphthalene - 2,6-dimethyl
Naftaleno 11	Naphthalene-1,6,7-trimethyl
Indano 1	1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-
Indano 2	1H-Indene,2,3-dihydro-2,2-dimethyl-
Indano 3	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,5,7-trimethyl-

RESUMEN

Uno de los combustibles de aviación más usados a nivel mundial es el Jet – A1, el cual es un destilado medio proveniente de los procesos de refino del petróleo crudo, con características especiales de calidad y tratado químicamente para eliminar compuestos indeseables. Las propiedades fisicoquímicas del Jet-A1 dependen fundamentalmente de su composición química, la cual puede variar de muestra a muestra como resultado de la diversidad de la dieta de crudos que procese la refinería. Por tanto, se hace importante estudiar la relación que existe entre composición y propiedades y el desarrollo e implementación de nuevas alternativas y métodos de control de calidad rápidos y con alto nivel de confiabilidad.

En este trabajo se realiza una evaluación teórica y experimental del efecto de la composición química y del contenido de agua en las propiedades fisicoquímicas básicas del combustible Jet A1. Inicialmente se desarrolla una metodología basada en cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) para determinar la composición de un conjunto representativo de muestras de Jet A1. La aplicación de dicha metodología permite cuantificar el contenido en porcentaje másico de cinco (5) familias principales de hidrocarburos: parafínicos, cicloparafínicos (nafténicos), aromáticos, derivados del naftaleno y derivados de la tetralina y del indano. Posteriormente, se analiza el efecto de las variaciones en la composición química sobre un conjunto de propiedades fisicoquímicas representativas del combustible (calor de combustión, destilación, gravedad específica, punto de congelamiento, punto de inflamación, viscosidad y temperatura de inicio de cristalización). Mediante análisis estadístico se identifican los componentes puros de cada familia de hidrocarburos con mayor efecto significativo sobre cada propiedad fisicoquímica. Para evaluar el efecto generado por el mezclado del combustible con agua se recurre a un diseño de experimentos y a un análisis estadístico univariado y multivariado. Los resultados indican que a concentraciones de agua superiores a 3000 ppm se presentan cambios significativos en propiedades fisicoquímicas como destilación, punto de congelamiento, punto de inflamación, viscosidad cinemática y temperatura de inicio de cristalización. Finalmente, se analizan modelos teóricos propiedad-composición para predecir las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1. Los resultados obtenidos mostraron ajustes satisfactorios para cada propiedad, indicando que este tipo de modelos se pueden considerar como una herramienta valiosa para la predicción rápida de las especificaciones de calidad del combustible Jet-A1.

ABSTRACT

The Jet-A1 is one of the most widely used aviation fuels worldwide. This is a medium distillate from crude oil refining processes, with special quality characteristics and chemically treated to remove undesirable compounds. The physicochemical properties of this fuel mainly depend on its composition, which may vary from sample to sample as a result of the diversity of the crude diet processed by the refinery. Therefore, it is important to study the relationship between composition and properties in order to develop and implement new alternatives and rapid quality control methods with a high level of reliability.

The aim of this work is to perform a theoretical and experimental evaluation of the effect of chemical composition and water content on the physiochemical properties of the Jet A1 fuel. Initially, a methodology based on gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) is developed for quantifying the composition of a representative set of fuel samples. Application of this methodology allows determining the content in mass percent of five hydrocarbon families: paraffinic, naphthenic, aromatic or benzenic compounds, naphthalene, tetralin and indane derived compounds. Then, the effect of composition variation on a set of fuel properties (heat value, distillation curve, specific gravity, freezing point, flash point, viscosity, and onset crystallization temperature) is analyzed. The pure components of each hydrocarbon family with the greatest significative effect on each fuel property were identify by means of statistical analysis. The effect of the fuel/water mixing process was evaluated by an experimental design and univariate and multivariate statistical analysis. Results indicate that significative changes in the physicochemical properties such as distillation, freezing point, flash point, kinematic viscosity and crystallization onset temperature appear at water concentrations above 3000 ppm. Finally, property-composition models to predict the physicochemical properties of the Jet A1 fuel were derived from a theoretical study. Results show satisfactory adjustments for each property and so can be considered as a valuable tool for the rapid prediction of the quality specifications of this type of fuel.

TÍTULO

Evaluación teórica/experimental de las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet-A1 y el efecto generado en dichas propiedades por la presencia de agua

TITLE

Theoretical / experimental evaluation of the physicochemical properties of Jet-A1 fuel and the generating effect on these properties due to the presence of water

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar modelos propiedad–composición para determinar propiedades fisicoquímicas del combustible Jet-A1 y evaluar el efecto generado por la presencia de agua.

Las propiedades fisicoquímicas objeto de estudio son:

- Composición química.
- Propiedades de volatilidad: destilación, densidad y punto de inflamación o límite inferior de inflamabilidad.
- Propiedades de fluidez: viscosidad a -20ºC, punto de congelamiento y temperatura de inicio de cristalización.
- Propiedades de combustión: poder calorífico o calor de combustión.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Evaluar las principales propiedades fisicoquímicas de un conjunto representativo de muestras de combustible Jet-A1 refinado en Colombia, recolectadas en fechas y lugares diferentes para garantizar diferencias en composición y en el valor de dichas propiedades.
- Evaluar la composición química del combustible Jet A1 mediante el desarrollo, estandarización e implementación de una metodología basada en la técnica de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (CG-MS).
- Evaluar el efecto generado por la presencia de agua en las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet-A1.
- Evaluar modelos termodinámicos para predecir el efecto de la composición en las propiedades fisicoquímicas del Jet-A1.
- Validar los modelos utilizando la base de datos experimental de las muestras analizadas y verificar su aplicación en un programa de comparación de pruebas interlaboratorios de la ASTM.

1. INTRODUCCIÓN

El transporte aéreo es uno de los sectores más importantes de la economía colombiana, debido a la difícil geografía nacional y al bajo desarrollo de la infraestructura vial, fluvial y férrea, lo cual dificulta o hace imposible el acceso a las regiones más apartadas del país. Teniendo en cuenta lo anterior, el estado colombiano considera al transporte aéreo como un servicio público esencial y exige de los representantes de esta industria un cumplimiento estricto de normas de calidad del combustible utilizado para garantizar la seguridad de la operación.

El desempeño de un combustible depende primordialmente de las propiedades fisicoquímicas que determinan su calidad. A su vez, las propiedades fisicoquímicas del combustible son función directa de su composición química. Los avances en los sistemas de aviación requieren cada día el mejoramiento de la calidad de los combustibles utilizados, con requerimientos más exigentes en sus propiedades fisicoquímicas tales como la destilación, estabilidad térmica, punto de inflamación, presencia de contaminantes, etc.

Uno de los combustibles de aviación más usados es el Jet – A1, el cual es un destilado medio proveniente de los procesos de refino del petróleo crudo, con características especiales de calidad y tratado químicamente para eliminar compuestos indeseables. La composición química y por lo tanto las propiedades del Jet-A1 puede variar de muestra a muestra como resultado de la diversidad de la dieta de crudos que procese la refinería. Por tanto, se hace importante estudiar la relación que existe entre composición y propiedades y el desarrollo e implementación de nuevas alternativas y métodos de control de calidad rápidos y con alto nivel de confiabilidad. El agua puede estar presente en el combustible Jet A1 en tres formas: disuelta, como una fase liquida separada (agua libre) o como una emulsión agua – combustible. Normalmente el agua disuelta no es un problema, sin embargo, el agua libre o en estado de emulsión es un riesgo potencial y debe ser evitado

La necesidad de conocer la composición química detallada de los combustibles de aviación se ha vuelto fundamental durante la última década. Este requerimiento se deriva de dos aspectos principales: la búsqueda de combustibles alternativos que permitan una transición hacia fuentes de energía más limpias y el deseo de diseñar y operar motores de alto rendimiento utilizando el conocimiento de la composición del combustible como criterio de control. Esto ha ocasionado el desarrollo de nuevas

técnicas analíticas para análisis del petróleo y más específicamente análisis de combustibles de aviación (Gehron and Yost, 2008).

Con relación a la reglamentación técnica, el Jet A-1 debe cumplir con estándares internacionales como el DEF STAN 91-091, ASTM D1655, CGSB-3.23, los cuales regulan el control de calidad y evaluación de conformidad de combustibles para motores tipo turbina. A nivel nacional, las especificaciones de calidad que debe cumplir este combustible se rigen bajo la norma técnica colombiana NTC 1899.

En la normativa es fundamental la selección de propiedades fisicoquímicas, lo cual genera expectativas tanto a nivel industrial como analítico. Una de las principales razones es el factor económico, ya que se normalmente se exige un número elevado de análisis de laboratorio, pero se espera que la información se pueda obtener de forma rápida, económica y confiable.

Los valores de algunas propiedades de mezclas multicomponentes se pueden obtener a partir de los valores individuales de los componentes puros. Cuando dos o más líquidos se mezclan para formar una disolución liquida, la teoría de disoluciones trata de expresar las propiedades de la mezcla liquida en función de las fuerzas intermoleculares y de la estructura fundamental del líquido. Para minimizar la información requerida en la descripción de la disolución, es deseable expresar las propiedades de esta, en función de magnitudes que puedan ser calculadas completamente a partir de las propiedades de los componentes puros. Los conocimientos teóricos actuales no han alcanzado todavía el desarrollo necesario para hacer esto con carácter general, aunque se han obtenido algunos resultados de utilidad limitada. La mayor parte de los trabajos actuales en teoría de disoluciones utilizan métodos de la mecánica estadística que relacionan las propiedades macroscópicas con los fenómenos microscópicos (moleculares).

En este trabajo se realiza una evaluación teórica y experimental del efecto de la composición química y del contenido de agua en las propiedades fisicoquímicas básicas del combustible Jet A1. El objetivo es obtener modelos propiedad-composición para determinar las propiedades fisicoquímicas del combustible y el efecto causado por el contacto con agua en las mismas. Con el desarrollo de esta nueva herramienta, el campo industrial y analítico puede obtener un set básico de propiedades para el control de calidad de este combustible de forma rápida, económica y confiable y verificar el efecto de la composición en cada una de las propiedades fisicoquímicas estudiadas.

2. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE

Los combustibles de aviación se pueden agrupar en dos categorías amplias: gasolinas de aviación para motores de combustión interna de cuatro tiempos (AVGAS) y combustibles de turbinas de aviación (*Jet-fuels*). A partir de los años treinta del siglo pasado, los motores de turbina o de reacción se han impuesto en la aviación civil y militar por poseer características muy superiores a los motores de combustión interna alternativos: mayor potencia, mayor seguridad y permitir volar más rápido y más alto.

Los combustibles tipo Jet se pueden obtener a partir de cortes de destilación en el rango de las naftas y fundamentalmente del queroseno. En la aviación militar se utiliza el combustible Jet B, el cual se obtiene como una mezcla de nafta (65%) y queroseno (35%). Este tipo de combustible, denominado de corte amplio (distribución de átomos de carbono entre 5 y 15), también se utiliza para aviación comercial en países con climas muy fríos como Canadá y Alaska. De otro lado, los combustibles que predominan en la aviación comercial son tipo queroseno (distribución de átomos de carbono entre 8 y 16) y se denominan Jet A y Jet A1. El Jet A se ha utilizado en los Estados Unidos desde la década de los 1950s, mientras que el Jet A-1, con muy pocas excepciones, se utiliza en el resto del mundo (Hemighaus et al., 2006).

Los combustibles de aviación tipo Jet, dada la finalidad de su uso, deben preservar sus propiedades fisicoquímicas, no solo durante el almacenamiento y manejo en tierra, sino fundamentalmente, bajo las exigentes condiciones de vuelo.

En esta sección se desarrollan tres temáticas principales. Inicialmente, a manera de contexto se presentan aspectos básicos de la obtención, naturaleza química y caracterización del combustible Jet A-1. Posteriormente, se presenta un estado del arte de los principales trabajos reportados en la literatura orientados a la obtención de modelos propiedad/composición para este tipo de combustibles. Finalmente, se exponen los modelos teóricos seleccionados para predecir el valor de varias propiedades del Jet A-1 en función de composición.

2.1. OBTENCIÓN, NATURALEZA QUÍMICA Y CARACTERIZACIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1

2.1.1 Obtención del Combustible Jet A1

La refinería de hoy en día es una serie compleja de procesos interdependientes resultado de una serie de avances en química, ingeniería y metalurgia, Estos procesos se pueden dividir en tres categorías básicas: separación, mejoramiento y conversión.

- **Procesos de separación**

El objetivo de estos procesos es la separación de componentes o fracciones de una mezcla en función de alguna propiedad física. El proceso de separación más común en la refinería es la destilación, el cual se basa en diferencias en el punto de ebullición entre los componentes de la mezcla. En una unidad de destilación de petróleo, el crudo caliente parcialmente vaporizado entra por la parte inferior de la columna o torre, de tal modo que los vapores de los hidrocarburos más ligeros como propano y butano ascienden hasta el tope y pasan por un condensador lateral, donde los vapores se extraen como gases saturados y la corriente líquida vuelve a la torre como reflujo. Al interior de la columna de destilación se tienen vapores ascendiendo y líquidos descendiendo, los cuales alcanzan el equilibrio a diferentes posiciones a lo largo de la torre. En una columna de destilación típica se producen diferentes fracciones o cortes, caracterizada cada una de ellas por un intervalo de ebullición definido. De esta manera se obtienen los denominados cortes de destilación directa denominados: nafta, queroseno, gasóleos, entre otros. Finalmente, el material que es demasiado pesado para vaporizar a presión atmosférica queda como un remanente en el fondo de la columna. A estos residuos se les conoce como fondos o residuos de destilación, los cuales eventualmente se pueden fraccionar mediante una segunda destilación bajo presión reducida (destilación al vacío) para obtener productos denominados gasóleos de vacío y bases lubricantes.

- **Procesos de mejoramiento**

Estos procesos mejoran la calidad de un material mediante reacciones químicas y la remoción de compuestos indeseables, generalmente contaminantes. Los procesos más comunes a los que se somete el combustible Jet-A1 son endulzamiento, hidrotratamiento y tratamiento con arcillas.

Los procesos de endulzamiento eliminan compuestos que contienen azufre como los mercaptanos, los cuales son indeseables por su corrosividad y olor

desagradable. Un proceso representativo de este tipo de tecnologías es el Merox®, el cual transforma los mercaptanos en disulfuros por oxidación utilizando un catalizador a base de cobalto.

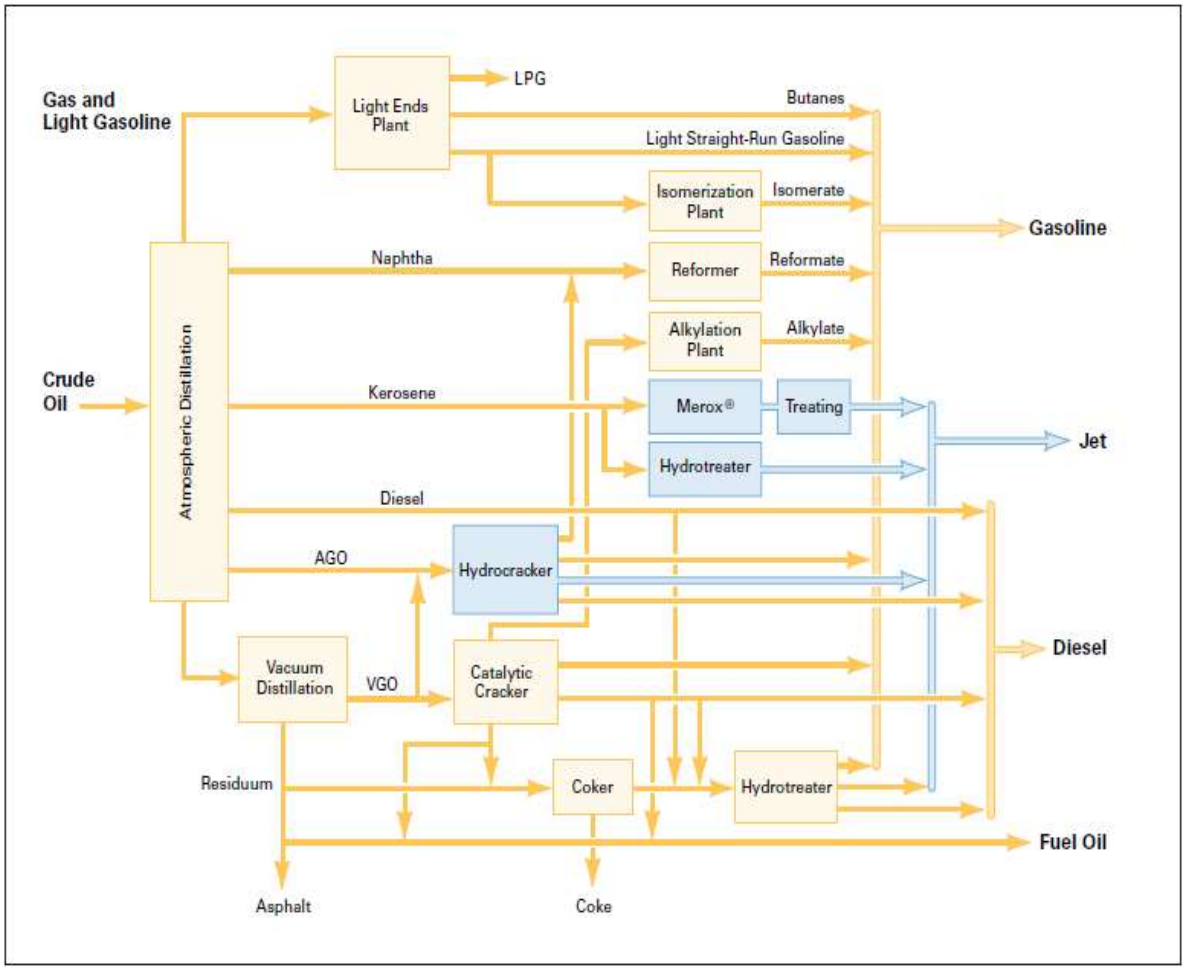
Los procesos de hidrotratamiento son una serie de tecnologías que utilizan hidrógeno y un catalizador apropiado para eliminar componentes no deseados de las corrientes de refinería. Los procesos van desde condiciones suaves que eliminan componentes reactivos como olefinas y algunos compuestos de azufre y nitrógeno, hasta las condiciones más severas que saturan los anillos aromáticos y que eliminan casi todos los compuestos de azufre y nitrógeno.

Por medio del tratamiento con arcillas se pueden remover ciertos componentes polares del combustible de aviación, especialmente aquellos que actúan como surfactantes. Este tipo de compuestos se remueven del combustible por adsorción sobre la superficie de la arcilla.

- **Procesos de conversión**

El objetivo de estos procesos es cambiar la estructura molecular de la materia prima, generalmente mediante la ruptura de las moléculas de mayor tamaño. Actualmente, las tecnologías más utilizadas son el cracking o craqueo catalítico fluidificado y el hidrocracking. La carga común para este tipo de procesos son los residuos de la destilación al vacío y su objetivo principal es incrementar el rendimiento en gasolina, queroseno y diésel a partir de una dieta de crudos dada.

En la figura 1 se puede apreciar un esquema de una refinería moderna, en el que se resaltan los procesos enfocados a la producción del combustible de aviación (ver las líneas azules). La fuente principal del combustible Jet es la fracción queroseno de destilación directa, la cual se somete a los procesos de mejoramiento requeridos. El rendimiento de combustible Jet se puede incrementar mediante el craqueo con hidrógeno de la corriente de la columna de destilación atmosférica denominada AGO (*atmospheric gas oil*) y la corriente de la columna de destilación al vacío denominada VGO (*vacuum gas oil*).



Fuente: Hemighaus et al., 2006, p. 35

Figura 1. Esquema de una refinería moderna

2.1.2. Naturaleza química del combustible Jet A1

El combustible de aviación tipo Jet es una mezcla de hidrocarburos de las tres series más estables presentes en el petróleo crudo (parafínicos, nafténicos y aromáticos) con un rango de átomos de carbono por molécula entre 8 y 16 (Hemighaus et al. (2006). Adicionalmente, puede contener hidrocarburos aromáticos de mayor complejidad como el naftaleno y sus derivados, y los indanos, indenos y tetralinas.

Como ocurre con los diferente cortes o fracciones del petróleo, las técnicas analíticas existentes no tienen la capacidad de separar uno a uno los componentes presentes, dada la existencia de numerosos isómeros que poseen puntos de ebullición muy cercanos.

A continuación, se hace una breve descripción de los hidrocarburos comúnmente encontrados en el combustible Jet-A1.

- **Hidrocarburos alcanos o parafínicos**

Los alcanos son hidrocarburos alifáticos (no poseen anillos bencénicos), saturados (solo poseen enlaces covalentes simples del tipo **C-C** y **C-H**) y sus cadenas pueden ser normales (sin grupos sustituyentes o ramificaciones) o ramificadas. La fórmula general de este tipo de hidrocarburos es C_nH_{2n+2}. Por ejemplo, el alcano normal que posee 5 átomos de carbono se denomina pentano y tendrá en su estructura 12 átomos de hidrógeno (C_5H_{12}). Por ser saturados, los alcanos son poco reactivos (parafina significa poca afinidad) y tienden a ser sólidos a temperatura ambiente a partir de un número de átomos de carbono por molécula mayor a 16. Debido al alto poder combinatorio del átomo de carbono asociado a su tetravalencia, el número de isómeros ramificados crece dramáticamente a medida que se incrementa el número de átomos de carbono por molécula a partir del butano.

Hidrocarburos nafténicos o cicloalcanos

Los nafténicos o alcanos cíclicos son hidrocarburo saturados, cuyo esqueleto está formado por átomos de carbono unidos entre sí mediante enlaces covalentes simples en forma de anillo. Los compuestos nafténicos son también llamados cicloparafinas o bencenos hidrogenados. Su fórmula genérica es C_nH_{2n}. Por fórmula son isómeros de los alquenos. También existen hidrocarburos cicloparafinicos formadas por varios anillos, denominados compuestos nafténicos policíclicos. Los productos ricos en este tipo de hidrocarburos se caracterizan por su bajo punto de fluidez, pero a temperaturas altas son menos estables que los compuestos parafínicos

Hidrocarburos aromáticos

Los hidrocarburos llamados aromáticos forman una familia de compuestos que tienen un núcleo común, el núcleo del benceno. Por su estructura cíclica insaturada también se les llama árenos. Su nombre deriva del siglo XIX, cuando se descubrieron varios compuestos que tenían aromas intensos (bálsamos, esencias, resinas...) y todos tenían el núcleo bencénico. Así pues, los compuestos aromáticos son derivados sustituidos del benceno o formados por la unión de varios núcleos bencénicos. El exponente emblemático de la familia de los hidrocarburos aromáticos es el benceno (C_6H_6). Todos los derivados del benceno, siempre que se mantenga intacto el anillo, se consideran aromáticos. La aromaticidad puede incluso extenderse a sistemas policíclicos, como el naftaleno, antraceno, fenantreno y otros más complejos.

Otros compuestos hidrocarburos

Otro tipo de compuestos hidrocarburos que pueden estar presentes en el combustible Jet son naftalenos, indanos, indenos y tetralinas.

Los compuestos denominados indanos e indenos son derivados funcionales de los compuestos indano (C_9H_{10}) e indeno (C_9H_8). Están conformados por un anillo de seis miembros y otro de cinco fusionados entre sí. En ambos compuestos, el anillo de seis miembros es un anillo de tipo benceno (aromático); sin embargo, el indeno también tiene insaturación adicional en su anillo de cinco miembros (un doble enlace). Los indanos se producen naturalmente en el petróleo crudo, y los derivados metilindanos y dimetilindanos se pueden encentrar en varios productos del petróleo. Por su parte, la tetralina es un hidrocarburo líquido incoloro que se utiliza como disolvente donador de hidrógeno y que tiene la fórmula química $C_{10}H_{12}$. Es un derivado parcialmente hidrogenado de naftaleno.

El naftaleno es un hidrocarburo aromático compuesto por dos anillos de benceno que comparten dos átomos adyacentes (anillos condensados), su fórmula química es $C_{10}H_8$. Es una importante materia prima en la fabricación de colorantes y resinas sintéticas. El naftaleno se encuentra en el petróleo crudo y además se puede formar en procesos de refino como el craqueo a alta temperatura. Es altamente volátil y tiene un olor característico.

El petróleo contiene trazas de compuestos orgánicos no hidrocarburos, principalmente compuestos que contienen oxígeno, nitrógeno, azufre y también pequeñas cantidades de compuestos organometálicos y sales inorgánicas que son trasmitidas a sus productos derivados como el combustible Jet. Los principales compuestos que se han identificado son los azufrados, incluyendo sulfuros, mercaptanos y tiofenos. En el combustible Jet, estos compuestos están presentes en pequeñas cantidades y juegan un papel importante en ciertas propiedades como la estabilidad.

2.1.3. Caracterización del combustible Jet A1

La función principal del combustible de aviación tipo Jet es suministrar potencia para mover la aeronave, siendo parámetros claves su contenido energético y calidad de combustión. Según Hemighaus et al. (2006), en el desempeño de dicho combustible se deben tener en cuenta los siguientes aspectos:

- La vida útil del sistema de filtración es gravemente afectada por la presencia de impurezas en forma de sedimentos o gomas. Por lo tanto, el combustible debe estar libre de agua, polvo y cualquier otro tipo de contaminantes sólidos o líquidos (o de tipo bacteriano).

- El combustible debe estar libre de agua y otras sustancias como ceras y surfactantes, ya que estas sustancias ocasionan problemas en las características de bombeo en el reactor a bajas temperaturas en viajes a grandes alturas. No debe existir la posibilidad de que este tipo de sustancias se solidifiquen ocasionando obstrucción en filtros, boquillas, tuberías, etc.
- Las características de volatilidad y combustión del combustible deben ser estrictamente controladas ya que la vida media de la cámara de combustión es afectada por la luminosidad de la llama en el momento de la combustión, lo cual produce elevadas temperaturas en las turbinas.
- Es de suma importancia controlar los valores de estabilidad térmica del combustible, tomando en cuenta que los vuelos con altas velocidades incrementan el calor por razón del calentamiento cinético de la estructura de la nave y también debido al uso del combustible como enfriador del aceite del motor.

De acuerdo con Hemighaus et al. (2006), en la caracterización de los combustibles de aviación tipo Jet se pueden diferenciar 5 familias de propiedades fisicoquímicas:

- Propiedades de composición
- Propiedades de volatilidad
- Propiedades de fluidez
- Propiedades de combustión
- Otras propiedades como corrosión, estabilidad térmica, contaminantes y aditivos

2.1.3.1. Propiedades de composición

En el combustible de aviación se debe controlar el contenido de aromáticos, azufre y la acidez total.

Contenido de aromáticos: La cantidad de aromáticos tiene que ser limitada ya que estos hidrocarburos tienen dificultad para realizar combustión total y generan humo y depósitos de carbono, principalmente por su acción disolvente sobre los elastómeros.

Presencia de azufre: El contenido de azufre no debe exceder los límites especificados en la normatividad legal (máximo 0.3% masa de azufre total), ya que este compuesto afecta las cámaras de combustión por su alta corrosividad. Además, varios compuestos de azufre (mercaptanos, tioles, carbonilos tienen un efecto adverso sobre ciertos elastómeros de la nave.

Acidez total: La capacidad del combustible para separar el agua se afectada por la presencia de compuestos ácidos como los fenoles y los ácidos nafténicos, con los cuales el combustible puede formar fácilmente emulsiones coloidales, ocasionando problemas en los filtros y deteriorando la calidad el producto.

2.1.3.2. Propiedades de volatilidad

La atomización, la facilidad de encendido, la estabilidad de la llama y la eficiencia de la combustión, dependen principalmente de la volatilidad del combustible. Las dos propiedades físicas usadas para caracterizar la volatilidad del combustible Jet son la presión de vapor y el perfil de destilación. Un combustible más volátil que otro, presenta una presión de vapor más alta y temperaturas iniciales de destilación más bajas. La volatilidad es importante debido a que el combustible debe ser vaporizado antes de ser quemado, sin embargo, una volatilidad alta puede resultar en pérdidas por evaporación.

La volatilidad es una de las principales diferencias entre los combustibles Jet tipo queroseno y los de corte amplio. El combustible Jet es relativamente no volátil y tiene una presión de vapor Reid alrededor de 1 kilopascal (kPa), mientras que el combustible de corte amplio tiene una presión de vapor Reid alrededor de 21 kPa.

2.1.3.3. Propiedades de fluidez

La fluidez es un término general que se refiere a la capacidad de una sustancia para fluir, sin embargo, esta no es una propiedad física definida, por eso es importante tener en cuenta otras propiedades físicas que, sí lo son, como lo es el caso del punto de congelamiento y la viscosidad. El combustible Jet es expuesto a bajas temperaturas, especialmente en rutas polares en invierno y en lugares sometidos a climas fríos extremos. El combustible debe tener la capacidad de fluir a bajas temperaturas de lo contrario el flujo de combustible hacia el motor se puede ver afectado.

Punto de congelamiento: es una propiedad termo física fundamental en el estudio de la transición de fase líquida a sólida; se define como la temperatura más baja a la cual el líquido se solidifica. Esta propiedad adquiere especial importancia en el estudio y preparación de combustibles para aviación. Durante un vuelo la temperatura del combustible en el tanque puede descender debido a diferentes factores como la velocidad, la altitud o la duración del vuelo; si este descenso supera el punto de congelamiento del combustible, se pueden generar cristales sólidos que restrinjan el paso de combustible hacia los filtros de la aeronave, lo que podría ocasionar un accidente.

Viscosidad: la viscosidad es una medida de la resistencia del líquido a fluir bajo cambios de presión, temperatura o fuentes mecánicas. La viscosidad del combustible afecta la caída de presión en las líneas del sistema de combustible. Viscosidades altas generan caídas de presión altas ocasionado que la bomba de combustible trabaje más duro para mantener una tasa de flujo constante, mientras que viscosidades bajas perturban el desempeño de la unidad del sistema de control del combustible.

2.1.3.4. Propiedades de combustión

La principal diferencia entre un motor de pistón y una turbina es la forma intermitente en que trabaja el motor de pistón y la forma continua en que trabaja la turbina. Como resultado de esto, el motor tiene diferentes requerimientos de calidad de combustión del combustible. Por ejemplo, en un motor de pistón, la sincronización de la combustión es crítica para un buen desempeño, pero cuando la combustión es continua, no es tan importante. En el quemador de una turbina se pueden formar partículas carbonáceas pequeñas al inicio de la combustión. Si estas partículas carbonáceas no son consumidas completamente por la llama pueden causar erosión en los alabes y los estatores de la turbina. Los combustibles con alto contenido de aromáticos y especialmente aquellos con alto contenido de naftalenos tienden a formar más partículas carbonáceas. Por consiguiente, el contenido de aromáticos y el contenido de naftalenos del combustible Jet son controlados.

La potencia generada por un motor de combustión interna o externa se debe a la liberación de la energía química almacenada en el combustible y su transformación en energía mecánica y calor. El contenido energético de un combustible o calor de combustión se define como la cantidad de calor liberada por la combustión completa de una unidad de masa o volumen bajo unas condiciones específicas.

Durante la reacción de combustión se genera agua que puede estar en estado de vapor o condensada como un líquido. Si el agua se condensa genera un calor de vaporización en el proceso y entonces la energía liberada se llama contenido energético bruto de lo contrario el agua permanece en forma de vapor produciendo una energía liberada más baja denominada contenido energético neto. Un motor libera agua como vapor siendo apropiado la medición de contenido energético neto.

2.1.3.5. Otras propiedades

Los contaminantes en cualquier combustible son indeseables puesto que genera deterioro en el sistema de combustión y además de eso pueden causar una menor eficiencia durante la combustión. El combustible de aviación se contamina cuando contiene cualquier materia que no está de acuerdo con su especificación. Estas materias son generalmente agua, óxido, arena, polvo, contaminación biológica y ciertos aditivos que no son compatibles con el combustible y con sus sistemas o que han sido agregados en cantidades desproporcionadas. La contaminación del Jet puede ser Química, Biológica o material.

Contaminación Química: Es el resultado de la mezcla de dos combustibles o del contacto de otros productos químicos con él, y que afecta sus propiedades físicas y químicas.

Contaminación Biológica: Es el resultado del desarrollo de bacterias y hongos, estos microorganismos se desarrollan en interfaces agua – combustible. El

desarrollo de estos microorganismos llega a alcanzar una consistencia que es detectable en forma visual. Estos agentes pueden ocasionar problemas en el avión al tapar los filtros, dificultando el normal funcionamiento del combustible en el motor provocando corrosión en los tanques.

Contaminación Material: La contaminación material, consiste generalmente de agua o sedimentos. El agua puede entrar al tanque durante la operación de recepción del combustible y los sedimentos aparecen en el combustible como polvo, suciedad, granos y escamas. Estos sólidos o sedimentos pueden venir de tanques de alimentación, recipientes ferrosos, filtros, separadores, válvulas, bombas, medidores, tuberías, mangueras, empaquetaduras, diafragmas y sellos. El óxido es el tipo más común de contaminación sólida. Las partículas de sedimentos pueden ser extremadamente pequeñas, las superiores a 10 micras se consideran gruesas y las inferiores de 10 micras se consideran finas.

La estabilidad en un combustible Jet es una propiedad que debe permanecer sin alterar. Los factores que pueden ocasionar cambios en la estabilidad del combustible están asociados con el almacenamiento y la exposición a temperaturas altas en el motor. El comportamiento de un combustible Jet y el tiempo que puede estar almacenado sin deteriorarse, depende de la naturaleza y la cantidad de hidrocarburos presentes, estos hidrocarburos difieren considerablemente en su tendencia a combinarse con otros elementos tales como el oxígeno del aire. Cuando los hidrocarburos, especialmente los compuestos olefinicos se combinan con el oxígeno del aire se forman compuestos llamados gomas. Para prevenir el desarrollo de estos compuestos en las turbinas se les agrega aditivos inhibidores.

Las gomas pueden encontrarse en forma soluble e insoluble en el combustible. La forma insoluble crea serios problemas en el surtidor de la bomba y válvulas, como también, en los filtros del combustible. La forma soluble puede causar problemas en el sistema de combustible, en puntos donde hay escapes microscópicos (válvulas).

Los aditivos que vayan a ser utilizados como suplemento de un combustible aprobado deben ser también aprobados en forma similar para cada caso particular. Existen diversas clases de aditivos, entre los cuales se pueden resaltar aditivos: antioxidantes, desactivadores metálicos, disipadores de corriente estática, inhibidores de corrosión, inhibidores de formación de hielo, entre otros.

En cuanto a propiedades de seguridad, el combustible Jet puede ser peligroso si no es manipulado adecuadamente ya que su ignición es muy fácil y quema rápidamente. El punto de inflamación y la conductividad eléctrica son dos propiedades que permiten determinar estas características del combustible Jet y que están relacionadas con la manipulación.

2.1.4. Normatividad legal del combustible Jet A1

El Jet A-1 debe cumplir internacionalmente con los estándares DEF STAN 91-091, ASTM D1655 y CGSB-3.23 para el control de calidad y evaluación de conformidad de combustibles para motores tipo turbina. Las especificaciones que debe manejar el tratamiento de este combustible en Colombia se rigen bajo la norma técnica colombiana NTC 1899.

ASTM D 1655: Especificación Americana normalizada para combustibles de turbina de aviación civil. Esta norma internacional incluye los requisitos de los combustibles comerciales de turbina de aviación para uso civil, Jet A, y Jet A1. Los combustibles deberán ser muestreados y probados adecuadamente para evaluar su conformidad con los requisitos detallados en cuanto a composición, volatilidad, fluidez, combustión, corrosión, estabilidad térmica, contaminantes y aditivos.

DEF STAN 91-91: Combustibles para Turbinas. Queroseno de aviación tipo Jet A1. Esta norma es para estandarizar combustibles de turbina de aviación, que la Aviación Civil del Reino Unido ha acordado que esté bajo la autoridad del Director de Defensa del grupo de combustibles. Especifica los requisitos de un grado de queroseno como combustible de turbina de aviación, para ser usado en motores de aviones de turbina de gas. El combustible citado en esta especificación deberá disponer de propiedades y rendimiento satisfactorio cuando se utilice en aviones apropiados, o para los que el organismo certifique.

CGSB-3.23: Este estándar usado en Canadá aplica para dos grados de combustible de aviación tipo queroseno (grado Jet A y Jet A1) de origen de hidrocarburos convencionales e hidrocarburos sintéticos.

NTC 1899: Esta Norma Técnica Colombiana establece los requisitos que debe cumplir el combustible de aviación para motores a reacción y los ensayos a los cuales se debe someter el combustible Jet A y Jet A1, para que los productores, los distribuidores y los consumidores cuenten con un soporte de la mejor calidad del combustible en Colombia. Este estándar está basado en la norma ASTM D 1655

En la tabla 1 y la tabla 2 se puede ver que las especificaciones de la norma ASTM D 1655 y DEF STAN 91-91son similares a excepción de la acidez total y el contenido de azufre en forma de mercaptano.

Tabla 1. Especificaciones para Jet A y Jet A1 norma ASTM D 1655

Propiedad		JET A o JET A-1	Método ASTM
COMPOSICION			
Acidez Total mg KOH/g	máx	0,10	D3242
1. Aromáticos vol %	máx	25	D1319
2. Aromáticos vol %	máx	26,5	D6379
Azufre, mercaptano masa %	máx	0,003	D3227
Azufre, masa total	máx	0,30	D1266, D2622, D4294, o D5453
VOLATILIDAD			
Temperatura de destilación	máx	205	D86, D2887
10% Recuperado, temperatura	máx	anotar	
50% Recuperado, temperatura		anotar	
90% Recuperado, temperatura		300	
Residuo de destilación %	máx	1,5	
Perdida destilación %	máx	1,5	
Punto de Inflamación ºC	mín	38	D56 o D3828
Densidad (15ºC), kg/m^3		775 a 840	D1298 o D4052
FLUIDEZ			
Punto de Cristalización ºC	máx	-40 jet A	D5972, D7153, D7154, o D2386
		-47 jet A-1	
Viscosidad -20ºC, mm^2/s	máx	8,00	D445
COMBUSTION			
Poder neto de combustión PCI, MJ/kg	mín	42,8	D4529, D3388, o D4809
Uno de los siguientes requisitos deberán ser cumplidos			
(1) Punto de Humo, mm, ó	mín	25	D1322
(2) Punto de Humo, mm, y	mín	18	D1323
naftalenos, vol, %	máx	3,0	D1840
CORROSION			
Tira de Cobre, 2hs a 100ºC	máx	Nº 1	D130
ESTABILIDAD TERMICA			
(2,5 hs a temperatura controlada de 260ºC min)			
Caída de presión de filtro, mm, Hg	máx	25	D3241
Depósitos en tubo menor a		3	
CONTAMINANTES			
Gomas existentes, mg/100mL	máx	7,00	D381, IP540
Microsoparmotor, ^{M}Rating			D3948
Sin aditivo de conductividad eléctrica	mín	85	
Con aditivo de conductividad eléctrica	mín	70	
ADITIVOS		ver 5.2	
Conductividad eléctrica, pS/m			D2624

Fuente: (ASTM, 2020)

Tabla 2. Especificaciones para Jet A y Jet A1 norma DEF STAN 91-91

Características	Unidades	Queroseno JET A-1	Método ASTM/IP
Aspecto		Claro y brillante	Visual
Color Saybolt		Anotar	D 156 / D 6045
Partículas	mg/l	máximo 1,0	D 5452 / IP 423
Acidez Total	mg KOH/g	máximo 0,015	D 3242 / IP 354
Aromáticos			
aromáticos	% V/V	máximo 25	D 1319 / IP 156
o			
aromáticos	% V/V	máximo 26,5	D 6379 / IP 436
Sulfuro, mercaptano masa	% m/m	máximo 0,002	D 3227 / IP 342
Sulfuro masa total	% m/m	máximo 0,3	D 2622, D 4294/ IP 336
Componentes de refinería			
componentes hidroprocesados	% V/V	anotar	
componentes hidroprocesados severamente	% V/V	anotar	
Destilación			
Punto inicial	ºC	anotar	D 86 / IP123
10% Recuperado, temperatura	ºC	máximo 205,0	
50% Recuperado, temperatura	ºC	anotar	
90% Recuperado, temperatura	ºC	anotar	
Punto final	ºC	máximo 300,0	
Residuo	% V/V	máximo 1,5	
Perdida	% V/V	máximo 1,5	
Punto de Inflamación	ºC	máximo 38	IP 170
Densidad (15ºC)	kg/m^3	775 a 840	D 4052 / IP 365
Punto de Cristalización	ºC	máximo -47,0	D 2386 / IP 16
Viscosidad -20ºC	mm^2/s	máximo 8,000	D 445 / IP 71
Punto de Humo:			D 1322 / IP 57
Punto de Humo, mm, ó	mm	máximo 25	
Punto de Humo, mm, y	mm	máximo 18	
naftalenos	% V/V	3,0	D 1840
Calor de Combustión PCI	MJ/kg	mínimo 42,8	
Corrosión al Cobre (2hs a 100ºC)	Escala Norma	mínimo 1	D130 / IP154
Estabilidad Térmica (JFTOT)			D 3241 / IP 323
temperatura de ensayo	ºC	mínimo 260	
depósitos	Escala Norma	máximo < 3	
presión diferencial	mmHg	máximo 25	
Gomas actuales	mg/100 ml	máximo 7	IP 540
Tolerancia al agua: característica interfase	Escala Norma	máximo 1b	D 1094 / IP 289
Índice de separación del agua	Escala Norma	mínimo 85	D 3948
Conductividad eléctrica	pS/m	50 a 450	D 2624 / IP 274
Lubricidad	mm	máximo 0,85	D 5001

Fuente: (Ministry of Defence, 2019)

En Colombia se sigue las especificaciones de la norma ASTM D 1655 que se encuentran de forma equivalente en la norma NTC 1899. Ver tabla 3.

Tabla 3. Especificaciones para Jet A1 norma NTC 1899

PROPIEDADES / CARACTERÍSTICAS	UNIDADES	MÉTODO	ESPECIFICACIÓN	
			Mínimo	Máximo
Acidez	mg KOH/g	D3242		0.1
Aromáticos	mL/100mL	D1319 (1)		25
Azufre total	g/100 g	D4294 (2)		0.30
Azufre mercaptano	g/100 g	D3227		0.003
Calor neto de combustión	MJ/kg	D4529 (3)	42.8	
Apariencia	N/A	Visual	Clara y brillante	
Color Saybolt	N/A	D156	Reportar	
Corrosión lamina de cobre,	Clasificación	D130		1 (4)
Densidad a 15°C	Kg/m3	D4052 (5)	775	840
Estabilidad térmica		D3241		
Caída de presión en el filtro	kPa (mm Hg)			3.3 (25)
Deposito en el tubo	N/A			<3
Destilación	°C	D86		
Punto inicial de ebullición			Reportar	
10% vol. recobrado				205
50% vol. recobrado			Reportar	
90% vol. recobrado			Reportar	
Punto final de ebullición				300
Residuo de destilación	mL/100mL			1.5
Pérdidas de destilación	mL/100mL			1.5
Goma existente	mL/100mL	D381		7
Punto de Inflamación	°C	D56	38	
Punto de congelación	°C	D2386 (6)		-47
Propiedades de combustión:				
Punto de humo	mm	D1322	18	
Naftalenos	mL/100mL	D1840		3
Viscosidad cinemática a -20°C	mm^2/s	D445		8
Índice de separación de agua, MSEP	N/A	D3948		
Sin aditivo de conductividad eléctrica			85	

(1) Métodos alternos D-6379 donde el máximo debe ser 26.5% vol.
(2) Métodos alternos: D-2622, D-5453.
(3) Métodos alternos D-3338 ó D-4809.
(4) El valor 1 se refiere a valores 1a o 1b.
(5) Método alterno D 1298.
(6) Método alterno D 5972.

Fuente: (ICONTEC, 2018)

2.1.5. Comportamiento del agua en el combustible Jet A1

A bajas temperaturas el agua contenida en el combustible se presenta en forma de gotas tamaño micra, las cuales pueden congelarse formando cristales que afectan el sistema de combustible, llegando a obstruir la inyección de éste y provocando fallas tan graves que en ocasiones han sido catalogadas como causas de catástrofes aéreas.

Existen varias causas por las cuales el combustible puede entrar en contacto con agua, algunas son:

- Agua lluvia que se puede filtrar por el techo de tanques de almacenamiento con mal mantenimiento.
- Agua remanente tras las operaciones de limpieza en tanques o vehículos de transporte debido a un mal procedimiento del personal.
- Condensación del agua de un ambiente húmedo a las paredes del tanque.
- Precipitación de agua disuelta del propio combustible a bajas temperaturas.

Según Baena-Zambrana et al. (2013), el agua puede estar presente en el combustible Jet en tres formas: disuelta, como una fase liquida separada (agua libre) y como una emulsión agua – combustible.

Agua disuelta: El agua disuelta es indistinguible a simple vista y es considerado un constituyente del combustible que se evapora durante la combustión.

Emulsiones de agua: Una emulsión es una mezcla de dos o más fluidos inmiscibles donde uno es dispersado en burbujas de diferentes tamaños dentro de la fase continua. Las emulsiones de agua en aceite se ven opacas y toman tiempo en asentarse. Esta es tratada como contaminante y se maneja a través de rigurosos procesos de control de calidad.

Agua libre: Al ser más densa que el combustible Jet, forma una capa separada en el fondo del tanque donde se encuentra almacenado el combustible. También es tratada como contaminante.

Normalmente el agua disuelta no es un problema, sin embargo, el agua libre o en estado de emulsión es un riesgo potencial y debe ser evitado. El combustible Jet contiene entre 40 ppm y 80 ppm de agua disuelta a 21°C. Si la temperatura del combustible aumenta, este puede disolver más agua y sus efectos se empiezan a notar en las propiedades de fluidez como en el punto de congelamiento y la viscosidad a -20 ºC.

2.1.5.1. Solubilidad del agua en el combustible Jet A1

La solubilidad hace referencia a la masa de soluto que se puede disolver en determinada masa de disolvente bajo ciertas condiciones de temperatura, e incluso presión (en caso de un soluto gaseoso). Si en una disolución no se puede disolver más soluto, se dice que la disolución está saturada. Bajo ciertas condiciones, la solubilidad puede sobrepasar ese máximo y pasa a denominarse solución sobresaturada. Por el contrario, si la disolución admite aún más soluto, se dice que se encuentra insaturada.

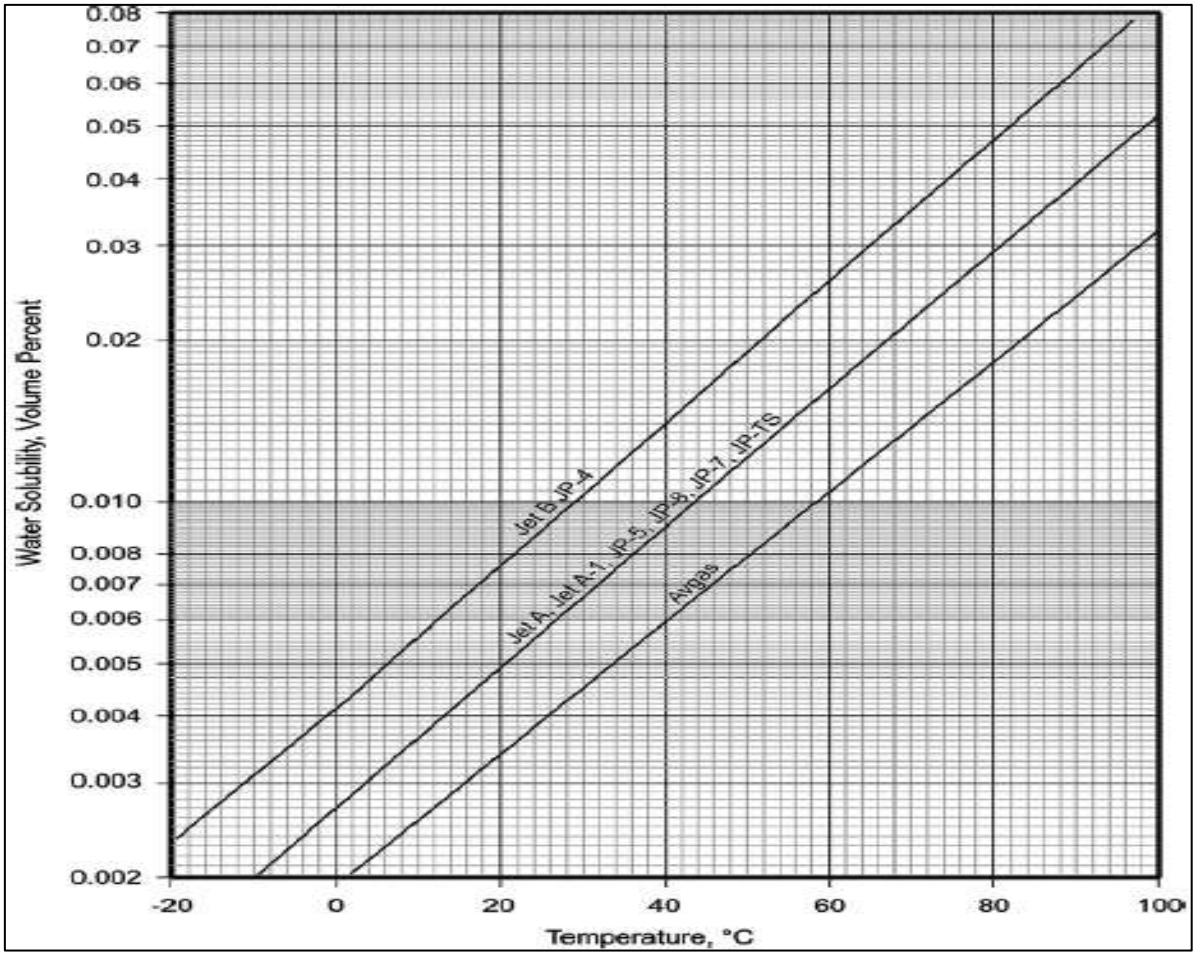
El carácter polar o apolar de la sustancia es determinante en la solubilidad. Los compuestos con menor solubilidad son los que presentan menor polaridad y reactividad, como son las parafinas y los derivados halogenados.

La cantidad de agua que puede llegar a disolverse en el combustible se relaciona con la humedad relativa. Si un combustible tiene una humedad menor que la del ambiente, absorberá humedad del aire que se encuentra en contacto, con el fin de entrar en un estado de equilibrio impuesta por las condiciones del ambiente. En caso contrario, cuando la humedad del ambiente es menor que la humedad del combustible, el contenido de agua decrece.

La naturaleza química del combustible da una idea de cuánta agua puede solubilizarse, pero no es suficiente para entender totalmente la presencia y el comportamiento del agua contenida. A mayor temperatura, mayor solubilidad y por ende será mayor la cantidad de agua disuelta. Además, la presencia de aromáticos permite una mayor interacción molecular entre el agua y el combustible favoreciendo la solubilidad. Si se desea disminuir considerablemente el agua presente deben evitarse temperaturas altas, humedades relativas altas y la presencia de compuestos aromáticos. En la Figura 2 se puede ver el comportamiento de la solubilidad del agua con la temperatura

El problema principal se presenta cuando el combustible con humedad se encuentra en el sistema de la aeronave a grandes alturas y temperaturas bajas. Bajo estas condiciones, existen procesos de condensación y evaporación en el espacio libre entre el combustible y el sistema de la aeronave, es decir, el agua circulará entre el combustible y las paredes metálicas. Cuando se alcanza el punto de congelamiento, se forman cristales de hielo entre las paredes, en la superficie y dentro del combustible Jet. La formación de los pequeños cristales de hielo se da bajo un estado metaestable.

La formación de cristales puede clasificarse en tres pasos: Crecimiento de cristales, crecimiento de la escarcha y periodo pleno de crecimiento de la escharcha. El tiempo y las condiciones del aire son los factores más determinantes en el crecimiento de la capa de escharcha.



Fuente: Baena-Zambrana et al., 2013, p.37

Figura 2. Solubilidad del agua vs Temperatura para combustibles Jet

2.1.5.2. Crecimiento de cristales de hielo en el combustible Jet A1

La precipitación del agua se favorece cuando un avión alcanza alturas considerables puesto que se alcanzan temperaturas bajo cero. A estas condiciones el agua precipita en forma de pequeñas gotas, con un diámetro que generalmente no excede los 5 µm. Otra manera de separar el agua del combustible es por la formación de una emulsión, donde las gotas de agua se depositan en el fondo de los tanques. Si la temperatura en el tanque alcanza niveles por debajo del punto de fusión del agua, este líquido en emulsión formará pequeñas partículas de hielo en la superficie del tanque, dado por un proceso de nucleación. Según Baena-Zambrana et al. (2013), estos núcleos son pequeñas fases sólidas de átomos, moléculas o iones que se precipitan en el fluido, con capacidad de aumentar su tamaño.

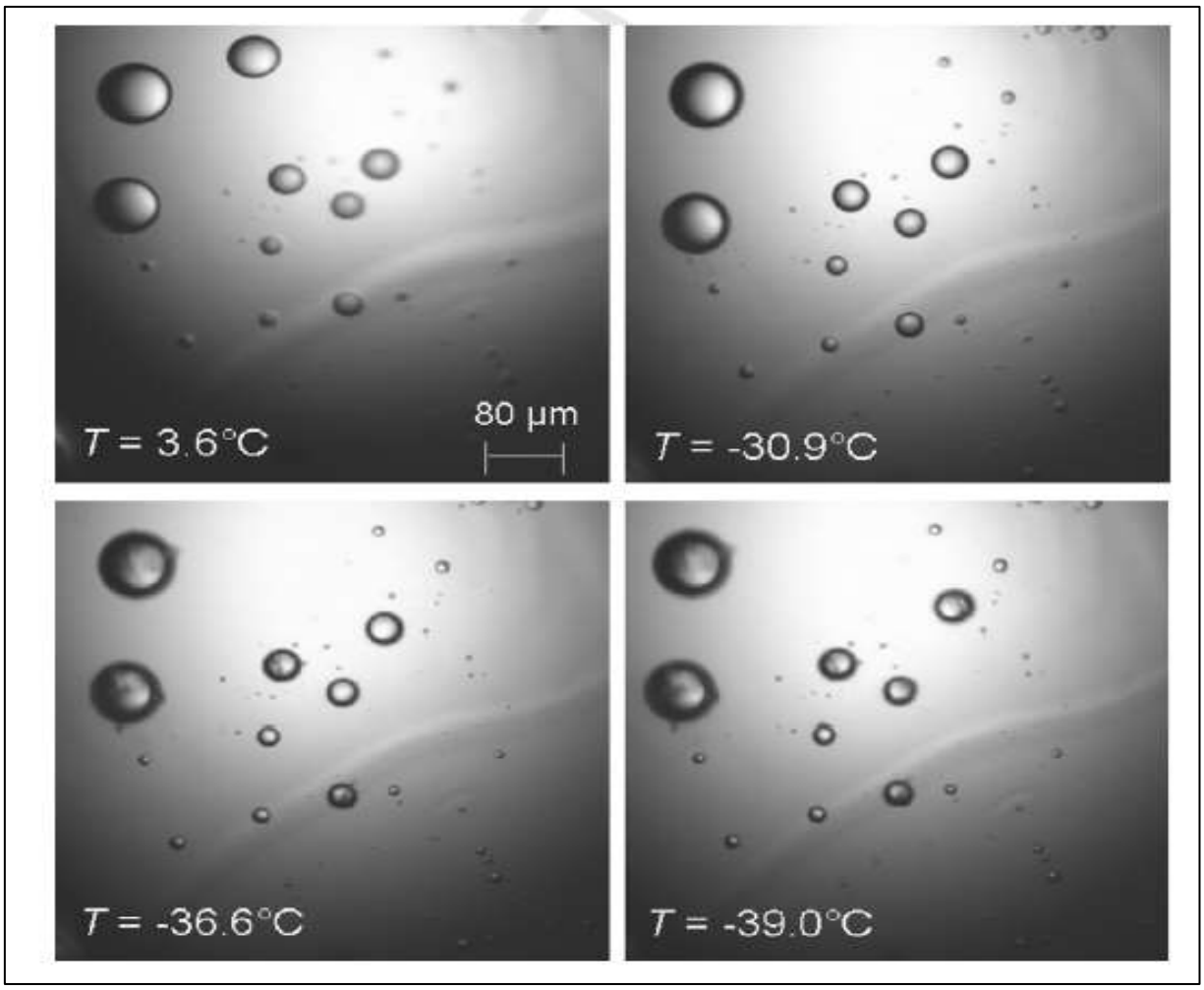
La nucleación dentro del combustible Jet puede darse a través de dos mecanismos:

Nucleación Homogénea: Este proceso ocurre con mayor dificultad dado que ocurre en el momento en que las moléculas o átomos de la fase inicial son iguales tanto química, como energética y estructuralmente.

Nucleación Heterogénea: Este tipo de nucleación requiere de una interfase, en la cual los átomos o moléculas de la fase inicial no son iguales tanto química, como energética y estructuralmente.

Algunas de las gotas pueden permanecer en estado líquido, sobre-enfriadas a temperaturas menores de -30°C logrando un equilibrio metaestable, lo que significa que su equilibrio físico es débil, ya que su energía libre de Gibbs no es la mínima posible, por lo cual se puede facilitar un cambio de estado formando, por ejemplo, partículas metaestables de hielo; las cuales en combustibles para aviones pueden depositarse formando estructuras cúbicas y hexagonales. El crecimiento y nucleación de partículas hexagonales en combustibles de avión ha sido ampliamente estudiado, y en la literatura se encuentran dos procesos que lo soportan, el de aumento Wegener–Bergeron–Findeisen y el de maduración de Ostwald.

Murray et al. (2011) realizaron un estudio de enfriamiento de gotas de agua pura en Jet A1 a una tasa de enfriamiento de 10 °C por minuto. En la Figura 3 se pude notar que las gotas que se enfriaron hasta -30.9˚C mantuvieron la misma apariencia de las gotas que estaban a +3.6 ˚C, indicando que se encontraban en estado líquido súper-frio (metaestable). Alrededor de -36 ˚C es la temperatura límite a la cual las gotas de agua remanentes en el combustible Jet A1 se mantienen en estado líquido metaestable, antes que comience la nucleación homogénea que da paso a la formación de cristales. En otro experimento las gotas se enfriaron hasta -25 ˚C y se dejaron a estas condiciones durante 24 minutos, sin observar congelamiento demostrando que las gotas de agua suspendidas en el combustible pueden permanecer en estado líquido metaestable por largos periodos de tiempo.



Fuente: Murray et al., 2011, p. 434

Figura 3. Imágenes de enfriamiento de gotas de agua en combustible Jet A1

2.2. RELACIONES PROPIEDAD COMPOSICIÓN PARA EL COMBUSTIBLE JET A1

El desarrollo de relaciones propiedad composición para el combustible de aviación se ha convertido en una de las más importantes preocupaciones y desafíos para la predicción rápida de varias propiedades y la selección adecuada de la clase o fracción de hidrocarburos que afecta la aplicación específica propuesta. Aunque en las pasadas dos décadas se han reportado algunas relaciones importantes entre propiedad composición de combustibles líquidos como Jet-A1, queroseno, diésel entre otros, todavía es difícil predecir con exactitud las propiedades del combustible debido a la compleja composición del combustible.

2.2.1. Técnicas para determinar composición en el combustible Jet A1

Existen diversas técnicas que permiten la identificación, cuantificación o relación indirecta de la composición, entre las que se pueden mencionar:

Resonancia magnética nuclear (NMR): es una de las herramientas más poderosas que existen en la actualidad para dilucidar estructuras de moléculas, principalmente orgánicas. Para ello, y como su nombre lo indica, esta técnica se basa en una característica intrínseca de los núcleos: sus propiedades magnéticas. Es un método analítico muy común, especialmente la aplicación de resonancia magnética nuclear de protón (H RMN) y resonancia magnética nuclear de carbono (C RMN). La aplicación más importante de C NMR es la identificación de átomos de carbono (estructura) de componentes petroquímicos. H RMN permite identificar el tipo de hidrogeno ($-CH_2$, $-CH_3$, =CH) y calcular el contenido de hidrogeno total en los combustibles.

Espectroscopia infrarroja (IR): Cuando la radiación infrarroja incide sobre una muestra, es capaz de provocar cambios en los estados vibracionales de las moléculas constituyentes de la misma. La absorción de radiación por parte de una muestra es indicativa del tipo de enlaces y grupos funcionales presentes. La región infrarroja de un espectro abarca radiación en un rango de numero de onda de (12800 a 10) 1/cm o longitud de onda de (0.78 a 1000) micrómetros. El espectro IR es comúnmente subdividido en tres regiones, IR cercano, IR medio e IR lejano. Dos tipos de regiones IR son analizadas para los combustibles Jet. Una región de IR cercano usando espectrofotómetros dispersivos y una región de IR medio usando espectrómetros de transformada de Fourier (FT). La técnica IR se puede utilizar para determinar el contenido de metilester de ácido grado (FAME) en destilados medios y combustibles de aviación tipo turbina con el uso de procesamiento de datos con mínimos cuadrados parciales (PLS). También ha sido usada para la determinación de biocombustibles en mezclas de combustible Jet con bioqueroseno.

Espectroscopia Raman: es una técnica fotónica de alta resolución que proporciona en pocos segundos información química y estructural de casi cualquier material o compuesto orgánico y/o inorgánico permitiendo así su identificación. Se trata de una técnica de análisis que se realiza directamente sobre el material a analizar sin necesitar ningún tipo de preparación especial y que no conlleva ninguna alteración de la superficie sobre la que se realiza el análisis.

Cromatografía: La cromatografía es básicamente una técnica de separación, su gran capacidad para resolver muestras complejas ha conducido a utilizarla cada vez más como técnica analítica. Esta utilización, ha conducido al desarrollo de una instrumentación, que, utilizando siempre la separación por elución, puede operar en continuo con mayor eficacia en la separación y con un mayor control de las condiciones cromatográficas para incrementar la reproducibilidad de los resultados. Entre las técnicas utilizadas con fines analíticos, la cromatografía de gases (GC) es

probablemente la técnica de más amplia utilización; ninguna técnica puede ofrecer su capacidad de separación o su sensibilidad a la hora de analizar compuestos volátiles.

Espectrometría de masas (MS): La espectrometría de masas, es una técnica de análisis cualitativo, de amplia utilización para la determinación de estructuras orgánicas, por si sola o en combinación con otras técnicas de espectrofotometría. La MS está basada en la obtención de iones a partir de moléculas orgánicas en fase gaseosa; una vez obtenidos estos iones, se separan de acuerdo con su masa y su carga y finalmente se detectan por medio de un dispositivo adecuado. Un espectro de masas será, en consecuencia, una información bidimensional que representa un parámetro relacionado con la abundancia de los diferentes tipos de iones en función de la relación masa/carga de cada uno de ellos.

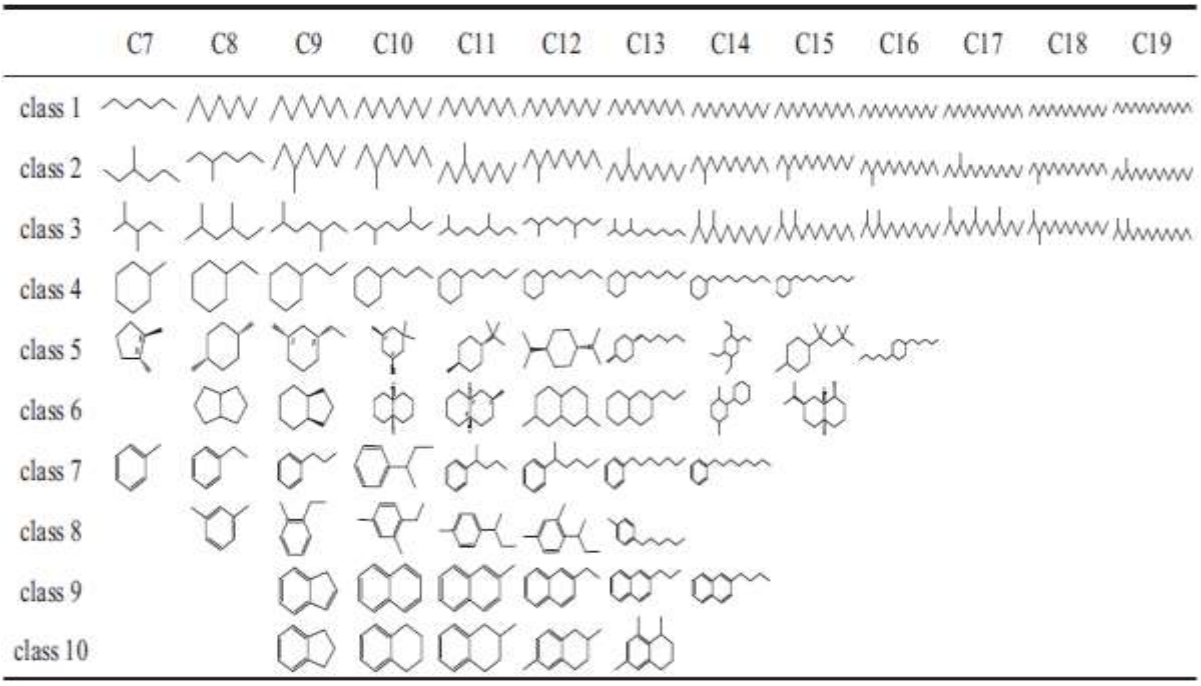
Existen diversas configuraciones entre las técnicas mencionadas anteriormente, que se combinan para mejorar los resultados de identificación y cuantificación de la composición química.

Cookson et al. (1985) estudiaron la composición de combustibles tipo diesel y tipo queroseno identificando cuatro familias de hidrocarburos (n-alcanos, isoalcanos, cicloalcanos saturados y aromáticos), mediante cromatografía liquida de alta resolución (HPLC) y resonancia magnética nuclear de carbón (C NMR).

Liu et al. (2007), con el uso de la técnica GC-MS, determinaron la composición química de combustibles teniendo en cuenta 8 clases de componentes hidrocarburos tales como n-parafínicos, isoparafinicos, monocicloparafínicos, dicicloparafínicos, alquilbencenos, naftalenos, tetralinas e hidroaromaticos.

Shi et al. (2017) usaron cromatografía de gases bidimensional comprensiva acoplada con espectrometría de masas (GCxGC-MS/FID) para detallar la composición química de muestras de hidrocarburos basadas en queroseno. La aplicación de la técnica permitió identificar 10 clases de hidrocarburos de acuerdo al número de carbonos presentes: clase 1 (alcanos normales), clase 2 (isoalcanos mono ramificados), clase 3 (isoalcanos altamente ramificados), clase 4 (alquilmonocicloalcanos mono ramificados), clase 5 (alquilmonocicloalcanos altamente ramificados), clase 6 (dicicloalcanos, alquildicicloalcanos, tricicloalcanos y alquiltricicloalcanos), clase 7 (alquilbencenos mono ramificados), clase 8 (alquilbencenos altamente ramificados), clase 9 (indenos, alquilindenos, naftalenos, alquilnaftalenos y aromáticos policíclicos) y clase 10 (indanos, alquilindanos, tetralinas y alquiltetralinas). En la tabla 4, se presenta la matriz de componentes

Tabla 4. Matriz de componentes utilizada por Shi et al. (2017)



Fuente: Shi et al., 2017, p. 401

2.2.2. Relaciones propiedad-composición para el combustible Jet A1

Cookson et al. (1985) reportaron inicialmente relaciones propiedad–composición de 18 combustibles diésel y 21 combustibles queroseno. La composición química fue expresada teniendo en cuenta cuatro clases de componentes (n-alcanos, isoalcanos, cicloalcanos saturados y aromáticos) usando cromatografía liquida de alta resolución (HPLC) y C NMR. Las correlaciones desarrolladas para el punto de humo dado que no se tuvieron en cuenta compuestos aromáticos policíclicos y otros tipos de hidrocarburos más complejos

En trabajos posteriores, Cookson et al. (1995, 1993, 1987) y Cookson and Smith (1992, 1990) estudiaron la composición química de más de 100 combustibles Jet y diésel con GC, H NMR y C NMR y encontraron que las correlaciones propiedad-composición de los combustibles con carbones aromáticos, carbones n-alquílicos por C NMR fue tan efectiva como los modelos complejos basados en HPLC + NMR.

Gómez-Carracedo et al. (2003) aplicaron FTIR para caracterizar la composición del queroseno y emplearon el método de regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) para predecir algunas propiedades fisicoquímicas (destilación, punto de inflamación, punto de congelamiento, contenido de aromáticos y viscosidad). Tanto la técnica NMR como la FTIR solo mejoraron el conocimiento cualitativo de los tipos

de carbón y sus enlaces químicos y no presentaron información detallada de los componentes en el combustible.

A inicios del siglo 21 resurgió el interés de trabajar con redes neuronales artificiales en la industria química y del petróleo para la solución de problemas complejos y no lineales. Yang et al. (2002) presentaron la composición de 20 grupos de hidrocarburos determinados por cromatografía liquida (LC) y GC-MS y aplicaron dos regresiones generales de redes neuronales (GRNN) para correlacionar el número de cetano y la densidad para 12 grupos de hidrocarburos con un promedio de error inferior al 3%. En otra investigación, Yang et al. (2004) usaron “GC-MS” para determinar 12 grupos de composición química para combustible diésel y establecieron correlaciones de redes neuronales para la densidad y numero de cetano con un mejoramiento significativo con respecto a las correlaciones anteriores. Sin embargo, una de las propiedades más importantes de los combustibles como es la destilación, no fue considerada en sus modelos.

Liu et al. (2007) presentaron varias correlaciones propiedad-composición para combustibles Jet, incorporando la influencia del contenido de compuestos isoparafínicos y diferentes rangos de ebullición. La técnica GC-MS fue usada para determinar la composición química dividida en 8 clases de componentes hidrocarburos tales como n-parafínicos, isoparafinicos, monocicloparafínicos, dicicloparafínicos, alquilbencenos, naftalenos, tetralinas e hidroaromaticos. Los resultados fueron obtenidos para comparar el rendimiento de las aproximaciones GRNN con correlaciones múltiples de regresiones lineales reportadas en la literatura. Las comparaciones realizadas y los análisis de laboratorio utilizando métodos estándar ASTM mostraron que las aproximaciones de las redes neuronales artificiales en las relaciones-propiedad composición mejoraron significativamente.

Cooper et al. (2011) usaron FTIR, específicamente espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) con una longitud de onda de 1000 nm a 1600 nm, para el análisis de datos y el modelamiento quimiométrico. Analizaron 800 muestras entre Jet y diésel y crearon los modelos PLS usando la información de las propiedades medidas de los combustibles y los espectros generados. Las propiedades evaluadas fueron punto de inflamación, densidad, viscosidad, punto de congelamiento y destilación. Los resultados mostraron buenas correlaciones para la densidad y las temperaturas de destilación del 10%, 20% y 50%. Años después, el trabajo de Cooper et al. (2011), fue expandido por Cramer et al. (2015), con la adición de varios combustibles alternativos (combustibles Jet sintéticos y mezclas de combustibles Jet sintéticos y combustibles Jet derivados del petróleo). El estudio permite la predicción de las propiedades del Jet y la cuantificación del contenido de combustible alternativo en las mezclas.

Shen et al. (2016) utilizaron la información de los espectros de la técnica de espectroscopia Raman y los modelos PLS para correlacionar propiedades termofísicas. Se analizaron 17 muestras de hidrocarburos destilados obteniendo

mejores resultados para la densidad, punto final de ebullición y número acido comparados con las técnicas NIR y GC.

Con los avances en la tecnología de cromatografía y las diversas configuraciones a nivel de columnas, detectores, puertos de inyección, Vozka and Kilaz. (2019) presentaron el desarrollo de un método para evaluar la composición química detallada de mezclas de hidrocarburos (sintéticas y derivadas del petróleo) en un rango de composición C_6 a C_{33} (69 °C a 475 °C) por cromatografía de gases bidimensional (GC*GC) con un detector de ionización de llama (FID). Este método permite obtener un análisis químico detallado con el uso de 24 materiales de referencia sin la necesidad de usar MS. Los resultados permiten obtener 9 clases de hidrocarburos principales: parafinas, isoparafinas, mono, di y tricicloprafinas, alquilbencenos, cicloaromáticos, alquilnaftalenos, bifenilos, fenantrenos y antracenos y pírenos. El método fue validado por el uso de GC-FID, ASTM D1319 ASTM D6591 y mezclas de materiales de referencia.

2.3. MODELOS TEÓRICOS

El combustible Jet A1 es un sistema complejo de varios componentes hidrocarburos que se encuentran mezclados físicamente y no reaccionan químicamente. Por lo tanto, puede ser considerado como una mezcla homogénea y dadas ciertas condiciones de presión, temperatura, cantidad de sustancia, entre otras, se puede asumir como una disolución ideal.

En una disolución ideal, algunas propiedades físicas consideradas propiedades aditivas, pueden estimarse a partir de las propiedades de los componentes puros.

$$Mmezcla = \sum_{i=1}^{n} Xi * Mi \qquad \textbf{(Ecuación 1)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} Xi = 1.0 \qquad \textbf{(Ecuación 2)}$$

Donde

$Mmezcla$ Propiedad de la mezcla
Mi Propiedad del componente puro i
Xi Fracción molar del componente i o fracción en masa del componente i.

Los componentes puros deben estar a las mismas condiciones de presión y temperatura y así la propiedad de la mezcla resultante estará a esas condiciones.

2.3.1. Gravedad API del combustible Jet A1

La gravedad API es una función especial de la gravedad específica o densidad relativa a 60 °F (15.56 °C).

$$API_{60\,°F} = \frac{141.5}{G_{60\,°F}} - 131.5 \qquad \textbf{(Ecuación 3)}$$

$$G = \frac{\rho_{fluido}}{\rho agua} \qquad \textbf{(Ecuación 4)}$$

Donde

G	Gravedad especifica
ρ_{fluido}	Densidad del fluido
ρ_{agua}	Densidad del agua.

Por consiguiente, la gravedad API del Jet A1, se puede estimar con la información de la densidad de los componentes puros a 60 °F (15.56 °C) y el uso de las ecuaciones 1,2,3 y 4.

2.3.2. Calor de combustión del combustible Jet A1

El calor de combustión también se puede considerar como una propiedad aditiva y puede ser estimada en función de los calores de combustión de los componentes puros con el uso de la ecuación 1 y 2.

Es de tener en cuenta las siguientes definiciones, de acuerdo a la norma ASTM D 240 (ASTM, 2019a).

Calor de combustión bruto: cantidad de energía liberada cuando una unidad de masa de combustible es quemada en una cápsula a volumen constante, donde todos los productos de la combustión son gases excepto el agua la cual se encuentra en estado líquido.

Calor de combustión neto: cantidad de energía liberada cuando una unidad másica de combustible es quemada a presión constante, donde todos los productos de combustión, incluyendo el agua están en estado gaseoso.

El calor de combustión neto se puede calcular en función del calor de combustión bruto si se conoce el contenido de hidrogeno, mediante la siguiente ecuación:

$$Q_{neto} = Q_{bruto} - 0.2122 * H \qquad \textbf{(Ecuación 5)}$$

Donde

Q_{neto} calor de combustión neto
Q_{bruto} calor de combustión bruto
H contenido de hidrogeno

Cuando no se conoce el contenido de hidrogeno, se puede usar la siguiente relación

$$Q_{neto} = 10.025 + 0.7195 * Q_{bruto}$$ **(Ecuación 6)**

2.3.3. Temperatura de inicio de cristalización del combustible Jet A1

En este caso se desarrolla una formulación del equilibrio sólido-líquido partiendo de que en el equilibrio las fugacidades de cada componente en cada fase son iguales.

$$f_i^{L*} = f_i^{S*}$$ **(Ecuación 6)**

De otra forma

$$x_i \gamma_i^L f_i^L = z_i \gamma_i^S f_i^S$$ **(Ecuación 7)**

Donde,

$x_i z_i$ Fracciones molares de la especie i en la fase líquida y sólida respectivamente.
$\gamma_i^L \gamma_i^S$ Coeficientes de actividad de la especie i en la fase líquida y sólida respectivamente.
$f_i^L f_i^S$ Fugacidad del componente puro de la especie i en la fase líquida y sólida respectivamente.

Tomando

$$\psi_i = \frac{f_i^S}{f_i^L}$$ **(Ecuación 8)**

El lado derecho de la ecuación 3 (relación de fugacidades a T y P del sistema), se escribe en forma extendida

$$\frac{f_i^S(T,P)}{f_i^L(T,P)} = \frac{f_i^S(T,P)}{f_i^S(T_{mi},P)} \frac{f_i^S(T_{mi},P)}{f_i^L(T_{mi},P)} \frac{f_i^L(T_{mi},P)}{f_i^L(T,P)}$$ **(Ecuación 9)**

Donde T_{mi}, representa la temperatura de fusión (punto de congelación o temperatura de inicio de cristalización) de la especie pura i, es decir, la temperatura a la cual la especie pura alcanza el equilibrio sólido-líquido. De ese modo, la segunda relación del lado derecho es la unidad, ya que $f_i^L = f_i^S$ en el punto de fusión de la especie pura i. Por lo tanto,

$$\frac{f_i^S(T,P)}{f_i^L(T,P)} = \frac{f_i^S(T,P)}{f_i^S(T_{mi},P)} \frac{f_i^L(T_{mi},P)}{f_i^L(T,P)} \qquad \textbf{(Ecuación 10)}$$

De acuerdo con la ecuación 10, el cálculo de ψ_i requiere expresiones para el efecto de la temperatura en la fugacidad. Recordando que

$$\phi_i = \frac{f_i}{P} \qquad \ln f_i = \frac{G_i^R}{RT} + \ln P$$

Realizando el manejo termodinámico respectivo se tiene:

$$\ln \frac{f_i^L}{f_i^S} = \frac{\Delta H_{m,i}}{RT_{m.i}}\left(\frac{T_{m.i}}{T} - 1\right) - \frac{\Delta C_i}{R}\left(\frac{T_{m.i}}{T} - 1\right) + \frac{\Delta C_i}{R} \ln \frac{T_{m.i}}{T} \qquad \textbf{(Ecuación 11)}$$

Donde,

$\Delta H_{m,i}$ Entalpía de fusión

ΔC_i Diferencia entre la capacidad calorífica de un componente puro i entre las fases líquida y sólida.

Generalmente ΔC_i es bastante pequeña (despreciable) y se puede omitir de la ecuación 11.

Luego,

$$\frac{f_i^S}{f_i^L} = \exp\left(\frac{\Delta H_{m,i}}{RT_{m.i}}\left(\frac{T - T_{m.i}}{T}\right)\right) = \theta_i(T) = \frac{x_i \gamma_i^L}{z_i \gamma_i^S} \qquad \textbf{(Ecuación 12)}$$

Con la ecuación 12 se puede obtener la temperatura de inicio de cristalización (Tco) y los cambios composicionales que se presentan a temperaturas inferiores.

Debido a que la presión del sistema (846 mbar) es baja se puede suponer condiciones ideales para la fase líquida y con esto γ_i^L es igual a uno.

De la teoría de termodinámica en un sistema multicomponente los principales componentes del sistema que comienzan a cristalizar primero son los de temperatura de inicio de cristalización más altos, se puede asumir completa inmiscibilidad para las especies en el estado sólido (es decir $z_i \gamma_i^S = 1.0$).

Teniendo en cuenta las suposiciones anteriores, de la ecuación 12 se tiene:

$$\frac{f_i^S}{f_i^L} = \exp\left(\frac{\Delta H_{m,i}}{RT_{m.i}}\left(\frac{T - T_{m.i}}{T}\right)\right) = \theta_i(T) = x_i^L \qquad \textbf{(Ecuación 13)}$$

Por otra parte,

$$\sum x_i^L = \sum \theta_i(T) = 1.0 \qquad \textbf{(Ecuación 14)}$$

Utilizando la ecuación 14, se evalúa la temperatura (T) para cada componente del Jet A1 y se escoge la mayor temperatura, que equivale a la Tco.

2.3.4. Punto de inflamación del combustible Jet A1

El punto de inflamación de cualquier líquido inflamable se pude definir como la temperatura en que la presión de vapor del líquido es suficiente para producir una concentración de vapor en el aire, correspondiente al límite de inflamación más bajo.

El límite de inflamación más bajo de una mezcla de vapor con aire, puede ser expresado mediante la regla de Le Chatelier.

$$1.0 = \sum \frac{yi}{LFLi} \qquad \textbf{(Ecuación 15)}$$

Donde

yi fracción molar de la sustancia i en la fase de vapor
$LFLi$ límite de inflamación más bajo del componente puro i.

De la definición de punto de inflamación para una sustancia pura

$$LFLi = \frac{P_{i,fp}^{sat}}{P} \qquad \textbf{(Ecuación 16)}$$

Donde

P presión del ambiente
$P_{i,fp}^{sat}$ presión de vapor saturado en el punto de inflamación del componente puro i

El punto de inflamación de una sustancia generalmente es medido a condiciones de presión atmosférica, la cual se considera baja para que sea ideal. En el equilibrio líquido vapor se cumple

$$yi = \frac{xi\gamma iP_i^{sat}}{P}$$ **(Ecuación 17)**

Donde

γi coeficiente de actividad del componente i

Reemplazando las ecuaciones 16 y 17 en la ecuación 16

$$1.0 = \sum \frac{xi\gamma iP_i^{sat}}{P_{i,fp}^{sat}}$$ **(Ecuación 18)**

La presión de vapor saturado de cada componente puro se puede estimar mediante la ecuación de Clausius Clapeyron

$$Ln\frac{P_2}{P_1} = \frac{\Delta H_{vap}}{R}\left(\frac{1}{T2} - \frac{1}{T1}\right)$$ **(Ecuación 19)**

Donde

ΔH_{vap} Entalpia de vaporización
R Constante Universal de los gases

El punto de inflamación de una sustancia generalmente es medido a condiciones de presión atmosférica, la cual se considera baja y se podría asumir $\gamma i = 1.0$

Con la ecuación 19 y la temperatura de punto de inflamación del componente puro se puede estimar la presión de vapor saturado del componente puro en su punto de inflamación y obtener $P_{i,fp}^{sat}$.

Se supone una temperatura y se encuentra la presión de vapor saturado del componente puro y se verifica la ecuación 18. Cuando se cumpla la igualdad se ha determinado el punto de inflamación.

En la tabla 5 se presentan las propiedades de algunos componentes puros tomados de la base de datos de ASTM Data Series DS 4B (ASTM, 1988)

Para la viscosidad no es posible desarrollar un modelo teórico, ya que no existen bases de datos de viscosidad a -20 °C de los componentes puros. La normatividad legal para evaluación de conformidad requiere el resultado de viscosidad del combustible Jet A1 a -20 °C.

Para la destilación no es posible desarrollar un modelo teórico, ya que de acuerdo al método de ensayo experimental basado en la norma ASTM D 86 “Método de prueba estándar para destilación de productos del petróleo a presión atmosférica”

(ASTM, 2019b) no se realiza la medición de la fracciones en la fase de vapor ni en la fase liquida.

Tabla 5. Propiedades de componentes puros

MUESTRA	Peso molecular (g/mol)	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)	Gravedad específica a 15,56 °C	Presión de vapor a 37,73 °C (psi)	Calor de vaporización (kJ/mol)	Calor neto de combustión (kJ/kg)	Punto de Inflamación (°C)	Calor de fusión (kJ/mol)
Heptano	100,2	98,4	-90,6	0,6882	1,6201	31,70	44561,5	-3,9	14,04
Octano	114,2	125,7	-56,8	0,7070	0,5369	34,41	44421,9	13,3	20,74
Nonano	129,3	150,8	-53,5	0,7219	0,1795	37,39	44321,9	31,1	15,62
Decano	142,3	174,1	-29,6	0,7342	0,0609	39,60	44238,2	46,1	28,70
Undecano	156,3	195,9	-25,6	0,7445	0,0204	42,52	44166,1	65,0	22,09
Dodecano	170,3	216,3	-9,6	0,7527	0,0071	44,48	44110,3	73,9	39,42
Tridecano	184,4	235,5	-5,4	0,7817	0,0031	46,30	44059,1	94,0	28,50
Tetradecano	198,4	253,6	5,9	0,7833	0,0009	47,45	44019,6	100,0	45,07
Pentadecano	212,4	270,7	9,9	0,7722	0,0002	51,39	43982,3	132,0	34,60
Hexadecano	226,4	286,9	18,2	0,7772	0,0001	52,52	43947,4	135,0	53,36
Heptadecano	240,5	302,0	22,0	0,7797	0,0001	52,32	43921,9	149,0	40,46
Ciclohexano, metil-	98,2	100,9	-126,6	0,7748	1,6047	31,82	43361,3	-3,9	6,75
Ciclohexano, etil-	112,2	131,8	-111,3	0,7921	0,4834	34,16	43405,5	35,0	8,33
Ciclohexano, propil-	126,2	156,7	-94,9	0,7981	0,1700	36,50	43410,1	35,0	10,37
Benceno, 1,2,3-trimethyl	120,2	176,1	-25,3	0,8985	0,0713	39,85	41051,6	51,1	8,18
Tolueno	92,1	110,6	-95,0	0,8743	1,0311	33,59	40525,9	4,4	6,64
o-Xileno	106,2	144,4	-25,2	0,8849	0,2631	37,01	40812,0	17,2	13,60
p-Xileno	106,2	138,4	13,3	0,8666	0,3473	35,82	40812,0	25,0	17,11
Naftaleno, decahidro-, trans-	138,3	187,3	-30,4	0,8755	0,0541	38,62	42537,9	57,8	14,41

Fuente: ASTM, 1988

3. TRABAJO EXPERIMENTAL

En esta sección se describen los diferentes métodos experimentales utilizados para generar las bases de datos que se usaron en la obtención de las relaciones propiedad-composición del combustible Jet A1. Adicionalmente se describen las técnicas estadísticas utilizadas.

3.1. RECOLECCIÓN DE MUESTRAS DE COMBUSTIBLE JET A1

El trabajo se inicia con la recolección de una base de muestras de Jet A1 a nivel nacional incluyendo muestras de un programa de participación de pruebas de aptitud con ASTM en Estados Unidos de América. Las muestras fueron recolectadas durante un periodo de 15 meses en las regiones de Antioquia (Medellín y Rionegro), Atlántico (Baranoa), Santander (Chimita), Valle del Cauca (Mulalo) y Estados Unidos de América (Programa ASTM). Las muestras a nivel nacional fueron tomadas en las plantas mayoristas de distribución de este combustible en las distintas regiones. Para efectos descriptivos, técnicos y económicos se considera una buena base de muestras superior a 30 (n>30)

El periodo de tiempo y las diferencias en los puntos de muestreo fueron seleccionados para garantizar diferencias en la composición y propiedades fisicoquímicas de las muestras y para permitir obtener un análisis estadístico detallado. A continuación, se presenta los aspectos que se tienen en cuenta para el muestreo:

Tipo de muestreo: aleatorio
Población: Muestras de Jet A1 usadas en Colombia en el año 2018 y primer semestre del año 2019. Periodo de recolección de 15 meses
Muestra: 70 muestras de Jet A1 recolectadas en regiones de Antioquia (Medellín y Rionegro), Atlántico (Baranoa), Santander (Chimita), Valle del Cauca (Mulalo) y Estados Unidos de América (Programa ASTM). Las muestras del programa ASTM fueron seleccionadas y agregadas para evaluación y validación de los modelos propuestos.
Cantidad: Se recolectaba entre 500 ml a 700 ml de muestra de combustible Jet A1 en envase tipo ámbar de vidrio.

En la tabla 6 se presenta el listado de muestras de Jet A1 recolectadas a nivel nacional. Se recolectaron 70 muestras, ya que por efectos descriptivos, técnicos y económicos se considera que una buena base de muestras debe ser superior a 30 (n>30)

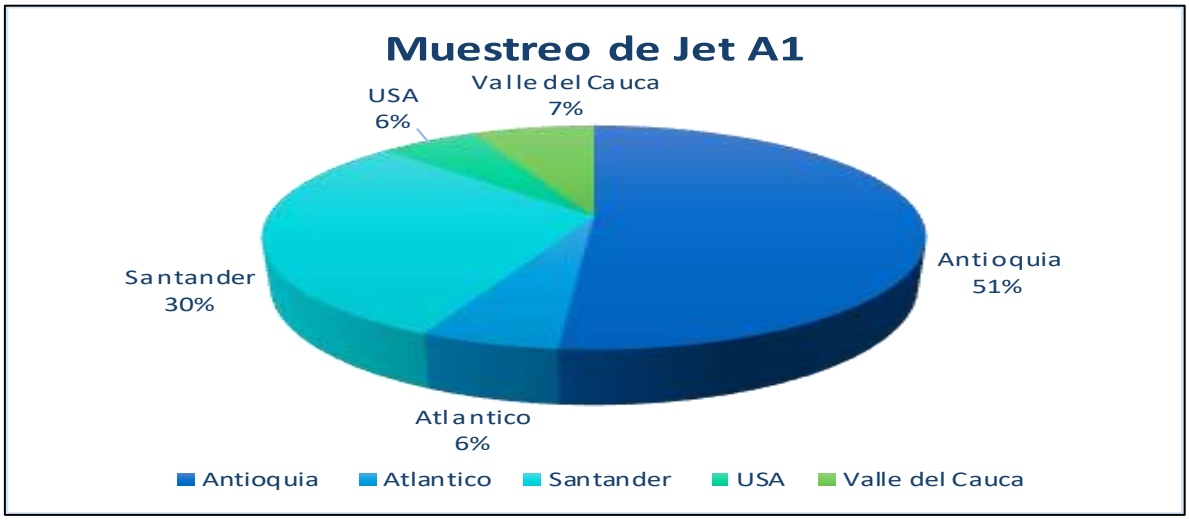
Tabla 6. Muestras recolectadas de combustible Jet A1

Muestra	Región	Lugar	Fecha	Mes
M1	Antioquia	Rionegro	2018-02-09	Febrero_18
M2	Antioquia	Rionegro	2018-04-16	Abril_18
M3	Antioquia	Rionegro	2018-03-26	Marzo_18
M4	Antioquia	Rionegro	2018-11-02	Noviembre_18
M5	Antioquia	Rionegro	2018-04-25	Abril_18
M6	Antioquia	Rionegro	2018-02-18	Febrero_18
M7	Antioquia	Rionegro	2018-04-30	Abril_18
M8	Santander	Chimita	2018-08-25	Agosto_18
M9	Antioquia	Rionegro	2018-05-22	Mayo_18
M10	Antioquia	Rionegro	2018-03-25	Marzo_18
M11	Antioquia	Rionegro	2018-04-04	Abril_18
M12	Santander	Chimita	2018-06-29	Junio_18
M13	Antioquia	Rionegro	2018-04-17	Abril_18
M14	Antioquia	Rionegro	2018-06-27	Junio_18
M15	Santander	Chimita	2018-08-25	Agosto_18
M16	Antioquia	Rionegro	2018-04-30	Abril_18
M17	Antioquia	Rionegro	2018-04-19	Abril_18
M18	Antioquia	Rionegro	2018-04-11	Abril_18
M19	Atlántico	Baranoa	2018-07-11	Julio_18
M20	Atlántico	Baranoa	2018-07-11	Julio_18
M21	Atlántico	Baranoa	2018-07-11	Julio_18
M22	Atlántico	Baranoa	2018-07-11	Julio_18
M23	Antioquia	Rionegro	2018-04-05	Abril_18
M24	Antioquia	Medellín	2018-05-10	Mayo_18
M25	Valle del Cauca	Mulalo	2018-07-05	Julio_18
M26	USA	ASTM JF1407	2018-02-09	Febrero_18
M27	USA	ASTM JF1711	2018-02-09	Febrero_18
M28	USA	ASTM JF1707	2018-02-09	Febrero_18
M29	Valle del Cauca	Mulalo	2014-07-30	Julio_18
M30	Antioquia	Rionegro	2018-09-12	Septiembre_18
M31	Antioquia	Rionegro	2018-09-12	Septiembre_18
M32	Antioquia	Rionegro	2018-09-27	Septiembre_18

Muestra	Región	Lugar	Fecha	Mes
M33	Antioquia	Medellín	2018-05-05	Mayo_18
M34	Valle del Cauca	Mulalo	2018-06-07	Junio_18
M35	Antioquia	Medellín	2018-08-25	Agosto_18
M36	Antioquia	Medellín	2018-06-25	Junio_18
M37	Valle del Cauca	Mulalo	2018-09-01	Septiembre_18
M38	Antioquia	Medellín	2018-08-08	Agosto_18
M39	Valle del Cauca	Mulalo	2018-09-10	Septiembre_18
M40	Antioquia	Medellín	2018-10-10	Octubre_18
M41	Antioquia	Medellín	2018-04-03	Abril_18
M42	Antioquia	Rionegro	2018-04-01	Abril_18
M43	Santander	Chimita	2018-07-27	Julio_18
M44	Santander	Chimita	2018-12-15	Diciembre_18
M45	Santander	Chimita	2018-12-23	Diciembre_18
M46	Antioquia	Rionegro	2018-10-05	Octubre_18
M47	Santander	Chimita	2018-12-28	Diciembre_18
M48	Antioquia	Medellín	2018-09-11	Septiembre_18
M49	Antioquia	Rionegro	2018-06-20	Junio_18
M50	Antioquia	Medellín	2018-07-25	Julio_18
M51	Santander	Chimita	2018-08-23	Agosto_18
M52	Santander	Chimita	2019-01-10	Enero_19
M53	Santander	Chimita	2018-12-09	Diciembre_18
M54	Santander	Chimita	2019-01-20	Enero_19
M55	Santander	Chimita	2018-10-10	Octubre_18
M56	Santander	Chimita	2018-11-18	Noviembre_18
M57	Santander	Chimita	2018-11-27	Noviembre_18
M58	Santander	Chimita	2018-11-23	Noviembre_18
M59	USA	ASTM JF1811	2018-11-01	Noviembre_18
M60	Santander	Chimita	2019-01-25	Enero_19
M61	Santander	Chimita	2019-02-03	Febrero_19
M62	Santander	Chimita	2019-02-07	Febrero_19
M63	Santander	Chimita	2019-02-12	Febrero_19
M64	Santander	Chimita	2018-11-14	Noviembre_18
M65	Santander	Chimita	2019-04-12	Abril_19
M66	Antioquia	Rionegro	2019-03-12	Marzo_19
M67	Antioquia	Medellín	2019-03-13	Marzo_19
M68	Antioquia	Medellín	2019-03-14	Marzo_19
M69	Antioquia	Rionegro	2019-03-15	Marzo_19
M70	Antioquia	Rionegro	2019-03-16	Marzo_19

Fuente: elaboración propia

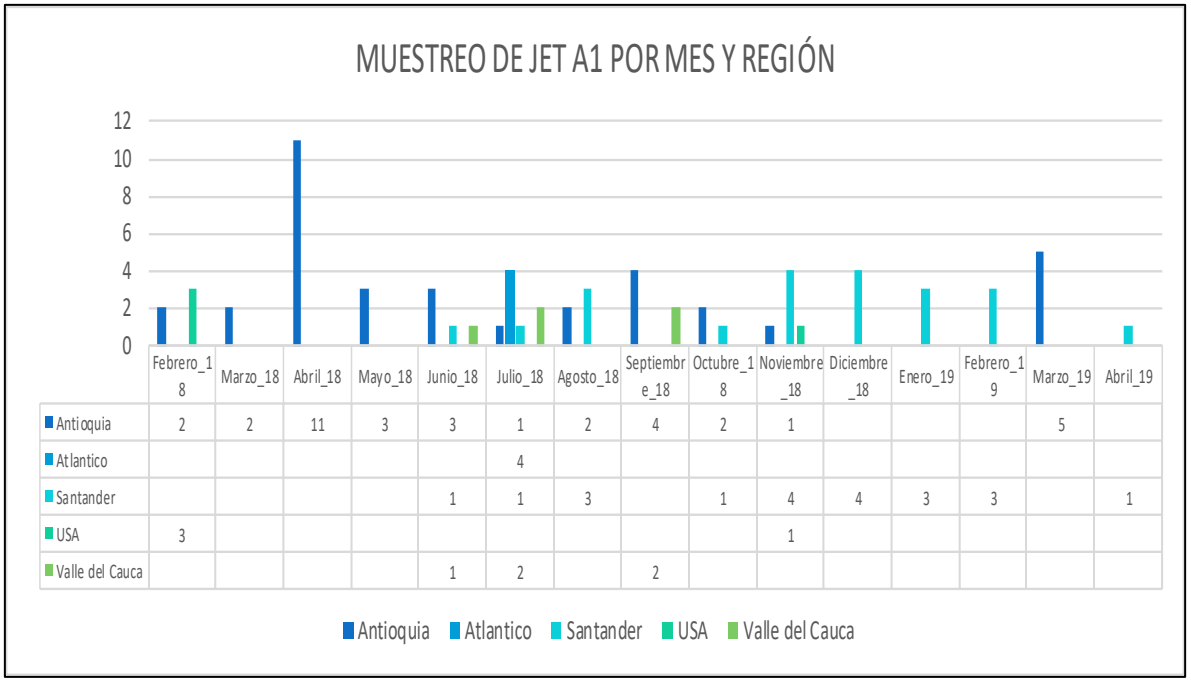
En las figuras 4 y 5 se puede visualizar el número de muestras tomadas en cada región y por cada mes. La región con mayor número de muestras fue Antioquia con un 51% del valor total de las muestras, gracias a la cercanía de la Universidad y la colaboración de los mayoristas. La región donde menos se recolecto muestra fue el Atlántico con un 6% a causa de efectos económicos y logísticos. Estados Unidos de América presenta un 6% del total de las muestras recolectadas, por ser muestras provenientes de un programa de pruebas de aptitud que se lleva 3 veces por año y la dificultad de transportar las muestras.



Fuente: elaboración propia

Figura 4. % de muestras de Jet A1 tomadas en cada región

En la figura 5 se puede ver que el muestreo fue aleatorio durante el periodo de 15 meses, iniciando la recolección en febrero de 2018 y finalizando en abril de 2019. El mes con menor número de muestras tomadas es abril de 2019, con 1 muestra en la región de Santander y el mes donde se recolecto mayor número de muestras fue en abril de 2018 en la región de Antioquia. Es de recordar que en Colombia el Jet A1 es suministrado por las refinerías de Barranca y Reficar en Cartagena.



	Febrero_18	Marzo_18	Abril_18	Mayo_18	Junio_18	Julio_18	Agosto_18	Septiembre_18	Octubre_18	Noviembre_18	Diciembre_18	Enero_19	Febrero_19	Marzo_19	Abril_19
Antioquia	2	2	11	3	3	1	2	4	2	1				5	
Atlantico						4									
Santander					1	1	3		1	4	4	3	3		1
USA	3									1					
Valle del Cauca					1	2		2							

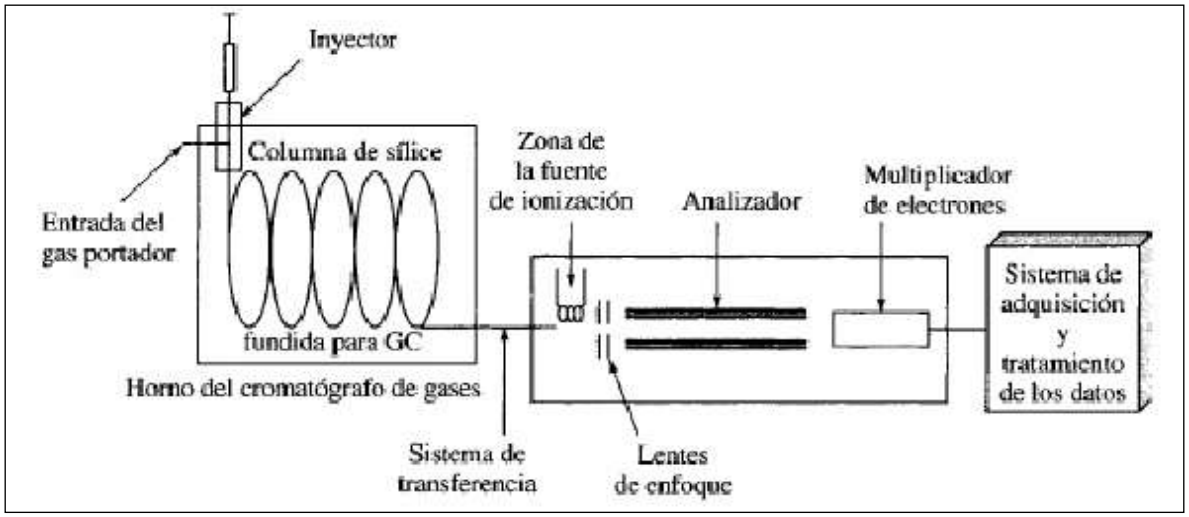
Fuente: elaboración propia

Figura 5. Muestras de Jet A1 tomadas en cada región por cada mes

3.2. EVALUACIÓN DE LA COMPOSICIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1

La cromatografía de gases acoplada a espectrometría de Masas (GC-MS) es una técnica analítica dedicada a la separación, identificación y cuantificación de mezclas de sustancias volátiles y semivolátiles. La separación de dichas sustancias depende de la diferente distribución de las sustancias estudiadas entre las fases móvil y estacionaria que conforman el sistema. Una vez separadas las sustancias son fragmentadas y analizadas en función de su patrón de fragmentación, el cual puede ser comparado con información contenida en una base de datos de espectros de masas para su identificación preliminar. La identificación definitiva, así como la cuantificación de cada sustancia debe hacerse mediante el empleo de sustancias de referencia.

En la figura 6 se presenta el esquema de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas, donde se puede visualizar que el equipo está compuesto de un sistema de gases, un sistema de inyección, un sistema de separación (horno y columna), un sistema de detección que en este caso es un detector de masas que incluye una zona de fuente de ionización, un analizador y un detector y finalmente un sistema de adquisición y tratamiento de datos.



Fuente: elaboración propia

Figura 6. Esquema GC-MS

La Espectrometría de Masas es una potente técnica instrumental de análisis, de alta sensibilidad, basada en la ionización de las moléculas y en la separación y registro de los iones producidos según su relación masa/carga (m/z) en un sistema a vacío. Los iones que llegan al detector producen una señal eléctrica que es ampliada, procesada y registrada en un ordenador, dando lugar al correspondiente espectro de masas que no es más que una representación gráfica de la abundancia de los iones detectados en función de su relación m/z.

3.2.1. Descripción del método

El desarrollo de la metodología implementada para evaluar la composición se realizó con base en las metodologías desarrolladas en los reportes “Hydrocarbon - Type Analysis of Jet Fuel with Gas Chromatography/Mass Spectrometry” (Gehron et al., 1989) y la Norma ASTM D 2425 - 17 “Standard Test Method for Hydrocarbon Types in Middle Distillates by Mass Spectrometry” (ASTM, 2017).

Para el análisis de estas muestras se trabajó en un cromatógrafo marca Agilent 7890A acoplado a un detector masas 5975C en el laboratorio de procesos Químicos Industriales de la Sede de Investigación Universitaria (SIU) de la Universidad de Antioquia. Se utilizó una columna DB-5HT con 30 metros de longitud, con una composición de (5% phenyl)-methylpolysiloxane, catalogada como columna no polar. Los parámetros de cromatografía empleados fueron los siguientes:

- Temperatura del puerto de inyección: 250 °C
- Temperatura en el horno: Inicialmente 45°C por 10 minutos y posteriormente se calienta hasta 300 °C
- Tasa de calentamiento: 5 °C/minuto
- Tiempo total del programa: 47 minutos

3.2.2. Preparación de la muestra

Se utilizó una solución estándar de 0,37 mg/ml de metil palmitato en disulfuro de carbono, tanto para las muestras preparadas como para los patrones preparados. En un vial se pesan 3 gotas del combustible, posterior a esto se traslada a cadena de frio por 10 minutos. Finalmente, se añade 1 ml de la solución estándar al vial con la muestra pesada, se agita vigorosamente y se inyecta al cromatógrafo. Después de la corrida se debe modificar los parámetros de integración tal cual se obtengan entre 140 a 160 señales en el cromatograma para pasar a identificarlos con la base de datos que se tiene disponible (NIST 2017).

3.2.3. Preparación de los estándares

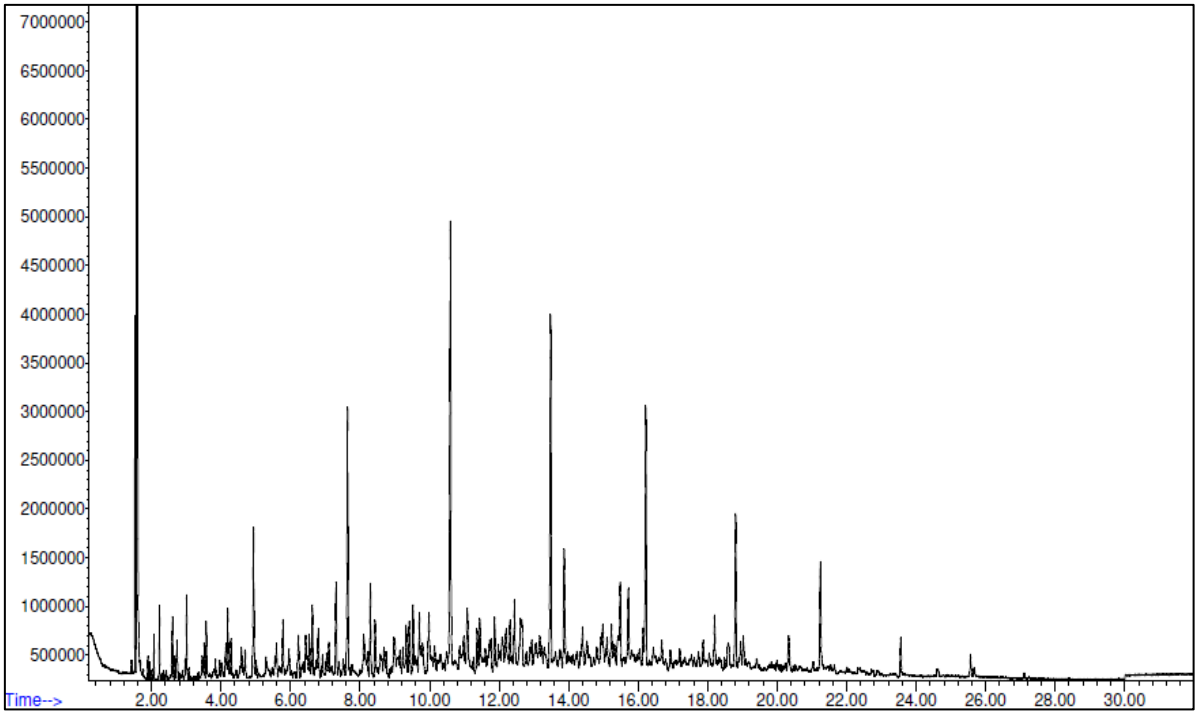
Los compuestos obtenidos se clasificaron en cinco familias: Parafinas e isoparafinas, cicloparafinas, alquil bencenos, naftalenos y tetralina e indanos. Para la primera familia se utilizaron los estándares de Supelco ‘’N-paraffin mix’’ 47100 y 47102, para la segunda y tercera familia se utilizó los estándares de Restek ‘’DHA Naphthenes standard’’ 30728 y ‘’DHA Aromatic Standard’’ 30729 respectivamente. Para la cuarta y quinta familia se utilizó naftaleno grado analítico.

Para iniciar a preparar los estándares se debe contar con nitrógeno líquido para enfriar viales y estándares y asegurar temperaturas menores a -50 °C, se debe contar con un baño de enfriamiento acoplado a la balanza analítica que trabaje <-20°C y una cámara de enfriamiento que este <-5°C para enfriar puntas que se usaran para pesar los estándares.

Se inicia pesando el estándar de cicloparafinas y después el de aromáticos, siempre entre cada pesaje se debe llevar el vial con estándar pesado al nitrógeno líquido para evitar volatilización. Se continúa pesando las parafinas y por último se pesa el naftaleno. Por último, se saca el vial del nitrógeno líquido y se añade 1 ml de estándar de metil palmitato en disulfuro de carbono.

3.2.4. Tratamiento de datos de la GC-MS

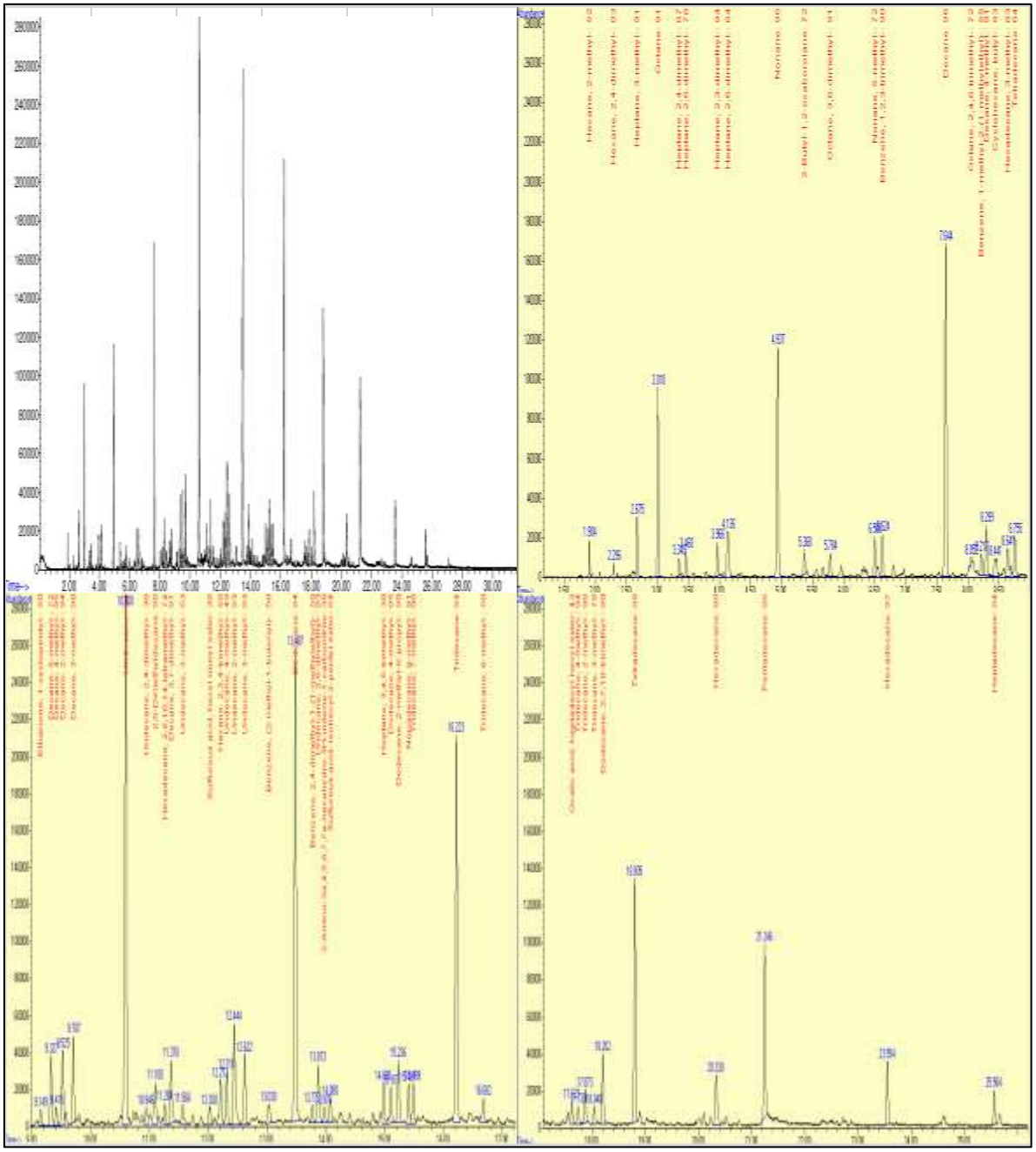
En la figura 7 se presenta un ejemplo de un cromatograma obtenido para el análisis de una muestra de Jet A1.



Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de cromatograma arrojado por el equipo

Figura 7. Cromatograma para una muestra de Jet A1

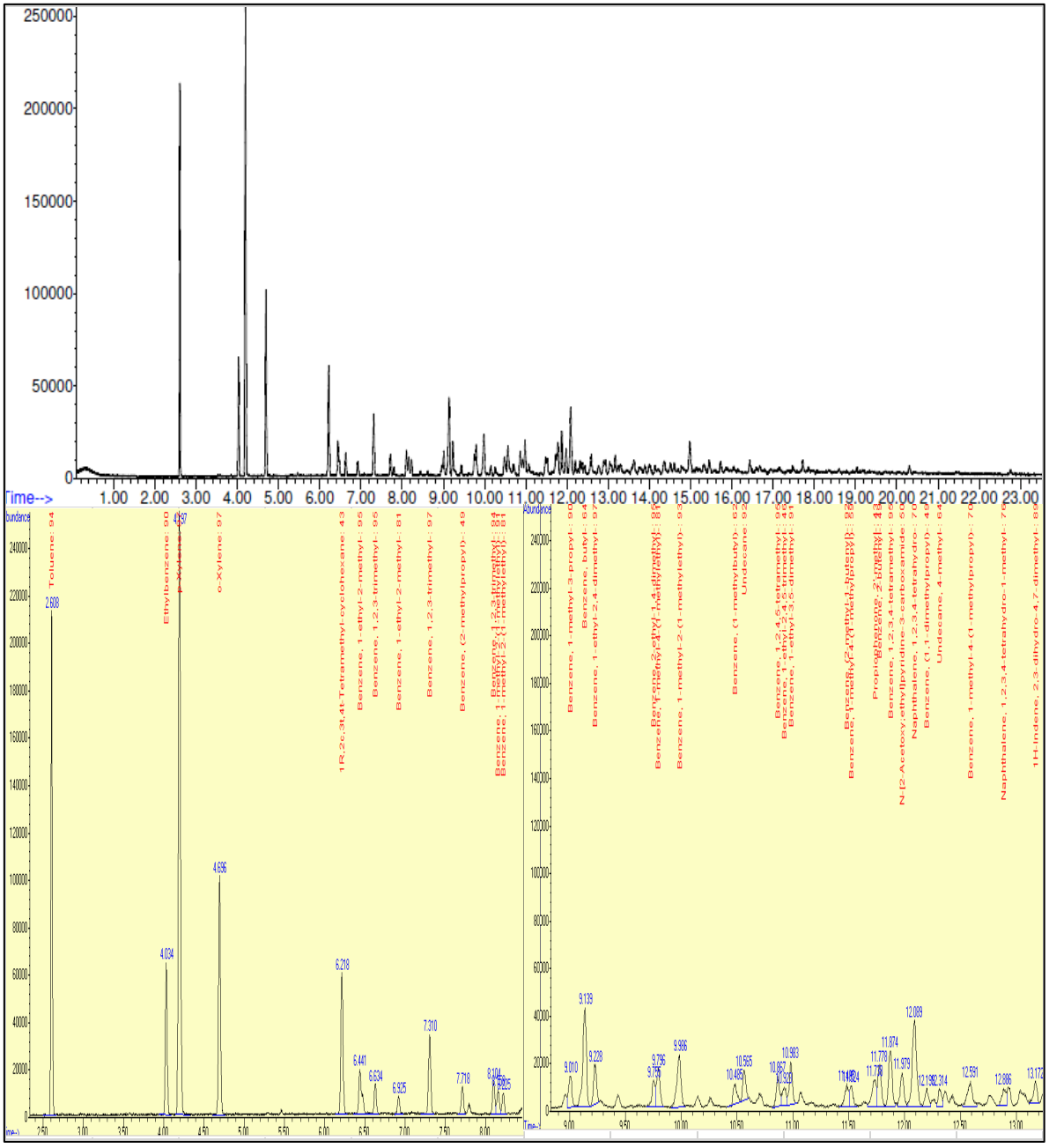
Se utilizó una relación m/z 85 para generar un cromatograma donde se muestren principalmente las parafinas lineales, ramificadas, olefinas y cicloparafinas. En la figura 8 se puede observar que las parafinas lineales están entre octano y heptadecano principalmente, presentando mayor intensidad de señal el undecano. Las parafinas ramificadas presentes en la muestra son en su mayoría mono, di y tri sustituidas con grupos metil.



Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de cromatograma arrojado por el equipo

Figura 8. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z de 85 compuestos parafínicos identificados (0 a 26) minutos

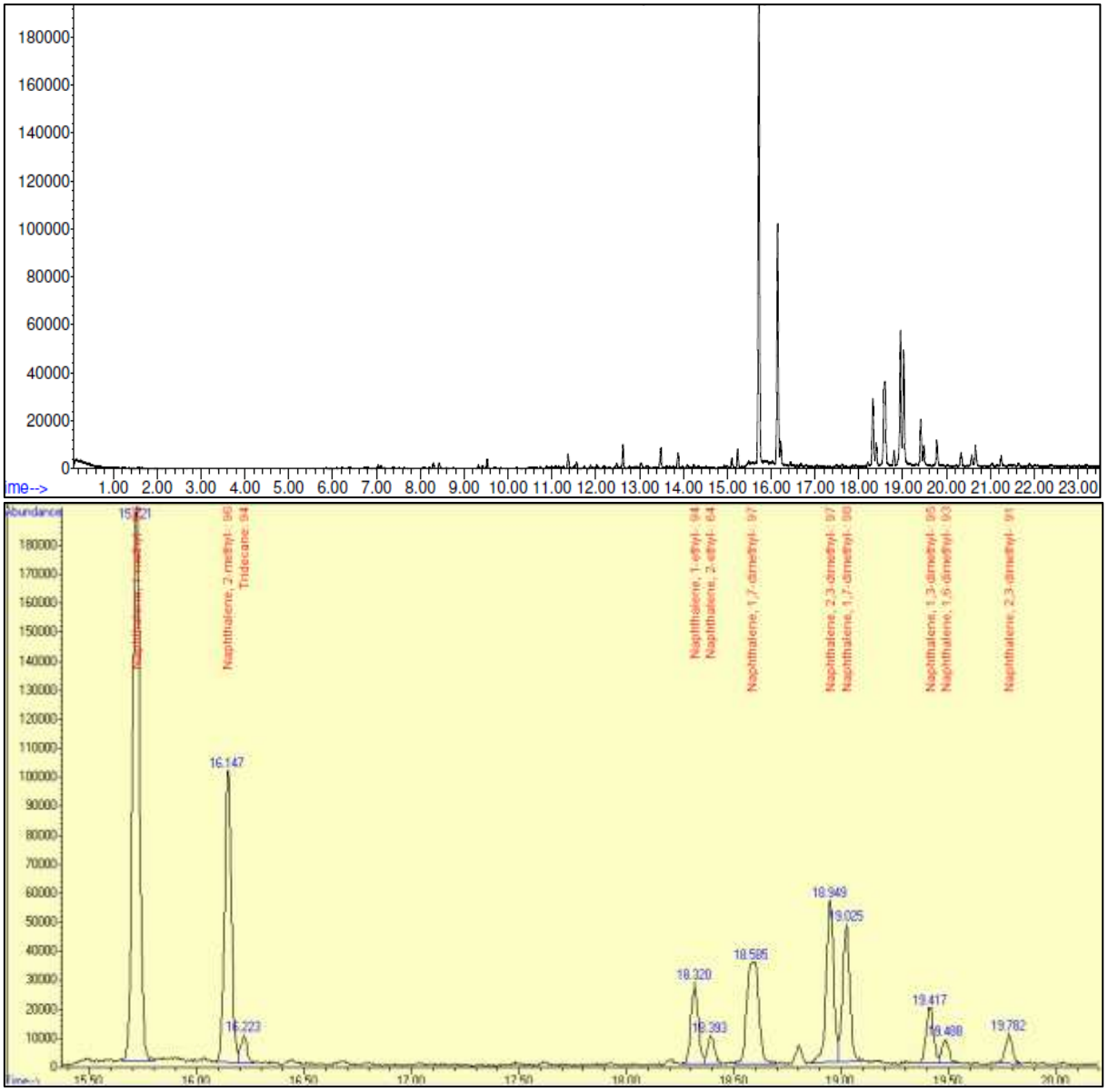
De otro lado para lograr identificar los compuestos alquil bencenos se utilizó la m/z 91, en donde se identifican el tolueno, etilbenceno, o-xileno, p-xileno, m-xileno entre otros. Además, hay presencia de otros compuestos bencénico tri-sustituidos con grupos metil y etil. En la figura 9 se presenta en detalle los cromatogramas.



Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de cromatograma arrojado por el equipo

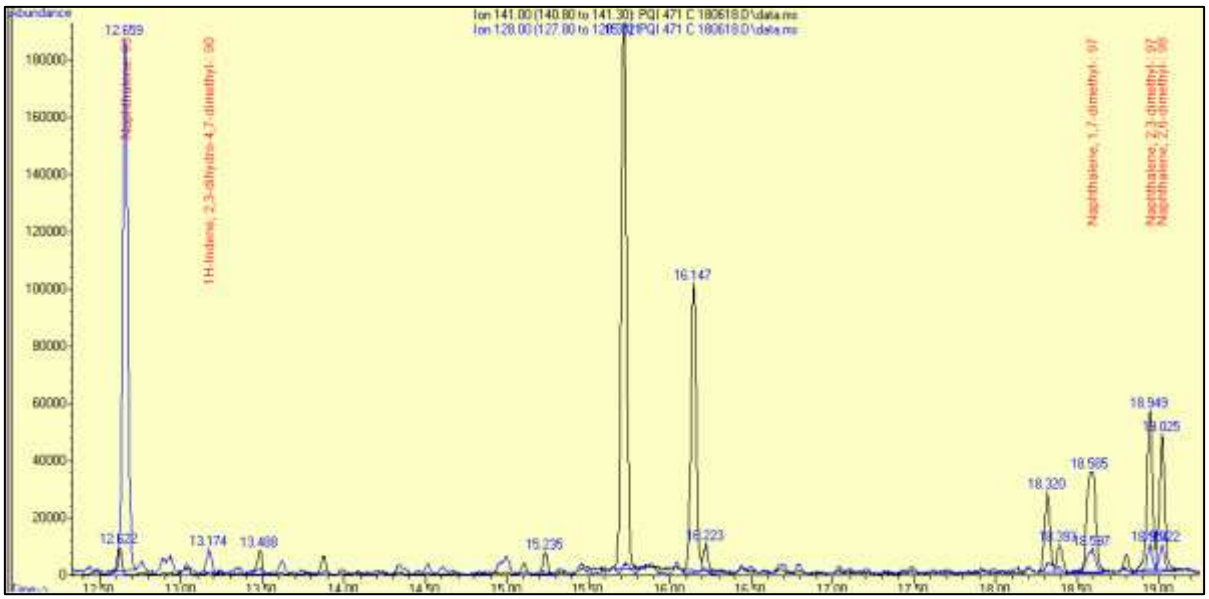
Figura 9. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z de 91 compuestos aromáticos identificados (2 a 14) minutos

Por otra parte, se identificaron compuestos naftalenos con una m/z de 141, los cuales se presentan en la figura 10. En la figura 11 se presentan los cromatogramas de la muestra con las m/z 141 y m/z 128, esta última m/z es para indanos específicamente.



Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de cromatograma arrojado por el equipo

Figura 10. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z de 141 compuestos naftalenos identificados (15 a 20) minutos



Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de cromatograma arrojado por el equipo

Figura 11. Cromatograma para una muestra de Jet A1 con m/z (128 y 141) compuestos naftalenos e indanos identificados (12 a 20) minutos

3.3. CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL COMBUSTIBLE JET A1

La caracterización fisicoquímica del Jet-A1 que se muestra en la tabla 7, se llevó a cabo en dos laboratorios:

- En el Laboratorio de Crudos y Derivados de la Facultad de Minas de la Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín para la medición de las propiedades de calor de combustión, destilación, gravedad API, punto de congelamiento, punto de inflamación y viscosidad cinemática a -20 °C, los cuales son ensayos normatizados ASTM y acreditados por el organismo nacional de acreditación (ONAC) en la Norma NTC ISO/IEC 17025.

- En el laboratorio de Proceso Químicos Industriales de la Sede de Investigación Universitaria de la Universidad de Antioquia se evaluó las propiedades de humedad y temperatura de inicio de cristalización con métodos validados de gran precisión y siguiendo un robusto programa de seguramiento de la validez de los resultados.

Tabla 7. Pruebas de calidad para Jet A1

ANALISIS	NORMA DENSAYO O TECNICA
Calor de combustión	Norma ASTM D 240
Destilación	Norma ASTM D 86
Gravedad API a 60 °F (15,56 °C)	Norma ASTM D 287
Punto de congelamiento	Norma ASTM D 2386
Punto de inflamación (Tag)	Norma ASTM D 56
Viscosidad cinemática -20 °C	Norma ASTM D 445
Temperatura de inicio de cristalización (Tco)	Calorimetría Diferencial de Barrido DSC
Humedad	ISO 12937

Fuente: Elaboración propia

3.3.1. Calor de combustión

El calor de combustión por unidad de masa de combustible es una propiedad crítica de combustibles diseñados para ser usados en máquinas limitadas por su propio peso como aviones, vehículos automotores e hidroaviones. El rango de tales máquinas para el suministro de combustible es función directa del calor de combustión y la densidad del combustible.

El método de prueba estándar para calor de combustión de líquidos hidrocarburos norma ASTM D240 - 19, (ASTM, 2019), cubre la determinación del calor de combustión de combustibles hidrocarburos líquidos en un rango de volatilidad que va desde destilados ligeros hasta combustibles residuales.
Los ensayos fueron realizados con la siguiente instrumentación:

- Bomba calorimetrica marca ICA modelo 5001.
- Balanza Analítica marca Sartorius modelo Cp224s

3.3.2. Destilación

Las características de destilación son un factor crítico tanto en combustibles de aviación como en gasolinas para motores, y afectan el encendido, calentamiento, y la tendencia del vapor a acumularse (encerrarse) a altas temperaturas de operación y/o a grandes alturas. La presencia de componentes con altos puntos de ebullición en estos y otros combustibles puede afectar de manera significativa el grado de formación de depósitos de combustión sólidos.

El método de prueba estándar para destilación de productos del petróleo a presión atmosférica norma ASTM D86 - 19, (ASTM, 2019), cubre la destilación atmosférica de productos del petróleo para determinar de manera cuantitativa los rangos de ebullición de productos tales como destilados ligeros y medianos, combustibles automotrices de ignición por chispa, gasolinas de aviación, combustibles de aviación para turbinas, combustibles diésel de regular y bajo azufre 1-D y 2-D, combustibles volátiles especiales, naftas, combustibles volátiles blancos, querosenos, combustibles con mezclas de biodiesel al 20% o etanol al 10%, combustibles marinos, y combustibles para caldera grados 1 y 2. No es aplicable a productos que contengan cantidades apreciables de material residual.

Los ensayos fueron realizados con la siguiente instrumentación:

- Destilador manual marca Koehler.
- Termómetros ASTM 8C

3.3.3. Gravedad API

Una exacta determinación de la densidad, densidad relativa (gravedad específica) o gravedad API del petróleo crudo y sus productos, es necesaria para la conversión de volúmenes medidos a volúmenes y/o masas a la temperatura de prueba estándar que son los valores con los que está legalmente permitida la venta de productos del petróleo. Cada uno de los productos del petróleo maneja un rango de densidad y gracias a la gravedad API podemos saber de manera rápida y eficaz si el producto está contaminado con otros de mayor o menor densidad, es decir, nos da una primera inspección de la calidad del producto.

El método de prueba estándar para gravedad API de petróleo crudo y productos del petróleo (método de Hidrómetro) de productos del petróleo a presión atmosférica norma ASTM D287 - 19, (ASTM, 2019), cubre la determinación por medio de hidrómetro de vidrio de la gravedad API de petróleo crudo o productos del petróleo normalmente manejados como líquidos y con presión de vapor Reíd (Procedimiento D 323) de 26psi (180KPa) o menor. Las gravedades son determinadas a 60°F (15.56°C), o convertidas a valores a 60°F, por medio de tablas estándar

3.3.4. Punto de congelamiento

El punto de congelamiento de un combustible de aviación es la menor temperatura a la cual el combustible se mantiene libre de cristales de hidrocarburos que pueden restringir el flujo de combustibles a través de los conductos que conforman el sistema de suministro de combustible de la aeronave. La temperatura del combustible en el tanque de la aeronave cae normalmente durante el vuelo

dependiendo de la velocidad, altitud y duración de vuelo. La temperatura de congelamiento del combustible tiene que estar por debajo de la mínima temperatura de operación para evitar riesgos innecesarios durante la operación de vuelo, si esto no se vigila puede resultar en un grave problema.

El método de prueba estándar para punto de congelamiento de combustibles de aviación norma ASTM D2386 - 19, (ASTM, 2019), cubre la determinación de la temperatura bajo la cual, cristales hidrocarburos sólidos se pueden formar en combustibles de turbina (Jet-A1) y en gasolina de aviación.

Los ensayos fueron realizados con la siguiente instrumentación:

- Baño de enfriamiento automático marca Koehler.
- Termómetros ASTM 114C

3.3.5. Punto de inflamación

El punto de inflamación mide la tendencia de la muestra para formar una mezcla inflamable con el aire, bajo condiciones de laboratorio controladas. Esta es solo una de un conjunto de propiedades que deberán ser consideradas para evaluar el potencial explosivo de un material.

El punto de inflamación puede indicar la posible presencia de materiales altamente volátiles e inflamables en materiales relativamente no-volátiles ó no-inflamables. Por ejemplo, un punto de inflamación relativamente bajo en una muestra de combustible Jet puede indicar contaminación con gasolina.

El método de prueba estándar para punto de inflamación por probador de copa cerrada Tag ASTM D56 – 16a, (ASTM, 2016), cubre la determinación del punto de inflamación de líquidos con una viscosidad por debajo de 5.5 cSt a 40 ºC, ó por debajo de 9.5 cSt a 25 ºC y punto de inflamación por debajo de 93ºC.

Los ensayos fueron realizados con la siguiente instrumentación:

- Probador de punto de inflamación manual por copa cerrada Tag marca Koehler.
- Termómetros ASTM 57C

3.3.6. Viscosidad cinemática

Todos los fluidos varían su viscosidad con cambios en temperatura, una apropiada medición de está es esencial para establecer especificaciones de operación para dichos productos, por ejemplo, para flujo de combustibles a través de tuberías,

determinación del rango de temperatura óptimo para la operación adecuada del combustible en calderas.

El método de prueba estándar para viscosidad cinemática de líquidos transparentes y opacos Norma ASTM D445 – 19, (ASTM, 2019), cubre la determinación de la viscosidad cinemática de líquidos opacos y transparentes principalmente Newtonianos en el rango de 0.2 a 300.000 cSt a cualquier temperatura.

Los ensayos fueron realizados con la siguiente instrumentación:

- Baño de enfriamiento automático marca Koehler.
- Termómetro digital RTD marca fluke modelo 1523
- Viscosímetro flujo de rutina tamaño de tubo 100.

3.3.7. Temperatura de inicio de cristalización

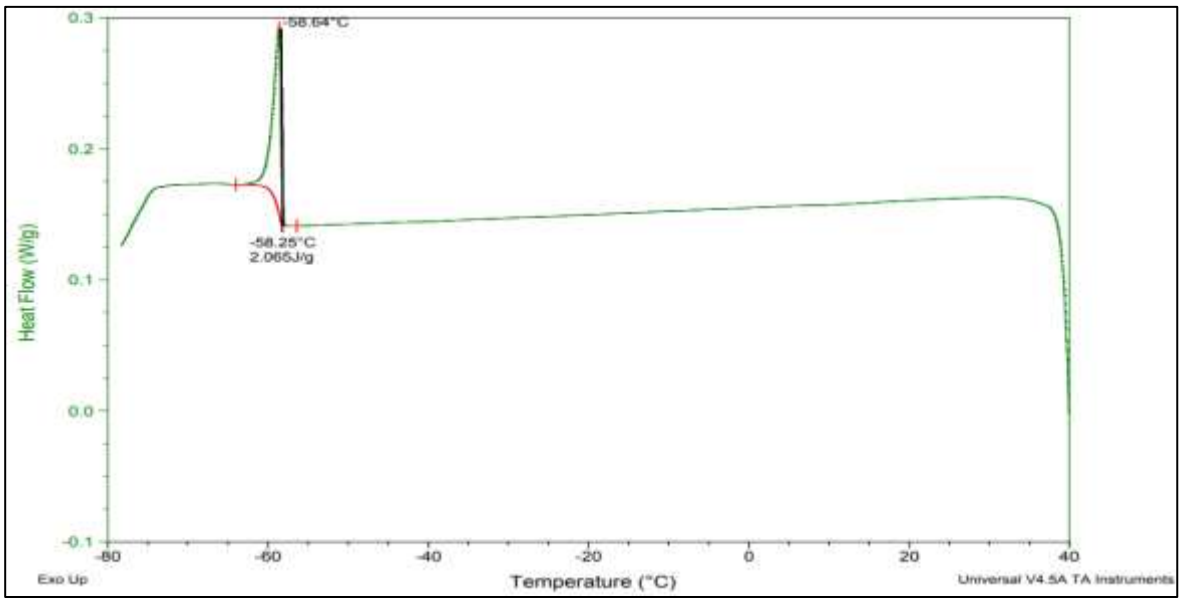
Adicional a estas pruebas existe otra técnica denominada calorimetría diferencial, para la cual se emplea el análisis de termogramas, gráficas de flujo de calor en función de temperatura. De donde se extrae información relacionada con la temperatura de cristalización o fusión (T_{CO}). Ver figura 12.

El método consiste en graficar el calor absorbido en función de la temperatura y analizar el comportamiento de la gráfica para los puntos de inflexión, aumento de pendiente y máximos y mínimos presentados. De cada uno de estos datos se obtiene información relativa a capacidad calorífica, temperatura de cristalización, temperatura de fusión, entre otros datos.

Esta técnica arroja resultados más precisos acerca del inicio de la temperatura de cristalización, ya que la evaluación no se realiza por inspección visual, como en el caso del punto de nube, si no que emplea el análisis gráfico de datos recolectados sistemáticamente. Generalmente el valor en temperatura arrojado por este tipo de análisis es más alto que el arrojado por la evaluación del punto de nube, debido a que la formación de cristales (T_{CO}) se inicia mucho antes de poder ver los cristales

Las muestras se procesaron por duplicado. Para obtener estadísticamente datos de precisión y reproducibilidad. Se utilizó un Calorímetro Diferencial de Barrido marca TA Instrumentos, modelo Q20. El programa de temperatura empleado consistió en una rampa de enfriamiento de 0 °C a -80 °C, a una velocidad de 10 °/min. Típicamente se pesaban (8-10) mg y seguidamente se encapsulaban utilizando cápsulas y tapa de aluminio de sellado hermético.

Previo a los ensayos, el equipo fue calibrado por línea base, y por flujo de calor y temperatura utilizando un estándar de indio puro (Tfusión= 156,6 °C, calor de fusión= 28,71 J/g).



Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de Termograma arrojado por el equipo

Figura 12. Termograma para una muestra de Jet A1

3.3.8. Humedad

El conocimiento del contenido de agua en productos del petróleo es importante en el refinamiento, compra, venta y transferencia de productos. El agua en estos productos puede resultar peligrosa y además restar eficiencia en el proceso mismo de la combustión. Por ejemplo, cuando se presenta agua en el combustible para turbinas (Jet – A1), debido a las bajas temperaturas que alcanzan los aviones cuando están en vuelo, si este contiene agua, se puede congelar obstruyendo los conductos que dan paso al combustible del tanque de almacenamiento a la turbina.

El contenido de humedad se realizó por el Método de valoración coulométrico Karl Fischer, usando como referencia la norma ISO 12937 – 2001 (UNE, 2001) en un equipo Coulómetro 899 de Metrohm

3.4. EFECTO GENERADO EN EL JET A1 POR UN PROCESO DE MEZCLADO CON AGUA

Para verificar el efecto generado en el combustible Jet A1 por un proceso de mezclado con agua, se tuvo como referencia el procedimiento descrito por Lam et al. (Lam et al., 2014) en lo que respecta al tiempo de agitación.

a) Recolección de un lote de combustible Jet A1 garantizado su homogeneidad y estabilidad mediante el almacenamiento en un container de vidrio y en un ambiente de temperatura controlada entre 20 °C a 23 °C. Muestra inicial “Do”
b) Filtrar el combustible Jet A1 para eliminar impurezas y solidos suspendidos.
c) Preparar agua destilada
d) Inicialmente medir un volumen de 500 ml de Jet A1 en un recipiente 1000 ml y someter a agitación durante un tiempo de 16 horas para evaluar el efecto de la humedad del aire. Muestra D1.
e) Medir un volumen de 500 ml de Jet A1 en un recipiente 1000 ml y agregar la concentración de agua a estudiar. Someter la muestra a una agitación durante un periodo de al menos 16 horas hasta alcanzar dilución (la dilución será verificada de forma visual, cuando ya no se observe gotas de agua circulando en el combustible). Asegurar la temperatura controlada entre 20 °C a 23 °C. Muestra D2 en adelante

Las concentraciones de agua para agregar o poner en contacto con el Jet A1, dependerá de pre-ensayos realizados inicialmente para verificar conformidad del producto con la norma NTC 1899 (especificaciones de calidad).

3.4.1. Diseño de experimentos para verificar el efecto contacto agua combustible Jet A1

Se desarrolló la siguiente serie de etapas para establecer el diseño de experimentos adecuado para el estudio.

- **Selección de variables**

Hasta el momento se ha estudiado que el agua puede estar presente en el combustible Jet A1 en las siguientes formas:

- Agua disuelta
- Agua en emulsión
- Agua en estado libre

La cantidad de agua presente en el combustible depende de la solubilidad, y ésta a su vez depende de factores tales como la temperatura, las condiciones del aire del

ambiente, y la composición química del combustible. Se opta por trabajar como variable independiente (variable de entrada) agua disuelta.

Como en este trabajo se pretende evaluar el efecto generado por el contacto agua -combustible en las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1, se concluye entonces que la variable respuesta o de salida a analizar son dichas propiedades.

- **Selección del modelo estadístico**

Las pautas que se tendrán para la selección del modelo son aquellas, que permite obtener un análisis estadístico univariado y multivariado.

- **Realización de pre-ensayos**

Con el fin de verificar el efecto generado por el contacto agua -combustible en las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1, se realizó inicialmente una serie de pre-ensayos variando diferentes concentraciones y tiempo y realizando evaluación de conformidad de las muestras resultantes. En la tabla 8 se presenta algunos de los pre-ensayos realizados.

Tabla 8. Pre-ensayos realizados

PRE-ENSAYO No.	CONCENTRACION DE AGUA (ppm)	TIEMPO (HORAS)	RESULTADO
1	1000	10	*Se observa agua en estado libre. Se separa la fase de combustible Jet A1 y la evaluación de sus propiedades fisicoquímicas salen conformes*
2	1000	12	*Se observa emulsiones de agua.*
3	1000	16	*Se observa agua en completa dilución. La evaluación de sus propiedades fisicoquímicas sale conformes*

4	2000	16	*Se observa agua en completa dilución. La evaluación de sus propiedades fisicoquímicas sale conformes*
5	5000	16	*Se observa emulsiones de agua.*
6	5000	24	*Se observa agua en completa dilución. La evaluación de sus propiedades fisicoquímicas sale conformes*
7	10000	24	*Se observa agua en dilución. La evaluación de sus propiedades fisicoquímicas no sale conformes*

Fuente: Elaboración propia

- **Definición de las variables de operación**

Con base en los resultados obtenidos en los pre-ensayos y aspectos económicos, se decidió evaluar los siguientes niveles de concentración de agua que se muestran a continuación en la tabla 9: El tiempo se define superior a 16 horas hasta observar visualmente que no hay agua en estado libre o emulsión.

Tabla 9. Diseño de experimentos

NIVEL	FACTOR CONCENTRACIÓN DE AGUA (ppm)
Nivel 0	0
Nivel 1	Humedad relativa del aire (10 ppm)
Nivel 2	100
Nivel 3	200
Nivel 4	300
Nivel 5	500

Nivel 6	700
Nivel 7	1000
Nivel 8	2000
Nivel 9	3000
Nivel 10	5000
Nivel 11	10000

Fuente: Elaboración propia

Con el diseño de experimentos planteado (dos replicas), se logra realizar un análisis estadístico univariado y multivariado, el cual se verificó por software libre R versión 3.6.2

3.4.2. Evaluación de conformidad del combustible Jet A1

Para la caracterización fisicoquímica de las muestras resultantes del diseño de experimentos, se evaluó la composición siguiendo la metodología descrita en el numeral 3.2 con la aplicación de la técnica GC-MS y las propiedades descritas en la tabla 7.

En la tabla 10 se presenta las especificaciones de calidad descritas en la norma NTC 1899 (ICONTEC, 2018) que son referencia de la norma ASTM 1655 (ASTM, 2020) para evaluación de conformidad del producto.

Tabla 10. Especificaciones de calidad

Análisis	Unidades	Especificaciones		Precisión	
		Min.	Max.	Reproducibilidad	Incertidumbre
Aromáticos	ml/100ml	-	25	0.0015	0.0011
Calor de combustión	kJ/kg	42.8	-	400	283
Destilación					
10% recobrado	°C	-	205	4,6	3,25
Punto final de ebullición	°C	-	300	5,3	3,75
Gravedad API a 15,56 °C	°API	37	51	0.5	0.35
Punto de inflamación	°C	-	38	4,3	3,039
Punto de congelamiento	°C	-	-47	2.5	1.77
Viscosidad a -20 °C	cSt (mm^2/s)	-	8	0,0950	0,0671

Fuente: Elaboración propia
Nota: Imagen de cromatograma arrojado por el equipo

Los Criterios de evaluación de conformidad a tener en cuenta son.

- **El análisis es conforme:** si el resultado incluida la incertidumbre se encuentra dentro de los valores de las especificaciones de calidad de la normatividad legal vigente.
- **El análisis no es conforme:** si el resultado incluida la incertidumbre no se encuentra dentro de los valores de las especificaciones de calidad de la normatividad legal vigente.
- **Zona de incertidumbre:** si el resultado incluida la incertidumbre, parte se encuentra dentro de los valores de las especificaciones de calidad de la normatividad legal vigente o parte se encuentra por fuera de las especificaciones de calidad de la normatividad legal vigente.

3.5. METODOLOGÍA USADA EN ANALISIS ESTADÍSTICO

El análisis estadístico es el proceso de preparar los datos estadísticos con el fin de interpretarlos mediante su adecuada clasificación, su correcta asociación y su conveniente transformación en cifras relativas tales como: coeficientes, promedios, entre otras. Los datos de este estudio serán interpretados mediante un análisis univariado, un análisis multivariado, análisis de componentes principales, pruebas de bondad ajuste y análisis de regresión.

3.5.1. Análisis Univariado.

Consiste en el análisis de cada una de las variables estudiadas por separado, es decir, el análisis está basado en una sola variable Las técnicas más frecuentes de análisis Univariado son el análisis de las medidas de tendencia central, medidas de variabilidad, gráfico de caja y bigotes y métodos no paramétricos para el análisis de varianza (Montgomery, 2004).

3.5.1.1. Medidas de tendencia central

Tal vez el aspecto más importante del estudio de la distribución de un conjunto de datos es la posición del valor central, esto es, un valor representativo de cómo están

distribuidos los datos. Cualquier medida numérica destinada a representar el centro de un conjunto de datos es llamada una *medida de tendencia central*.

Media: Se conoce también como el promedio simple de los datos y da cuenta alrededor de qué valor oscilan éstos. Una interpretación física de la media es que corresponde al centro de gravedad de los datos.
Si se cuenta con todos los datos de una población finita de tamaño *N*, la *media poblacional* se denota por μ y se calcula como:

$$\mu = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \qquad \textbf{(Ecuación 20)}$$

Debido a que, en ocasiones, resulta muy difícil estudiar todos los miembros de una población, se usa la media muestral como aproximación de la media poblacional. Si se tienen $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ datos de una muestra, la *media muestral c*orresponde a la suma de los datos observados dividida por el número total de observaciones y se denota por $\bar{x}$, donde

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \textbf{(Ecuación 21)}$$

3.5.1.2. Medidas de variabilidad

Las medidas de variabilidad, conocidas también como medidas de dispersión, indican que tan dispersos se encuentran los datos con relación a los demás. Las medidas de variabilidad más usadas son el rango, la varianza, la desviación estándar y el coeficiente de variación.

Al representar una serie de datos por un valor, se presentan desviaciones de los valores reales respecto a su media. Esto motiva el concepto de dispersión de los datos, generado por la variabilidad de estos.

Varianza: La varianza poblacional está definida por

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \mu)^2 \qquad \textbf{(Ecuación 22)}$$

La cual mide las desviaciones al cuadrado respecto a la media y la raíz cuadrada positiva de la varianza es la desviación estándar denotada por σ, que mide el grado de concentración alrededor de la media, en las unidades de las observaciones.

La varianza muestral, denotada por S^2, se calcula como:

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \qquad \textbf{(Ecuación 23)}$$

Coeficiente de Variación: Este coeficiente es útil para decidir si la desviación estándar es baja, alta o aceptable. Es una medida de qué porcentaje de la media es ocupada por la desviación estándar. Se define por:

$$CV = \frac{S}{\bar{x}} * 100\% \qquad \textbf{(Ecuación 24)}$$

También permite comparar observaciones tomadas en unidades diferentes. Siendo más homogéneas aquellas que tengan *CV* más pequeño.

Para una sola muestra, la interpretación del Coeficiente de Variación es:

- Si $CV \leq 30\%$ se puede decir que la desviación estándar no es muy grande y la muestra es homogénea.
- Si $30\% < CV \leq 40\%$ la dispersión en la muestra es moderada.
- Si $CV > 40\%$ la dispersión es elevada.

3.5.1.3. Gráfico de caja de bigotes

Es una gráfica que describe simultáneamente varias características importantes de un conjunto de datos, como el centro, la dispersión, la desviación de la simetría y datos atípicos.

3.5.1.4. Métodos no paramétricos para el análisis de varianza: la prueba Kruskal-Wallis

Es una alternativa no paramétrica para el análisis de la varianza que se aplica en aquellas ocasiones en las que el supuesto de normalidad no se cumple. Esta prueba se usa para probar la hipótesis nula de que los tratamientos no tienen efecto sobre la variable respuesta versus la hipótesis alternativa de que por lo menos uno de los tratamientos si tiene efecto sobre la respuesta. El estadístico de prueba es:

$$H = \frac{1}{S^2}\left[\sum_{i=1}^{a} \frac{R_i^2}{n_i} - \frac{N(N+1)^2}{4}\right] \qquad \textbf{(Ecuación 25)}$$

$$S^2 = \frac{1}{N-1}\left[\sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{n_j} R_{ij}^2 - \frac{N(N+1)^2}{4}\right] \qquad \textbf{(Ecuación 26)}$$

Donde

R_{ij}: son los rangos de los tratamientos
R_i: es la suma de los rangos del tratamiento i-ésimo
S^2: es la varianza de los rangos
N: es el total de datos
n_i: es el número de muestras del tratamiento i-ésimo

Debido a que H se distribuye aproximadamente $\chi^2_{\alpha,a-1}$, entonces sí:

$$H > \chi^2_{\alpha,a-1}$$

Se rechaza la hipótesis nula con un nivel de confianza de $(1-\alpha)\%$.

3.5.2. Análisis Multivariado.

El análisis multivariado es un método estadístico utilizado para determinar la contribución de varios factores en un simple evento o resultado (Rencher and William, 2012). Las técnicas más frecuentes de análisis multivariado son correlaciones, biplot y modelo lineal generalizado.

3.5.2.1. Correlaciones

La correlación mide la dependencia lineal entre un par de variables, acotada entre -1 y +1. La correlación entre dos variables X_i y X_k se calcula como:

$$\rho_{ik} = \frac{\sigma_{ik}}{\sigma_i \sigma_j} \qquad \textbf{(Ecuación 27)}$$

Donde

ρ_{ik}: es el coeficiente de correlación

σ_{ik}: es la covarianza entre X_i y X_k

σ_i: es la desviación estándar de X_i

σ_j: es la desviación estándar de X_k

- Si $\rho_{ik} > 0$ existe una relación lineal positiva entre X_i y X_k, relación lineal directa.
- Si $\rho_{ik} < 0$ existe una relación lineal negativa entre X_i y X_k, relación lineal inversa.
- Si $\rho_{ik} = 0$ No existe una relación lineal entre X_i y X_k, ausencia de relación lineal.

Para el cálculo de la correlación muestral se reemplaza la covarianza poblacional σ_{ik} por la muestral S_{ik} y las desviaciones estándar poblacionales por sus correspondientes muestrales.

La matriz de correlaciones es una matriz cuadrada y simétrica que contiene unos “1” en la diagonal y, fuera de ella las correlaciones.

3.5.2.2. Biplot

Es un gráfico bidimensional que representa una matriz de datos **X** que contiene n observaciones (renglones) y p variables (filas). El biplot muestra un punto para cada vector fila (observaciones) acompañado de un punto para cada una de los vectores columna (variables), los ejes del gráfico son los dos primeros componentes principales calculados a partir de la matriz de covarianzas.

3.5.2.3. Modelo lineal generalizado.

Es un modelo de regresión que unifica modelos lineales y no lineales con variables respuesta que pueden provenir de cualquier distribución de la familia de la exponencial: Normal, Poisson, Binomial, Exponencial y Gamma. Las variables explicatorias (las x's) pueden ser factores categóricos (tratamientos) y/o variables continuas (Montgomery, 2004). La ecuación del modelo es igual al modelo de regresión lineal:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots X_p \beta_p + \varepsilon_i \qquad \textbf{(Ecuación 28)}$$
$$i = 1, 2, \ldots n$$

Donde

Y_i es la variable explicada (respuesta).
X_j son las variables explicatorias.
β_j son los coeficientes que representan los efectos que tiene cada una de las p variables explicatorias en la variable explicada, con β_0 como el intercepto.
n es el número de muestras o unidades de observación.

3.5.3. Análisis de componentes principales (PCA)

El análisis de componentes principales (PCA) es un procedimiento matemático que transforma un conjunto de variables **CORRELACIONADAS** en un conjunto de nuevas variables **NO CORRELACIONADAS** llamadas componentes principales, con el propósito de reducir la dimensión de los datos y facilitar su interpretación y análisis (Rencher and William, 2012).

En el PCA se busca maximizar la varianza de una **combinación lineal** de variables.

Procedimiento:

- Suponga que **X** es un vector aleatorio de dimensión px1 con matriz de varianzas y covarianzas $\mathbf{\Sigma}_{pxp}$ y con valores propios $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_p \geq 0$, entonces:

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{a}_1^T\mathbf{X} = a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \cdots + a_{1p}X_p$$
$$\mathbf{Y}_2 = \mathbf{a}_2^T\mathbf{X} = a_{21}X_1 + a_{22}X_2 + \cdots + a_{2p}X_p$$
$$\cdots$$
$$\mathbf{Y}_p = \mathbf{a}_p^T\mathbf{X} = a_{p1}X_1 + a_{p2}X_2 + \cdots + a_{pp}X_p$$

A=$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \cdots & a_{p1} \\ a_{12} & a_{22} \cdots & a_{p2} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{1p} & a_{2p} \cdots & a_{pp} \end{bmatrix}$

Donde **A** es una matriz ortogonal $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{I}$

- **Propiedades de las componentes principales**

$\mathbf{Y}_1$ es la primera componente principal que maximiza la $var(\mathbf{Y}_1)$
$\mathbf{Y}_2$ es la segunda componente principal que maximiza la $var(\mathbf{Y}_2)$

$var(\mathbf{Y}_i) = \mathbf{a}_i^T \sum \mathbf{a}_i$ **(Ecuación 29)**
$Cov(\mathbf{Y}_i, \mathbf{Y}_k\ ) = \mathbf{a}_i^T \sum \mathbf{a}_k$ **(Ecuación 30)**
$\mathbf{\Sigma_Y} = \mathbf{A\Sigma_X A}$ **(Ecuación 31)**

- **Determinación de los componentes principales**

Sea **Σ** la matriz de varianzas y covarianzas de **X** y suponga que tiene las parejas de valores y vectores propios:

$$(\lambda_1, \boldsymbol{c}_1); (\lambda_2, \boldsymbol{c}_2); \ldots; (\lambda_p, \boldsymbol{c}_p)$$

Donde

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_p \geq 0$$

Entonces la i-ésima componente principal está dada por:

$\mathbf{Y}_i = \mathbf{c}_i^T\mathbf{X} = c_{i1}X_1 + c_{i2}X_2 + \cdots + c_{ip}X_p$ **(Ecuación 32)**

Donde:

$$var(\mathbf{Y}_i) = \mathbf{c}_i^T \sum \mathbf{c}_i = \lambda_i$$
$$Cov(\mathbf{Y}_i, \mathbf{Y}_k) = \mathbf{c}_i^T \sum \mathbf{c}_k = 0$$
$$Varianza\ total = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \cdots + \sigma_{pp} = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_p$$

La proporción de varianza que abarca (resume) la k-ésima componente principal está dada por:

$$Proporción\ (\mathbf{Y}_k) = \frac{\lambda_k}{\sum \lambda_i}$$ **(Ecuación 33)**

La correlación entre $\mathbf{Y}_i, \mathbf{X}_k$:

$$Corr(\mathbf{Y}_i, \mathbf{X}_k) = \frac{\mathbf{c}_{ik}\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}$$ **(Ecuación 34)**

3.5.4. Pruebas de bondad de ajuste

Las pruebas de bondad de ajuste constituyen una prueba de hipótesis en tanto que no se sabe cuál es la distribución de la población de la cual provienen los datos y se desea probar si provienen de una distribución particular. Existen muchas técnicas para probar el ajuste de un conjunto de datos a una distribución particular, a continuación, se mostrará la basada en la distribución ji-cuadrada y La prueba Kolmogorov-Smirnov.

Distribución ji-cuadrada

- Se toma una muestra aleatoria de tamaño *n*, con ellas se realiza un histograma de frecuencias con *k* intervalos de clase, donde O_i denota la frecuencia observada en el intervalo *i*.
- Se calcula la frecuencia esperada E_i del i-ésimo intervalo de clase partiendo de la distribución a la cual se espera se ajusten los datos
- El estadístico de prueba es:

$$\chi_0^2 = \sum_{i=1}^{k} \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}$$ **(Ecuación 35)**

$$con \qquad \chi_0^2 \sim \chi_{k-p-1}^2$$

Donde

p es el número de parámetros de la distribución a la que se cree se aproximan los datos. Debe rechazarse que los datos provienen de la distribución propuesta si:

$\chi_0^2 > \chi_{\alpha,k-p-1}^2$.

Sin embargo, la prueba basada en la distribución ji-cuadrada, no presenta buen desempeño cuando para datos continuos. En este caso resulta de mayor utilidad la prueba Kolmogorov-Smirnov o la prueba JacqueBera en el caso de la distribución normal.

La prueba Kolmogorov-Smirnov

Es una prueba no paramétrica que, generalmente, es más eficiente que la ji-cuadrada para muestras pequeñas y puede ser usada donde ésta última no aplica.

Esta prueba es basada en la máxima diferencia absoluta D entre los valores de la distribución acumulada de una muestra aleatoria de tamaño n y una distribución teórica específica. Para determinar cuál diferencia es mayor de lo que puede ser razonable esperar, se busca el valor crítico de D en la tabla “Test Kolmogorov-Smirnov sobre bondad de ajuste”.

El estadístico de prueba es

$$D = sup_{1 \leq i \leq n} \left| \hat{F}_n(x_i) - F_0(x_i) \right| \qquad \textbf{(Ecuación 36)}$$

Donde

x_i es el i-esimo valor de la muestra, siempre y cuando los datos estén ordenados de menor a mayor

$\hat{F}_n(x_i)$ es un estimador de la probabilidad de observar valores menores o iguales a x_i

$F_0(x_i)$ es la probabilidad de observar valores menores o iguales a x_i bajo la distribución a la que se cree se aproximan los datos.

Así que,

$$D^+ = máx_{1 \leq i \leq n}\{\frac{i}{n} - F_0(x_i)\}$$
$$D^- = máx_{1 \leq i \leq n}\{F_0(x_i) - \frac{i-1}{n}\}$$

Se calcula:

$$D = máx\{D^+, D^-\}$$

Por tanto, D es la mayor diferencia observada entre la frecuencia acumulada observada $\hat{F}_n(x_i)$ y la frecuencia acumulada teórica. El criterio para rechazar H_0 es:

$$Rechace\ H_0\ si\ D > D_\alpha$$

Con el criterio de valor p,

$$Rechace\ H_0\ si\ valor\ p < \alpha$$

3.5.5. Análisis de regresión.

Para los casos en los cuales el comportamiento de la variable respuesta requiere ser explicado por más de una variable explicatoria o de entrada, existe el análisis de regresión múltiple (Gujarati and Porter, 2009).

Un modelo de regresión múltiple sería:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_p X_p + \varepsilon \qquad \textbf{(Ecuación 37)}$$

Donde:

$\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$: Son los parámetros del modelo a estimar y son llamados los coeficientes del modelo de regresión;
ε: Es el término estocástico o error aleatorio, contiene la información de todas las variables que no se incluyeron de manera individual en el modelo, pero que, en conjunto, inciden en Y;

$X_1, X_2, \ldots, X_p$: son las variables explicatorias, las cuales en principio son variables matemáticas fijas y con error de medición cero.

Y: es la variable respuesta, la que es además aleatoria dado que es función de la variable aleatoria ε.

3.5.5.1. Interpretación de los coeficientes de regresión

Un coeficiente de regresión $\hat{\beta}_j$, se interpreta como la estimación del cambio promedio en la variable respuesta Y ante un cambio unitario en X_j, siempre y cuando las demás variables permanezcan constantes. Así:

Partiendo del modelo de regression:

$$\begin{aligned} E\left[\hat{\beta}_j\right] &= E[Y/X_i = x_i \ \ \forall\, i \neq j,\, X_j = x_j + 1] - E[Y/X_i = x_i \,\forall\, i \neq j,\, X_j = x_j] \\ &= \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots \beta_j\left(x_j + 1\right) + \cdots + \beta_p x_p \\ &= \left(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots \beta_j x_j + \cdots + \beta_p x_p\right) = \beta_j \end{aligned}$$

$$x_i \ constantes \ (i \neq j)$$

No debe interpretarse $\hat{\beta}_0$ como la estimación del valor esperado de Y cuando todas las variables de entrada toman valor cero, si éstas no tienen incluido en su recorrido dicho valor, por la falta de sentido práctico a que se puede llegar con tal interpretación.

NOTA: El modelo de regresión lineal, es denominado así porque es lineal en los parámetros, pero puede no serlo en las variables. Ser lineal en los parámetros

significa que los exponentes de los coeficientes de regresión son uno y no aparecen ni multiplicados ni divididos entre sí.

3.5.5.2. Análisis de Varianza (ANOVA)

El análisis de varianza (ANOVA) en la regresión, se hace con el fin de descomponer la varianza total en sus fuentes de variación. Si se tiene un modelo de regresión múltiple, se deben estimar p+1 parámetros, debido a las p variables explicatorias. Las sumas de cuadrados y los cuadrados medios se calculan:

$$SS_T = \mathbf{Y^tY} - n\bar{y}^2$$

$$SS_R = \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\mathbf{t}}\mathbf{X^tY} - n\bar{y}^2$$
$$SS_E = SS_T - SS_R = \mathbf{Y^tY} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\mathbf{t}}\mathbf{X^tY}$$

Puede mostrarse que:

$$SS_E = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \mathbf{ee}^{\mathrm{t}} = (\mathbf{Y} - \widehat{\mathbf{Y}})^{\mathrm{t}}\left(\mathbf{Y} - \widehat{\mathbf{Y}}\right) = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}})^{\mathrm{t}}\left(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}\right) = \mathbf{Y}^{\mathrm{t}}\mathbf{Y} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\mathrm{t}}\mathbf{X}^{\mathrm{t}}\mathbf{Y}$$

La tabla ANOVA de la regresión se construye en la Tabla 11.

Tabla 11. Tabla ANOVA para la Regresión Lineal

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Suma de cuadrados Medios	Estadístico F
Debido a la regresión	SS_R	p	$MSR = \frac{SS_R}{p}$	$\frac{MSR}{MSE}$
Error	$SS_E = SS_T - SS_R$	$n - p - 1$	$MSE = \frac{SS_E}{n - p - 1}$	
Total	SS_T	$n - 1$		

Fuente: Elaboración propia

Con la Tabla ANOVA se prueba la existencia de un modelo de regresión para el conjunto de datos dado, se conoce como la prueba global y las hipótesis son:

$$H_0: \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$$

$$H_1: \boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}$$

Si

$$Rechace\ H_0\ si\ F_{estadístico} > F_{\frac{\alpha}{2},p,n-p-1}$$

O en términos del valor p:

$$Rechace\ H_0\ si\ valor\ p < \alpha$$

Si se rechaza H_0 implica que, sí existe un modelo de regresión lineal para el conjunto de datos dado, en caso contrario, un modelo de regresión lineal no es adecuado para el conjunto de datos.

3.5.5.3. El coeficiente de determinación R^2

Es una medida de que tan "bueno" es el ajuste del modelo de regresión a los datos. En porcentaje, mide la bondad del ajuste porcentual del modelo, se define como:

$$R^2 = \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} - n\bar{y}^2}{\mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} - n\bar{y}^2} = \frac{SS_R}{SS_T} \qquad \textbf{(Ecuación 38)}$$

Así que, $R^2\% = R^2 * 100\%$

Se debe tener especial cuidado con esta medida de ajuste, en principio, cuando R^2 está más cerca del 1, se tiene mejor modelo.

3.5.5.4. Validación de supuestos

Los supuestos del modelo de regresión son:

- El modelo de regresión es lineal en los parámetros.
- No existencia de colinealidad entre las Xs: No existencia de Multicolinealidad
- El error y las Xs no están correlacionadas, es decir:

$$Cov(\varepsilon_i, X_{ki}) = 0$$

Para

$i = 1,2, \dots, n$
$k = 1,2, \dots, p$

- El valor esperado de las pertubaciones es cero:

$E(\varepsilon_i / \forall X_i) = 0$

- La varianza de los errores permanece constante: Homoscedasticidad

$Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$

- No existencia de autocorrelación entre los residuales

$Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$
$para\ i \neq j$

- El número de observaciones *n* debe ser mayor que el número de parámetros a estimar
- Las X_s deben presentar variación
- No debe existir sesgo en la especificación del modelo: El modelo debe estar bien especificado

3.5.5.5. Software

Todos los cálculos, tablas y gráficas estadísticas fueron desarrollados en el software libre R versión 3.6.2.

3.6. MEDICIÓN DE LA EXACTITUD DE LOS MODELOS

Es necesario comprobar que las relaciones propiedad composición se comportan de manera adecuada y los valores obtenidos son similares a los medidos experimentalmente. Para este caso se hace uso de los procedimientos estadísticos basados en las magnitudes de los errores.

3.6.1. Error del pronostico

El comportamiento deseable en los errores del pronóstico es el siguiente:

- **Independencia:** los errores son aleatorios a lo largo del tiempo, no presentan ningún tipo de patrón, no tienen rachas y no tienen un comportamiento periódico.
- **Homocedasticidad:** la varianza de los errores a lo largo del tiempo permanece constante.
- **Media cero:** el valor esperado de los errores a lo largo del tiempo deber ser igual cero.

Error individual:

$$\boldsymbol{\varepsilon_i = V_{teórico,i} - V_{experimental,i}}$$ **(Ecuación 39)**

Donde

$\boldsymbol{V_{teórico,i}}$	valor pronosticado de la variable
$\boldsymbol{V_{experimental,i}}$	valor experimental observado
$\boldsymbol{\varepsilon_i}$	error individual

Error absoluto promedio (MAD):

$$MAD = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|\varepsilon_i|$$ **(Ecuación 40)**

Error cuadrático medio (MSE):

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i^2$$ **(Ecuación 41)**

Error absoluto porcentual promedio (MAPE):

$$MAPE = \frac{100}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{\varepsilon_i}{V_{experimental,i}}\right|$$ **(Ecuación 42)**

Raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE):

$$RMSE = \sqrt{MSE}$$ **(Ecuación 42)**

3.6.2. Comparación con un programa de pruebas de aptitud

El programa de pruebas de aptitud para el combustible de aviación Jet A ofrecido por ASTM, sirve como una herramienta de garantía de calidad estadística que permite comparar los resultados obtenidos.

Los resultados de las pruebas de aptitud se utilizarán como herramienta de medición de exactitud de los resultados que arrojan las relaciones propiedad composición. En la tabla 12, se especifica la información de las muestras y el programa en el que fueron evaluadas:

Tabla 12. Programa de pruebas de aptitud

Identificación de la muestra	Programa de participación
ASTM JF1711 (M27)	Noviembre de 2017
ASTM JF1811 (M59)	Noviembre de 2018

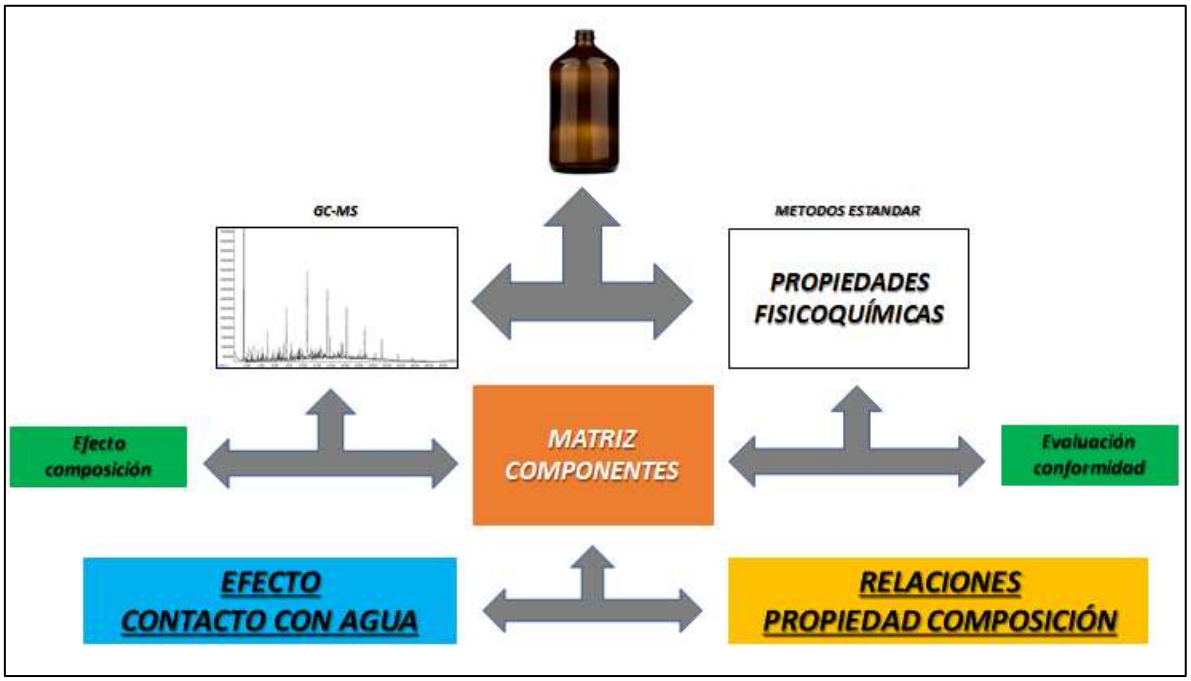
Fuente: elaboración propia

4. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

Los resultados y el análisis de resultados son presentados de forma similar al desarrollo presentado en el capítulo 3.

- Evaluación experimental del combustible Jet A1 en lo que respecta a su muestreo, composición y propiedades fisicoquímicas.
- Evaluación del efecto generado por el contacto de agua con el combustible Jet A1.
- Una evaluación teórica sobre las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1

En la figura 13 se presenta un esquema en la forma en que se encuentra distribuidos los resultados.



Fuente: elaboración propia

Figura 13. Esquema de resultados

4.1. EVALUACIÓN EXPERIMENTAL DEL COMBUSTIBLE JET A1

La evaluación experimental del combustible Jet A1 será presentada de la siguiente forma:

- Evaluación de la composición
- Caracterización fisicoquímica y evaluación de la conformidad.
- Análisis estadístico
- Efecto de la composición en las propiedades fisicoquímicas

4.1.1. Evaluación de la composición

La aplicación de la metodología desarrollada en el numeral 3.2. para determinar la composición del combustible Jet A1 mediante la aplicación de la técnica GC-MS permite obtener las siguientes clases de hidrocarburos. Ver tabla 13.

Tabla 13. Clases de hidrocarburos identificadas por GC-MS

Clase de hidrocarburo	Descripción
Parafínicos	Parafínicos normales e isoparafinas
Nafténicos	nafténicos ,alquilnaftenicos y olefinas
Aromáticos	Bencenos, alquilbencenos, aromáticos y alquilaromaticos
Naftalenos	Naftalenos y alquilnaftalenos
Tetralinas e Indanos	Tetralinas, indanos

Fuente: elaboración propia

En la tabla 14 se presenta los valores totales de cada clase de hidrocarburos. Se puede observar que en promedio se presentan en mayor cantidad los compuestos parafínicos con un valor de 67.85 % masa promedio, seguido de los compuestos nafténicos (15.12 % masa promedio), aromáticos (11.86 % masa promedio), naftalenos (3.90 % masa promedio) y finalmente los compuestos indanos y tetralinas con un valor promedio de 1.27 % masa.

Tabla 14. Valores totales por clase de hidrocarburos (% masa)

Muestra	PT	CT	AT	NT	IT
M1	64,70	18,46	11,41	4,53	0,89
M2	66,82	16,49	11,48	4,45	0,77
M3	69,10	15,68	9,66	4,30	1,26
M4	63,07	17,67	13,70	3,95	1,62
M5	65,55	16,13	11,37	5,51	1,44

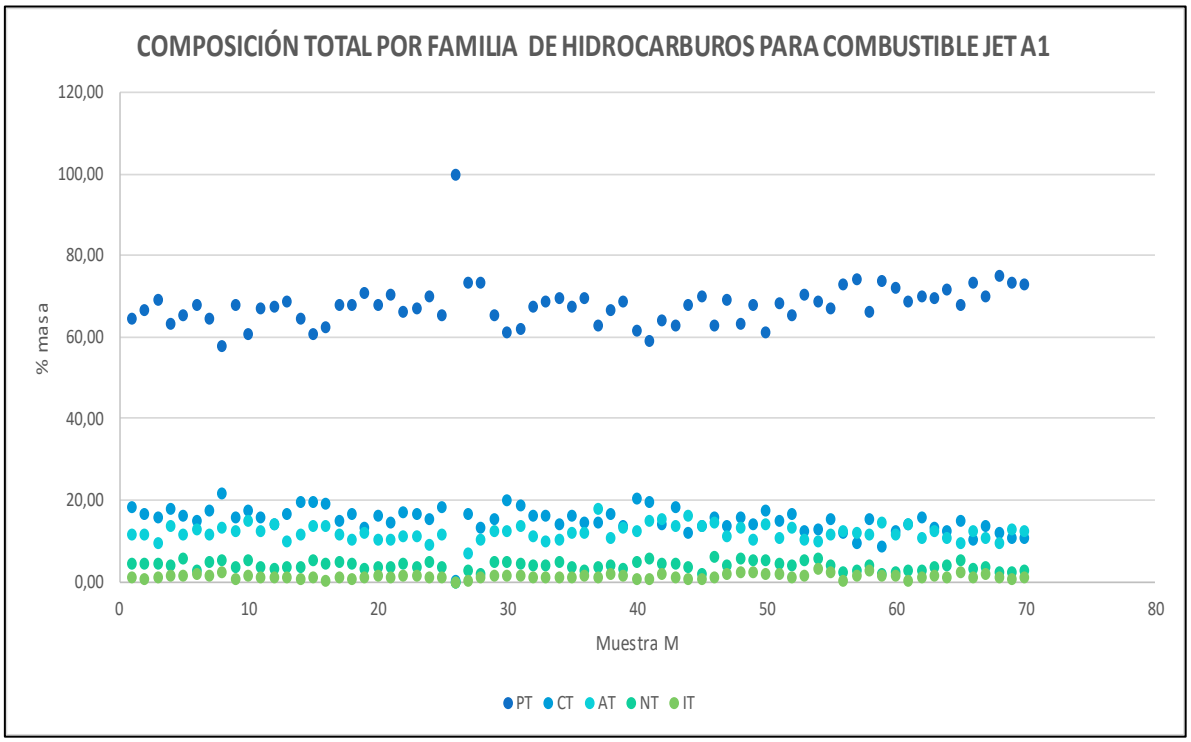
Muestra	PT	CT	AT	NT	IT
M6	67,87	14,73	12,67	2,94	1,79
M7	64,44	17,48	11,59	5,01	1,48
M8	57,67	21,60	13,36	5,10	2,28
M9	67,72	15,80	12,27	3,45	0,75
M10	60,57	17,50	14,92	5,46	1,54
M11	66,89	15,88	12,59	3,57	1,07
M12	67,49	14,28	14,00	3,30	0,93
M13	68,61	16,75	9,92	3,63	1,08
M14	64,44	19,37	11,62	3,78	0,79
M15	60,63	19,53	13,48	5,35	1,00
M16	62,46	18,94	13,75	4,45	0,40
M17	67,73	15,09	11,36	4,68	1,14
M18	67,96	16,45	10,32	4,45	0,83
M19	70,75	13,22	11,84	3,18	1,02
M20	68,06	16,40	10,40	3,78	1,36
M21	70,38	14,71	10,12	3,63	1,16
M22	66,31	17,04	11,02	4,35	1,28
M23	67,03	16,73	11,09	3,53	1,62
M24	69,86	15,30	9,22	4,74	0,87
M25	65,49	18,22	11,43	3,78	1,07
M26	99,65	0,35	0,00	0,00	0,00
M27	73,45	16,46	7,13	2,55	0,40
M28	73,34	13,06	10,51	2,03	1,05
M29	65,33	15,51	12,61	5,00	1,55
M30	61,35	20,01	12,27	4,70	1,67
M31	61,96	18,86	13,48	4,22	1,48
M32	67,67	16,09	11,30	3,88	1,07
M33	68,82	16,36	9,75	3,94	1,13
M34	69,50	14,16	10,38	4,71	1,26
M35	67,40	15,98	12,18	3,42	1,02
M36	69,71	14,30	11,93	2,75	1,31
M37	62,83	14,52	17,74	3,78	1,14
M38	66,62	16,81	10,58	4,05	1,94
M39	68,85	13,84	13,05	2,96	1,30
M40	61,58	20,19	12,58	4,93	0,72
M41	59,21	19,55	14,81	5,85	0,57
M42	64,08	14,25	15,54	4,39	1,73
M43	62,65	18,34	13,50	4,50	1,00

Muestra	PT	CT	AT	NT	IT
M44	67,78	11,85	16,10	3,76	0,51
M45	70,04	13,83	13,76	1,93	0,44
M46	62,65	15,92	14,32	6,17	0,93
M47	69,29	13,55	11,12	4,08	1,96
M48	63,19	15,81	13,12	5,78	2,10
M49	68,10	14,22	10,27	5,11	2,30
M50	61,27	17,60	13,94	5,43	1,76
M51	68,30	14,87	10,76	4,24	1,83
M52	65,40	16,51	13,37	3,83	0,88
M53	70,52	12,53	10,38	5,10	1,47
M54	68,53	12,64	9,87	5,85	3,10
M55	66,93	15,21	11,47	3,88	2,51
M56	73,13	12,06	12,44	2,13	0,24
M57	74,19	9,41	12,12	2,67	1,61
M58	66,27	15,37	11,60	3,97	2,79
M59	73,59	8,56	14,64	1,90	1,32
M60	72,02	12,41	11,65	2,44	1,47
M61	68,83	13,97	13,96	2,92	0,33
M62	69,92	15,87	10,63	2,56	1,02
M63	69,60	13,39	12,22	3,50	1,29
M64	71,61	12,48	10,71	4,00	1,20
M65	67,69	15,01	9,61	5,22	2,48
M66	73,34	10,13	12,41	3,01	1,11
M67	70,05	13,82	10,76	3,49	1,87
M68	75,08	11,97	9,56	2,45	0,93
M69	73,30	10,68	12,96	2,33	0,72
M70	73,13	10,66	12,47	2,63	1,11
Promedio	**67,85**	**15,12**	**11,86**	**3,90**	**1,27**
Desviación Estándar	**5,49**	**3,19**	**2,30**	**1,15**	**0,60**
Valor Máximo	**99,65**	**21,60**	**17,74**	**6,17**	**3,10**
Valor Mínimo	**57,67**	**0,35**	**0,00**	**0,00**	**0,00**

Fuente: elaboración propia

En la figura 14 se puede observar el comportamiento de las distintas clases de hidrocarburos presentes en la base muestras recolectadas. Sobresale los compuestos parafínicos con una variación entre 57.67 “% y 99.65 % masa. Este último valor tan alto lo presenta una muestra recolectada en Estados Unidos de América (M26) y que al parecer es una muestra sintética. El comportamiento

presentado por los compuestos nafténicos y aromáticos es similar con muestras que en algunos casos presentan valores más altos de compuestos aromáticos que nafténicos y viceversa. Los valores de % masa de los compuestos naftalenos siempre son mayores que los compuestos indanos y tetralinas a excepción de la muestra M26 que carece de estos compuestos. En general se puede decir que las clases de hidrocarburos encontrados, el comportamiento de los resultados sigue una tendencia, indicando que hay un control en la producción de este combustible de aviación en Colombia. Los valores máximos y mínimos encontrados para cada clase de hidrocarburos indica que hay variación en la composición, aspecto esencial para evaluar el efecto de la composición en las propiedades fisicoquímicas.



Fuente: elaboración propia

Figura 14. Composición del Jet A1 por clase de hidrocarburo

A continuación, se presenta una evaluación por componentes principales de acuerdo con el tipo de clase de hidrocarburos presentes. Los componentes principales seran considerados aquellos que se presentan mínimo en el 50% de las muestras y/o con una composición superior al 35% masa. Para la clase de hidrocarburos tetralinas e indanos no se realiza una evaluación de componentes principales debido a la pequeña cantidad en que están presentes y, aun así, se observa múltiples componentes de este tipo.

4.1.1.1. Evaluación de componentes principales parafínicos

En la figura 15 se puede ver que hay 20 componentes que cumplen con el requisito anterior, destacándose los componentes P11, P14, P17 y P18 con los valores promedios más altos (4.07, 6.03, 5.58 y 3.99) % masa y una desviación estándar (1.31, 1.65, 1.24 y 0.80) % masa. Los componentes donde se observa una dispersión de datos amplia, radican en los componentes P2, P3, P6 y P9 con valores promedio de (0.14, 0,73, 0.58 y 0.49) % masa y desviación estándar de (0.16, 0.46, 0.42 y 0.50) % masa. Especialmente se observa que en los componentes P2 y P9 la desviación estándar supera al valor promedio. Entendiendo que los componentes con mayor desviación estándar presentan mayor variación en su composición por componente.

4.1.1.2. Evaluación de componentes principales nafténicos

En la figura 16 se puede ver que hay 10 componentes con alto nivel de presencia en las muestras, destacándose los componentes C5 y C6 con los valores promedios más altos (0.76 y 0.72) % masa y una desviación estándar (0.3 y 0.54) % masa. Los componentes C3, C8 y C9 presentan una desviación estándar amplia (0.33, 0.33 y 0.14) % masa en comparación con los valores promedios que presentan (0.62, 0.61, 0.21) % masa.

4.1.1.3. Evaluación de componentes principales aromáticos

Con un análisis similar al anterior se puede ver en la figura 17 que hay 7 componentes aromáticos, de los cuales sobresalen los componentes A1, A6 y A7 por mayor cantidad promedio en sus componentes (0.77, 0.49 y 0.52) % masa y desviación estándar (0.49, 0.46 y 0.32) % masa. La desviación estándar de los componentes A2 y A3 (0,33 y 0,17) % masa y su valor promedio (0.48 y 0.17) % masa sobresale comparado con los otros componentes. Esto indica una mayor dispersión en la composición en comparación con los valores promedios. Una excepción se presenta con el componente A6.

4.1.1.4. Evaluación de componentes principales naftalenos

En la figura 18 se puede ver que hay 4 componentes con alto nivel de presencia en las muestras, destacándose los componentes N2 y N3 con los valores promedios más altos (0.32 y 0.51) % masa y una desviación estándar (0.16 y 0.49) % masa.

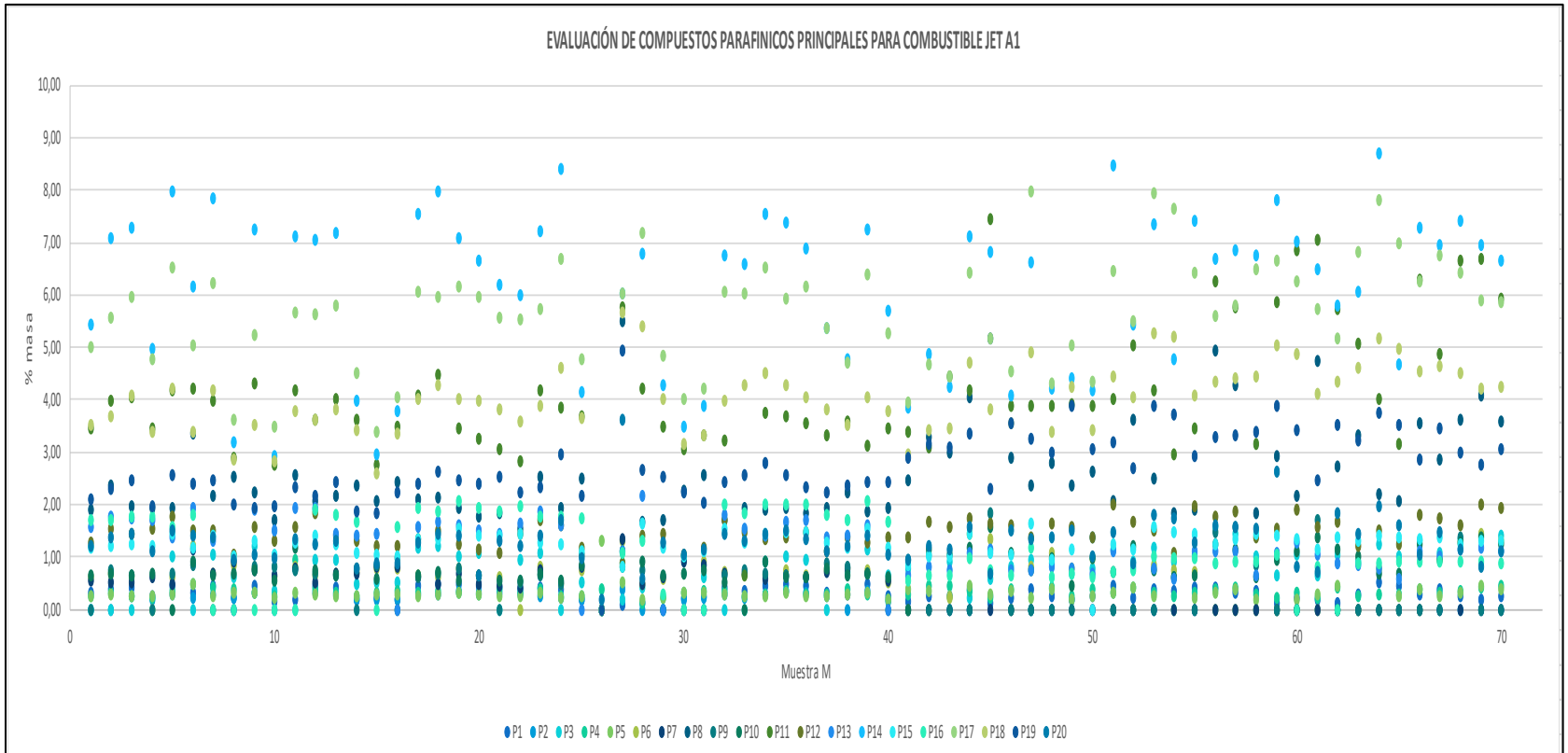
En los componentes N3 y N4 se observa mayor dispersión de datos.

De las figuras 15, 16 17 y 18 se puede concluir:

- Los componentes parafínicos P11, P14, P17 y P18 presentan los valores promedios más altos en composición.
- Los componentes parafínicos donde se observa una variación alta en la composición radican en los componentes P2, P3, P6 y P9, especialmente se observa que en los componentes P2 y P9 la desviación estándar supera al valor promedio, indicando una composición de mayor variación en las muestras.
- Los componentes nafténicos C5 y C6 presentan los valores promedios más altos, mientras que en los componentes C3, C8 y C9 se observa una composición más cambiante.
- Los componentes aromáticos A1, A6 y A7 presentan por los valores promedios más altos en composición mayor, pero a nivel de cambios en el comportamiento de la composición, sobresalen los componentes A2 y A3.
- En la familia de compuestos naftalenos hay 4 componentes con alto nivel de presencia en las muestras, destacándose los componentes N2 y N3 con los valores promedios más altos y un comportamiento más variable en los componentes N3 y N4

El análisis teórico, estadístico y de evaluación de conformidad en las propiedades fisicoquímicas de las muestras de Jet A1, son herramientas adicionales que permitirán verificar el efecto de sus componentes principales en dichas propiedades.

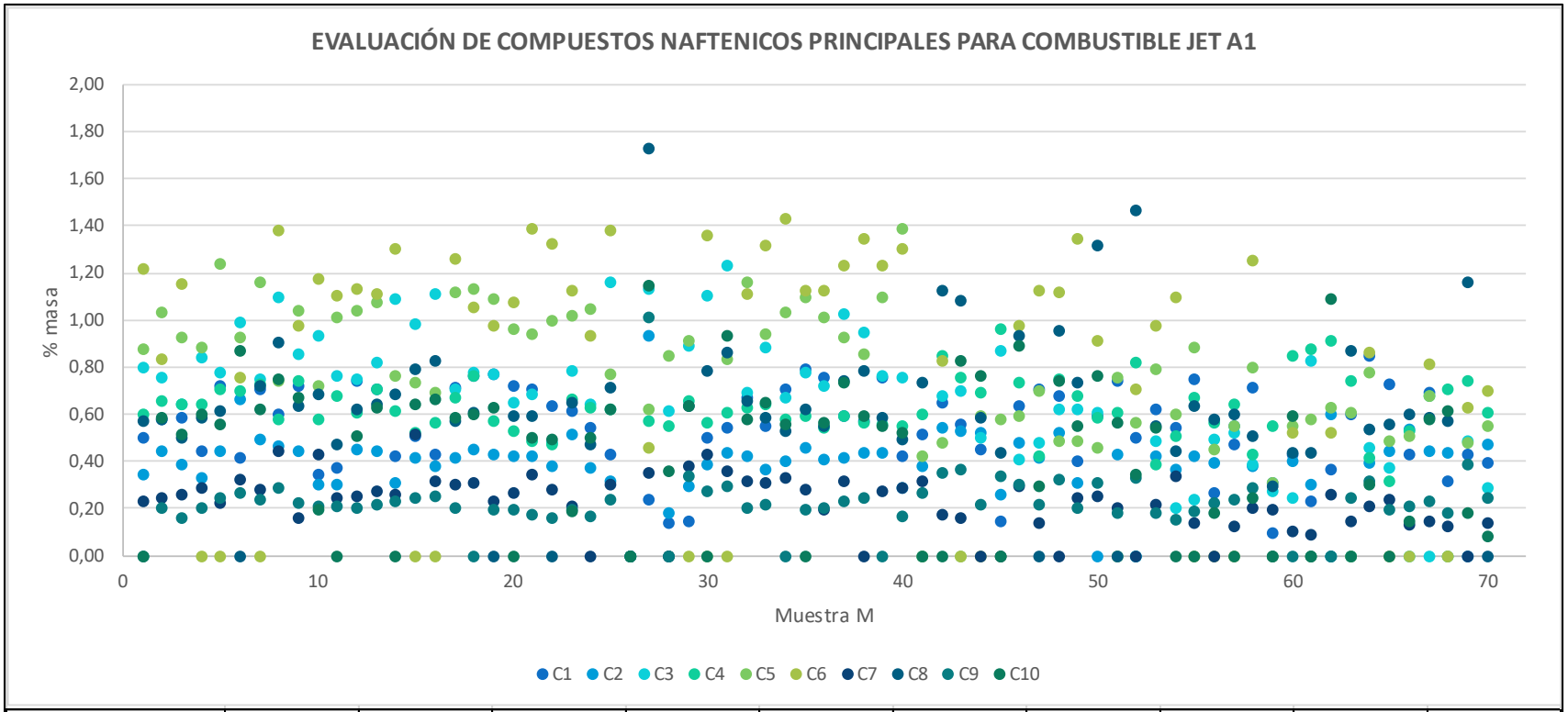
En el anexo 1 se presenta la composición completa identificada para cada una de las muestras.



Componente	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	P11	P12	P13	P14	P15	P16	P17	P18	P19	P20
Promedio	0,31	0,14	0,73	0,33	0,29	0,58	0,38	2,53	0,49	0,77	4,07	1,46	1,13	6,03	1,23	1,11	5,58	3,99	2,72	1,29
Desviación Estandar	0,13	0,16	0,46	0,13	0,16	0,42	0,37	0,94	0,50	0,33	1,31	0,31	0,56	1,65	0,28	0,68	1,24	0,80	0,69	0,46
Valor Máximo	0,52	0,79	1,58	0,95	1,31	1,45	1,34	5,49	1,83	1,58	7,45	2,01	2,18	8,70	1,64	2,07	7,98	5,67	4,94	3,61
Valor Mínimo	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20

Fuente: elaboración propia

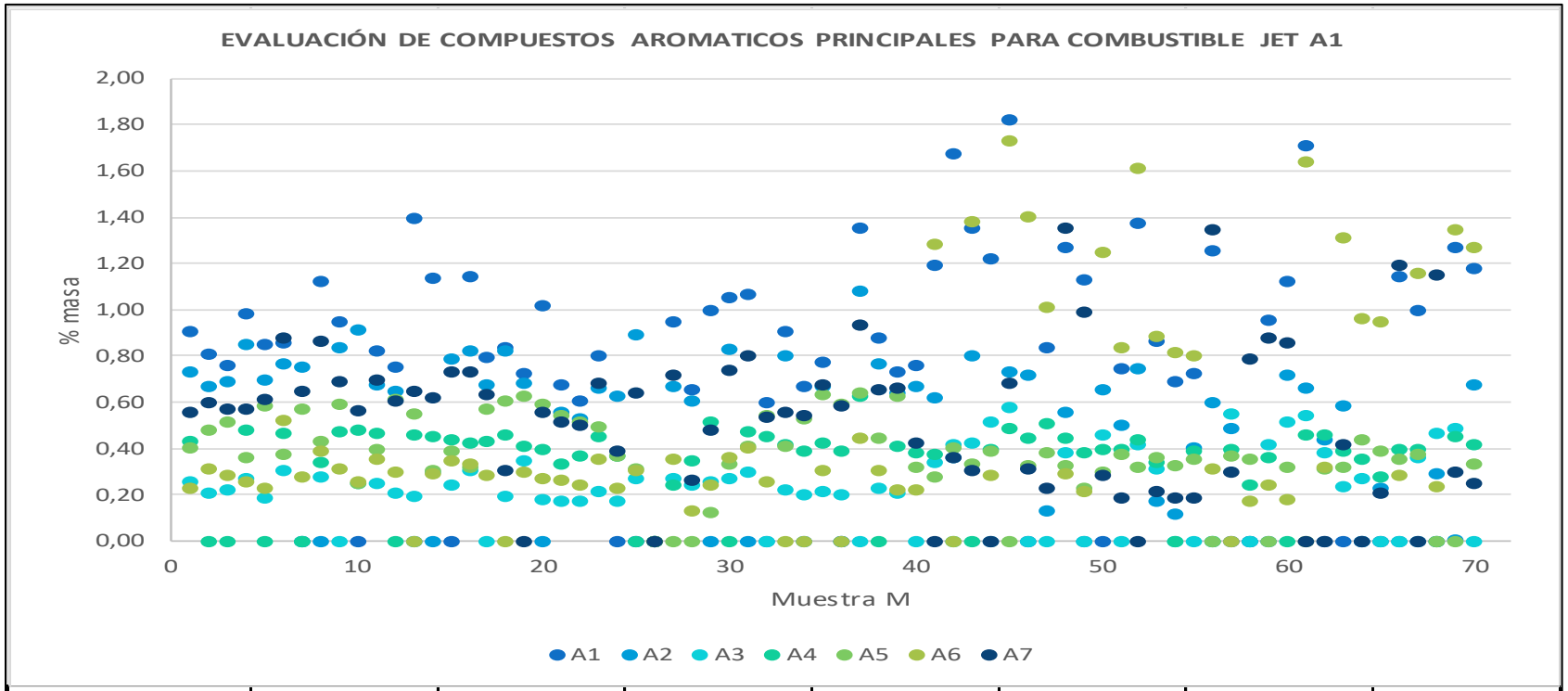
Figura 15. Evaluación de componentes parafínicos principales



Componente	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10
Promedio	0,54	0,39	0,62	0,62	0,76	0,72	0,22	0,61	0,21	0,43
Desviación Estandar	0,19	0,15	0,33	0,14	0,30	0,54	0,12	0,33	0,14	0,31
Valor Máximo	0,85	0,94	1,23	0,96	1,39	1,43	0,51	1,73	1,02	1,15
Valor Mínimo	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Fuente: elaboración propia

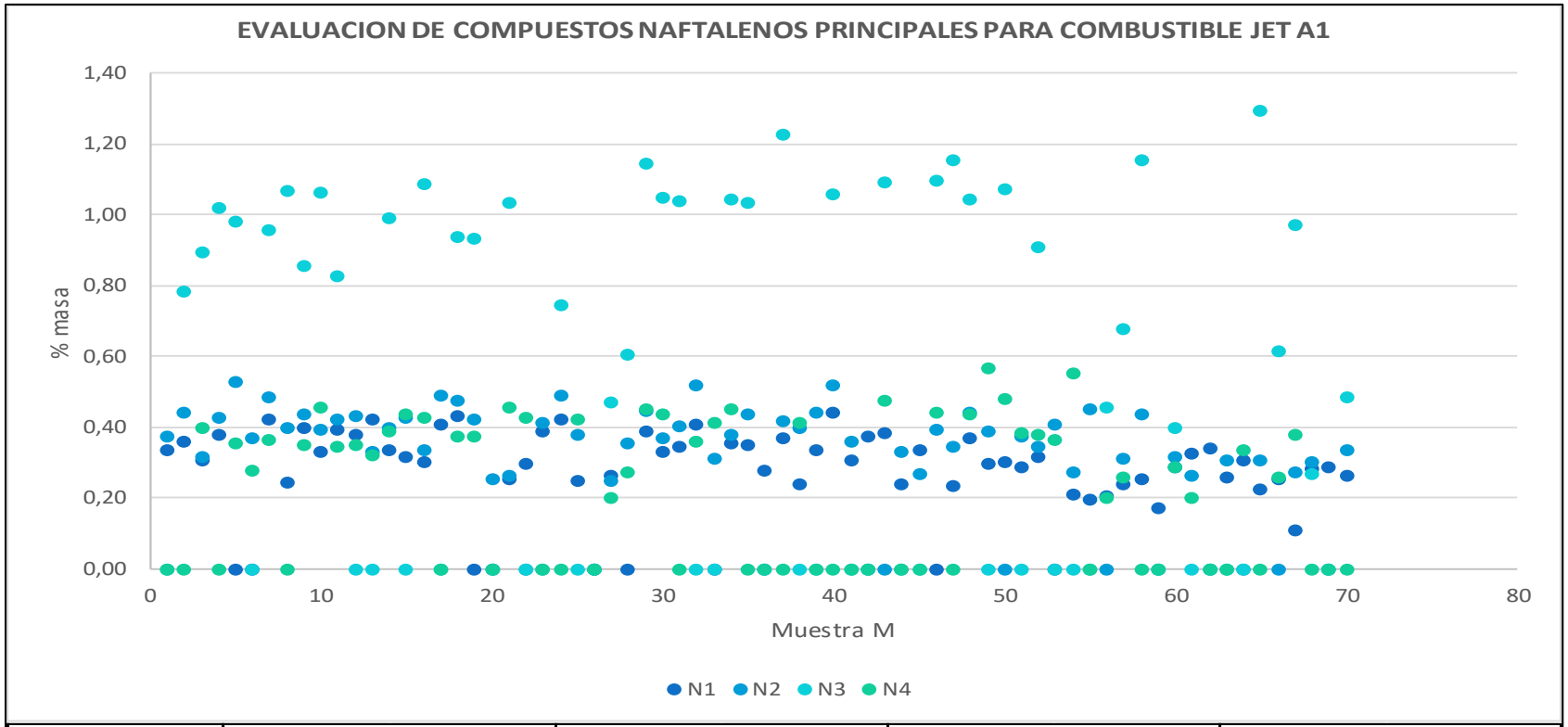
Figura 16. Evaluación de componentes nafténicos principales



Componente	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7
Promedio	0,77	0,48	0,23	0,33	0,37	0,49	0,52
Desviación Estandar	0,49	0,33	0,17	0,18	0,18	0,46	0,32
Valor Máximo	1,83	1,08	0,58	0,63	0,65	1,73	1,36
Valor Mínimo	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Fuente: elaboración propia

Figura 17. Evaluación de componentes aromáticos principales



Componente	N1	N2	N3	N4
Promedio	0,27	0,32	0,51	0,22
Desviación Estandar	0,12	0,16	0,49	0,20
Valor Máximo	0,44	0,53	1,29	0,57
Valor Mínimo	0,00	0,00	0,00	0,00

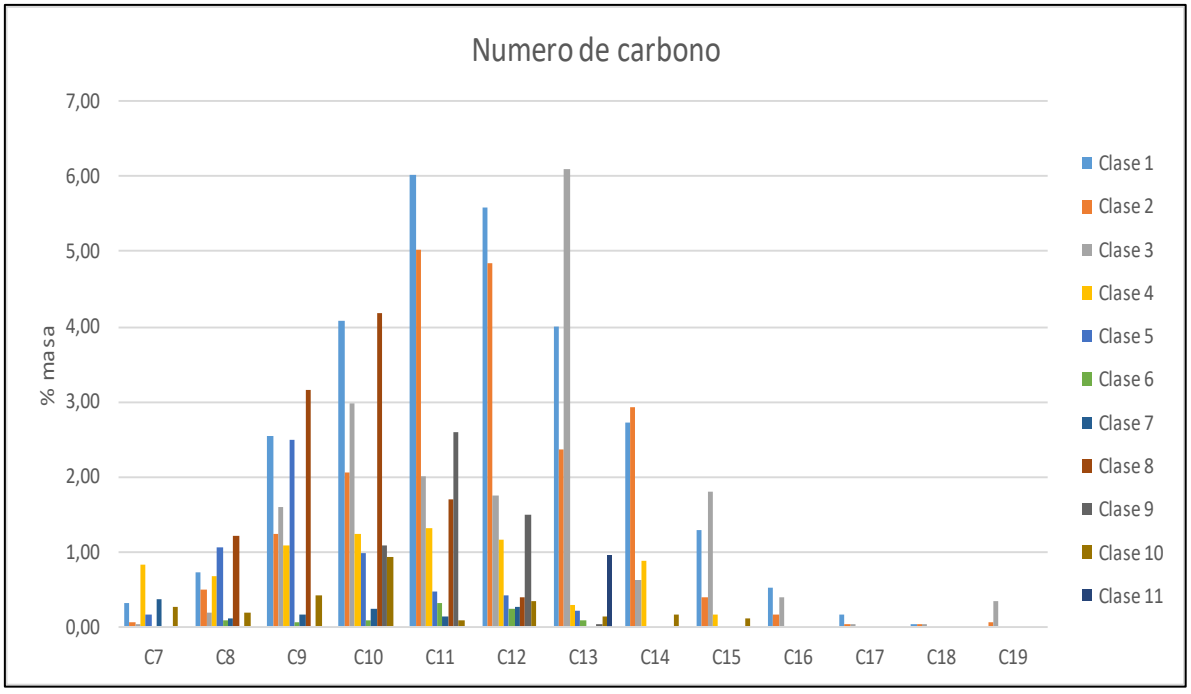
Fuente: elaboración propia

Figura 18. Evaluación de componentes naftalenos principales

4.1.2. Evaluación de la composición por número de carbono

En la figura 18 y tabla 15 se presenta la información de la composición organizada de acuerdo con el número de carbono que presenta el componente encontrado. Esta información está clasificada de acuerdo con 11 clases de hidrocarburos que se describen a continuación:

- Clase 1: parafínicos (alcanos) normales
- Clase 2: isoparafinicos (isoalcanos) mono ramificados
- Clase 3: isoparafinicos (isoalcanos) altamente ramificados
- Clase 4: alquilmonoparafinicos (alquilmonocicloalcanos) mono ramificados
- Clase 5: alquilmononaftenicos (alquilmonocicloalcanos) altamente ramificados
- Clase 6: dinafténicos (dicicloalcanos), alquildinafténicos (alquildicicloalcanos), trinafténicos (tricicloalcanos) y alquiltrinafténicos (alquiltricicloalcanos)
- Clase 7: alquilaromaticos (alquilbencenos) mono ramificados
- Clase 8: alquilaromaticos (alquilbencenos) altamente ramificados
- Clase 9: indanos, alquilindanos, indenos, alquilindenos, naftalenos, alquilnaftalenos y aromáticos policíclicos) y tetralinas y alquiltetralinas
- Clase 10: olefinas (alquenos) normales, mono ramificados, altamente ramificados
- Clase 11: cicloalquenos normales, mono ramificados, altamente ramificados



Fuente: elaboración propia

Figura 19. Composición del Jet A1 por número de carbono

Tabla 15: Valores promedio de composición del Jet A1 por número de carbono

Clase de hidrocarburos		C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18	C19
Clase 1	**Promedio** (Desviación estándar media)	**0,31**	**0,73**	**2,53**	**4,07**	**6,03**	**5,58**	**3,99**	**2,72**	**1,29**	**0,51**	**0,17**	**0,01**	
		0,13	0,46	0,94	1,31	1,65	1,24	0,80	0,69	0,46	0,25	0,15	0,03	
Clase 2		**0,04**	**0,48**	**1,23**	**2,05**	**5,01**	**4,85**	**2,36**	**2,94**	**0,38**	**0,15**	**0,02**	**0,01**	**0,05**
		0,10	0,45	0,52	0,70	1,30	1,54	1,21	1,11	0,35	0,31	0,11	0,06	0,15
Clase 3		**0,03**	**0,17**	**1,58**	**2,97**	**2,01**	**1,74**	**6,10**	**0,62**	**1,79**	**0,39**	**0,02**	**0,00**	**0,34**
		0,09	0,52	1,26	2,59	1,83	1,14	2,70	0,62	0,71	0,57	0,11	0,01	0,52
Clase 4		**0,83**	**0,68**	**1,08**	**1,22**	**1,32**	**1,16**	**0,30**	**0,86**	**0,16**				
		0,48	0,36	0,54	0,52	0,68	0,77	0,31	0,74	0,32				
Clase 5		**0,16**	**1,05**	**2,48**	**0,97**	**0,46**	**0,42**	**0,21**						
		0,21	0,57	0,93	0,59	0,43	0,34	0,36						
Clase 6			**0,07**	**0,06**	**0,07**	**0,31**	**0,24**	**0,07**						
			0,19	0,17	0,18	0,36	0,28	0,16						
Clase 7		**0,37**	**0,10**	**0,16**	**0,24**	**0,13**	**0,25**							
		0,18	0,13	0,21	0,25	0,17	0,30							
Clase 8			**1,20**	**3,16**	**4,19**	**1,68**	**0,38**							
			0,44	1,28	1,31	0,76	0,37							
Clase 9					**1,07**	**2,58**	**1,49**	**0,03**						
					0,53	0,84	0,64	0,06						
Clase 10		**0,25**	**0,19**	**0,40**	**0,93**	**0,08**	**0,33**	**0,13**	**0,15**	**0,10**				
		0,34	0,28	0,50	0,70	0,21	0,60	0,27	0,32	0,20				
Clase 11								**0,95**						
								0,56						

Fuente: elaboración propia

De la figura 19 y tabla 15 se puede ver que la composición del Jet A1 organizada por número de carbono, presenta compuestos entre 7 y 8 carbonos para las clases de hidrocarburos 1 a 5 (es necesario mencionar que, al organizar la información, algún compuesto puede estar debajo de 7 carbonos o por encima de 19 carbonos con valores de % masa, casi despreciables). Las clases de hidrocarburos de la 6 a la 8, se encuentra principalmente entre 8 y 12 carbonos. Las clases 9 a 10 presentan valores pequeños de composición de acuerdo con el número de carbono y se distribuyen entre 10 a 13 carbonos para la clase 9, entre 7 y 15 carbonos para la clase 10 y 13 carbonos para la clase 11. Esta última se organiza de esta forma, ya que la mayoría de los compuestos presentan 13 carbonos, aunque se encuentran muy pocos compuestos con numero de carbonos inferiores y superiores (valores de % masa, casi despreciables).

Se puede notar que la composición predominante del Jet A1 de acuerdo con el número de carbonos esta entre 9 y 14 carbonos (87.97 % masa promedio), con mayor tendencia a estar presente la clase 1 para el numero de carbonos 9 a 12 con valores promedio de (2.53, 4.07, 6.03 y 3.99) % masa y desviación estándar media (0.94, 1.31, 1.65 y 0.80) % masa. Para el número de carbono 13, la clase de hidrocarburos que se encuentra en mayor % masa promedio es la clase 3 (6.10 % masa promedio y 2.70 % masa de desviación estándar media) y para el numero de carbono 14, la clase de hidrocarburos que se encuentra en mayor % masa promedio es la clase 2 (2.94 % masa promedio y 1.11 % masa de desviación estándar media).

La composición en número de carbonos 7 y 8 presentan valores promedio (1.97 y 4.67) % masa y desviación estándar media (1.53 y 3.40) % masa. Esta composición puede ser influyente en las propiedades de volatilidad del combustible Jet A1.

La composición en número de carbonos 15 a 19 presenta un valor promedio de 5.40 % masa. Esta composición puede tener efecto en las etapas finales de la destilación del combustible Jet A1.

En el anexo 2 se presenta la composición completa del Jet A1 clasificada por número de carbono para cada una de las muestras.

4.1.3. Caracterización fisicoquímica

En la tabla 16 y tabla 17 se presenta la caracterización realizada la base de muestras de combustibles Jet A1.
El análisis de evaluación de conformidad permite visualizar el comportamiento de estas muestras y los resultados de aceptación frente a las especificaciones de calidad de la normatividad legal descrita en la tabla 3 del capítulo 2.

Tabla 16. Caracterización fisicoquímica – Destilación (°C)

Muestra	PIE	5	10	20	30	40	50	60	70	80	90	95	PFE
M1	144,5	166,5	177,0	187,0	195,0	202,0	210,5	217,5	224,5	232,5	247,0	257,0	280,5
M2	142,0	166,5	175,5	187,0	195,0	202,0	208,0	215,5	223,5	232,5	247,0	268,0	278,5
M3	134	167,5	176	189	197	204	210,5	217,5	224,5	235,5	249,5	262	277,5
M4	147,5	170,5	180,0	190,0	197,0	204,0	211,5	217,5	225,5	233,5	246,0	255,0	276,0
M5	146,5	164,5	175,0	188,0	196,0	203,5	210,5	217,5	224,5	234,0	248,0	260,0	282,5
M6	144,5	164,5	174,0	182,0	191,0	198,0	207,5	214,5	222,5	233,5	248,0	261,0	280,5
M7	145,5	169,5	179,0	190,0	198,0	205,0	211,5	217,5	224,5	234,5	249,0	262,0	278,5
M8	146,5	167,5	175,0	187,0	195,0	203,0	211,5	219,5	226,5	235,5	246,0	253,0	280,5
M9	141,5	164,5	171,5	184,0	191,0	198,0	205,0	212,5	219,5	229,5	243,0	256,0	271,0
M10	150,5	170,5	177	187	195	202	211,5	218,5	226,5	234,5	245	253	279,5
M11	149,5	172,5	180	188	196	201	208,5	216,5	222,5	232,5	248	263	279,5
M12	137	166,5	177	189	197	205	211,5	217,5	225,5	235,5	250	263	278,5
M13	138	165,5	175	187	195	202	208,5	215,5	223,5	233,5	248	260	283,5
M14	147,5	173	179	187	193	200	207,5	214,5	222,5	230,5	240	246	259
M15	151,5	171,5	179	188	196	203	211,5	218,5	226,5	234,5	244	253	273
M16	145,5	169,5	176	185	193	200	207,5	215,5	223,5	230,5	241	248	271
M17	146,5	169	177	188	196	202,5	210,5	215,5	222,5	231,5	248	257	283,5
M18	138,5	168	175	187	196	203,5	210,5	216,5	224,5	236	249	263	284,5
M19	137,5	170	177	191	199	207,5	213,5	220,5	227,5	237	250	263	284,5
M20	149,5	172	179	194	202	209,5	215,5	221,5	227,5	236	249	263	278,5
M21	146,5	171,5	182	193	201	207,5	214,5	221,5	228,5	236,5	251	263	285,5
M22	147,5	167,5	178	191	201	207,5	213,5	220,5	227,5	236,5	250	262	279,5
M23	145,5	165,5	174,5	185	193	200	207	214,5	222,5	231,5	245	260	278,5
M24	153,5	175	182	193	201	207,5	212,5	218,5	225,5	233,5	247	259	280,5
M25	146,5	167,5	176	186	193	201	208,5	215,5	222,5	231,5	240	247	266
M26	151,5	160,5	163,5	167,5	170,5	172,5	175,5	180	184	190	198	207	232,5
M27	141,5	154,5	159,5	168,5	176	184	193	204	216,5	228,5	242	249	268
M28	177	183	188	192	196	201	206,5	211,5	217,5	222,5	231,5	239	255
M29	171,5	178	185	191	197	204	210,5	218,5	226,5	235,5	246	257	279,5
M30	147,5	169,5	178	188	195	202	211,5	217,5	224,5	232,5	243	249	279,5
M31	171,5	177	178	182	185	192	200	208,5	216,5	225,5	232,5	243	269
M32	146,5	169,5	180	192	201	207	214,5	220,5	227,5	236,5	249	263	287,5
M33	148,5	173	180	190	198	205,5	211,5	217,5	225,5	232,5	246	254	279,5
M34	133	166,5	174	187	197	205	211,5	217,5	226,5	235,5	249	260	285,5
M35	152,5	180	187	192	199	106,5	213,5	220,5	227,5	237	251	262	286,5
M36	136	165,5	176	190	199	206,5	213,5	220,5	227,5	234,5	250	263	283,5
M37	148,5	169,5	177	189	197	203,5	211,5	217,5	225,5	232,5	244	253	281,5
M38	146,5	168,5	178	189	197	204,5	211,5	219,5	225,5	232,5	245	253	279,5

Muestra	PIE	5	10	20	30	40	50	60	70	80	90	95	PFE
M39	141,5	166,5	188	191	200	206,5	213,5	221,5	227,5	237	251	261	282,5
M40	145,5	166,5	175	187	194	202	209,5	216,5	223,5	231,5	243	253	273,5
M41	168,5	171,5	174,5	182	189	197	204	213,5	221,5	230,5	239,5	246	265
M42	152,5	162,5	169,5	179,5	189	197	205	215,5	223,5	232,5	243,5	252	269
M43	147,5	165,5	172,5	184	192	199	208	215,5	223,5	232,5	242,5	250	273
M44	144,5	162,5	169,5	180	187	195	202	210,5	219,5	228,5	243	252	275,5
M45	154,5	166,5	169,5	174,5	181	186	191	197	205	215,5	228,5	238,5	273
M46	168,5	178	181	185	192	201	209,5	217,5	227,5	235,5	246	253	275,5
M47	146,5	164,5	177	190	197	205	212,5	219,5	222,5	227,5	245	255	288,5
M48	175	176	177	183	192	200	208,5	216,5	224,5	234,5	244	253	271,5
M49	177	178	180	181	189	198	206,5	215,5	225,5	236	245	253	279,5
M50	148,5	162,5	172	184	192	200	207,5	216,5	225,5	234,5	246	255	283,5
M51	148,5	156,5	178	191	198	204,5	210,5	217,5	225,5	232,5	247	258	283,5
M52	148,5	163,5	171,5	182	188	195	202	210,5	217,5	226,5	237,5	247	274,5
M53	153,5	161,5	176	191	200	204	211,5	217,5	224,5	232,5	245	255	279,5
M54	140	167,5	181	194	203	210,5	217,5	223,5	230,5	238,5	252	269	283,5
M55	146,5	153,5	164,5	178	192	205	211,5	217,5	224,5	232,5	245	255	273
M56	157,5	159,5	163,5	172,5	181	187	196	203	213,5	224,5	239,5	250	275,5
M57	150	164,5	171,5	179,5	187	193	200	207	217	224,5	239,5	250,5	268
M58	146	167,5	177,5	190	198	204	211	216	223,5	230,5	244,5	256	271
M59	171,5	183	188	195	202	208	215,5	222,5	233,5	245,5	261	273	282,5
M60	151	165,5	171,5	178,5	184,5	190	195	202	210	217	225,5	235,5	249,5
M61	156,5	167,5	172,5	178,5	184,5	190	196	203	213	223,5	237,5	246,5	269
M62	150,5	166,5	174,5	183	192	199	205	213	222,5	233,5	248	261	278
M63	154,5	170,5	178,5	190	197	205	214	222	230,5	239,5	252,5	269	283
M64	141	163,5	174,5	189	198	205	211	218,5	225,5	235,5	249,5	265	276
M65	146	171,5	182	198	207	216,5	222,5	230,5	235,5	245,5	257	268	284,5
M66	151,5	163,5	170,5	179	185	192	199	207	215,5	224,5	237,5	251	260
M67	148,5	163,5	177	189	197	206	213,5	219,5	227,5	237,5	266	271	281,5
M68	149	164,5	169,5	176,5	184,5	191	198	205	214	224,5	237,5	251,5	261
M69	149	163,5	168,5	176,5	183,5	189	196	204	213	222,5	234,5	242,5	259
M70	151,5	167,5	175,5	185	192	200	207	214	223,5	233,5	246,5	258	272

Fuente: elaboración propia

Tabla 17. Caracterización fisicoquímica – Otras propiedades

Muestra	API a 60 °F (°API)	Punto Inflamación (°C)	Calor Combustión (kj/kg)	Viscosidad. -20 °C (cSt)	Punto Congelamiento (°C)	Temperatura Cristalización (°C)	Humedad (ppm)
M1	41,2	41	45825	5,195	-55	-60,67	74
M2	41,7	39	45959	4,951	-52	-57,36	67
M3	41,6	38	45936	5,156	-49	-53,32	71
M4	40,8	44	45908	5,312	-56	-61,02	77
M5	41,1	38	45941	5,248	-52,5	-57,28	74
M6	42,6	39	45857	4,681	-52	-57,26	66
M7	41	47	45855	4,79	-53	-57,43	59
M8	40,8	40	45848	5,175	-59	-63,29	57
M9	41,8	41,5	45939	4,864	-56	-61,08	58
M10	40,7	41	45873	5,171	-59	-63,2	78
M11	42	38,5	45911	4,912	-51	-56,49	66
M12	40,8	38	45827	5,315	-53	-57,92	44
M13	41,3	38	45894	5,116	-52	-56,4	50
M14	41,8	41	45929	4,954	-56	-61,56	74
M15	40,7	41,5	45836	5,23	-59	-64,46	48
M16	41,4	41	45773	4,921	-57	-61,15	63
M17	41,3	37,5	45952	5,078	-52	-57,78	64
M18	41,4	36,5	45859	5,116	-50	-55,78	62
M19	40,5	41,5	45813	5,593	-52	-57,38	60
M20	40,4	41,5	45887	5,656	-52	-56,12	57
M21	40,4	41	45827	4,855	-51	-56,47	63
M22	40,4	40,5	45671	5,627	-54	-59,9	54
M23	41,9	39	45876	4,97	-51	-54,07	76
M24	41,8	42	45925	5,499	-47	-52,68	63
M25	41,6	43	45859	5,097	-58	-62,09	80
M26	54,3	40	47069	3,325	-75	-79,45	71
M27	47,3	38,5	46604	3,822	-39,5	-46,41	45
M28	45,1	53,5	46348	4,915	-49	-56,12	60
M29	40	53,5	45925	5,757	-51	-56,05	64
M30	40,8	42,5	45871	5,188	-54	-62,23	60
M31	40,7	42	45613	5,147	-56	-61,85	65
M32	40,9	41,5	45890	5,338	-52	-56,23	54
M33	41,4	41,5	45834	4,966	-52	-57,22	54
M34	41	41	45897	5,318	-51	-55,32	55
M35	40,5	40	45852	5,395	-52	-55,6	54
M36	40,5	38,5	45890	5,357	-53	-57,06	52

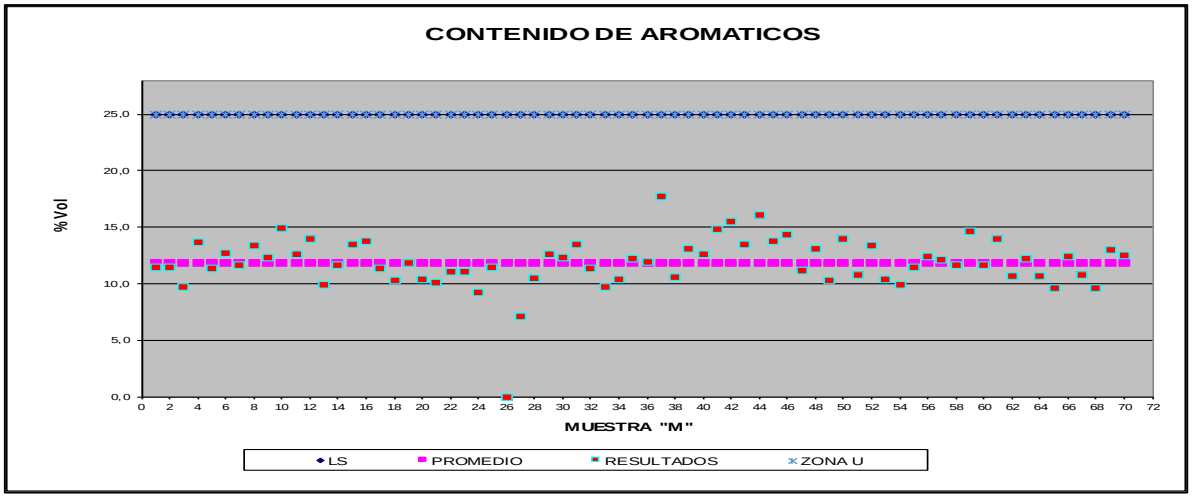
M37	41,1	41	45962	4,918	-55	-59,2	59
M38	40,9	41	45880	5,142	-56	-59,48	60
M39	40,5	40	45885	5,596	-51	-56,75	50
M40	41,8	42,5	45722	5,188	-52	-56,94	55
M41	41,3	41,5	45913	4,755	-60,5	-64,86	58
M42	41,4	39	45834	4,722	-59,5	-63,07	62
M43	41,4	40	45815	4,742	-59	-63,76	56
M44	44,1	41	46041	4,47	-53	-57,38	57
M45	46,3	43,5	46220	3,597	-55	-60,41	49
M46	40,5	40,5	45825	6,193	-59	-63,59	54
M47	41,1	42	45925	5,323	-52	-58,78	53
M48	40,9	41	45818	5,031	-58	-61,05	52
M49	41,2	42	45878	5,295	-56	-61,63	57
M50	41,5	40	45918	4,866	-57	-62,33	52
M51	41,6	41	45976	5,308	-51	-55,46	46
M52	42,9	40,5	45966	4,394	-58	-63,98	50
M53	41,4	44	45818	5,448	-51	-56,39	48
M54	40,2	43	45918	5,945	-52	-56,25	49
M55	40,9	42,5	45952	5,494	-52	-57,1	62
M56	46	41,5	46132	3,892	-50	-56,42	52
M57	45,1	42	46115	4,255	-52	-55,43	49
M58	41	42	45892	5,467	-53	-56,28	51
M59	43,6	51,5	46087	5,312	-43	-47,91	41
M60	46,7	45,5	46276	4,066	-54	-58,01	56
M61	45,6	45,5	46208	3,916	-55	-60,65	53
M62	44,3	45	46176	4,401	-48	-55,36	52
M63	41,8	44	45950	5,103	-53	-58,08	56
M64	41	41,5	45871	5,581	-50	-55,49	52
M65	39,9	41,5	45857	6,102	-51	-56,82	55
M66	44,3	42,5	46159	4,321	-54	-60,11	52
M67	41,6	43,5	45952	5,221	-52	-57,56	51
M68	44,6	45	46185	4,238	-55	-59,64	49
M69	44,7	42,5	46111	4,137	-55	-61,98	57
M70	43,4	43	46027	5,005	-55	-61,76	51

Fuente: elaboración propia

4.1.3.1. Evaluación de conformidad

Teniendo en cuenta las especificaciones de calidad de la norma NTC 1899 (ICONTEC, 2018) en referencia de la norma ASTM D 1655 (ASTM, 2020)y siguiendo los criterios de aceptación descritos en el numeral 3.4.2. se puede concluir:

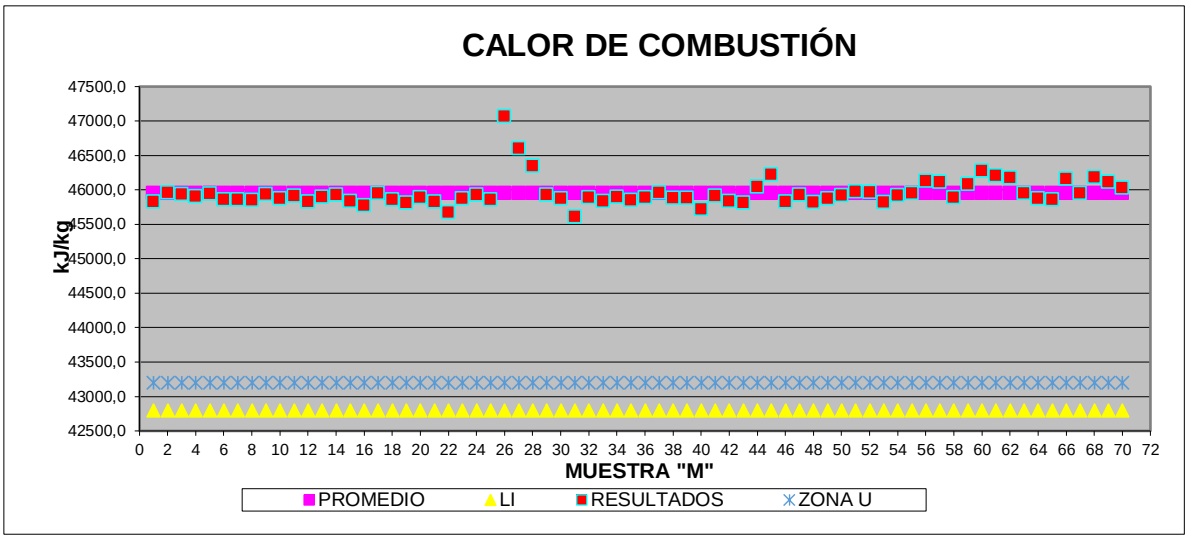
Contenido de aromáticos: en la figura 20 se puede ver que el 100% de las muestras son conformes con la especificación de calidad (menor a 25 % volumen) con valores inferiores a 21.64 % volumen. La muestra M26 no tiene presencia de contenido de aromáticos (muestra sintética)



Fuente: elaboración propia

Figura 20. Contenido de aromáticos

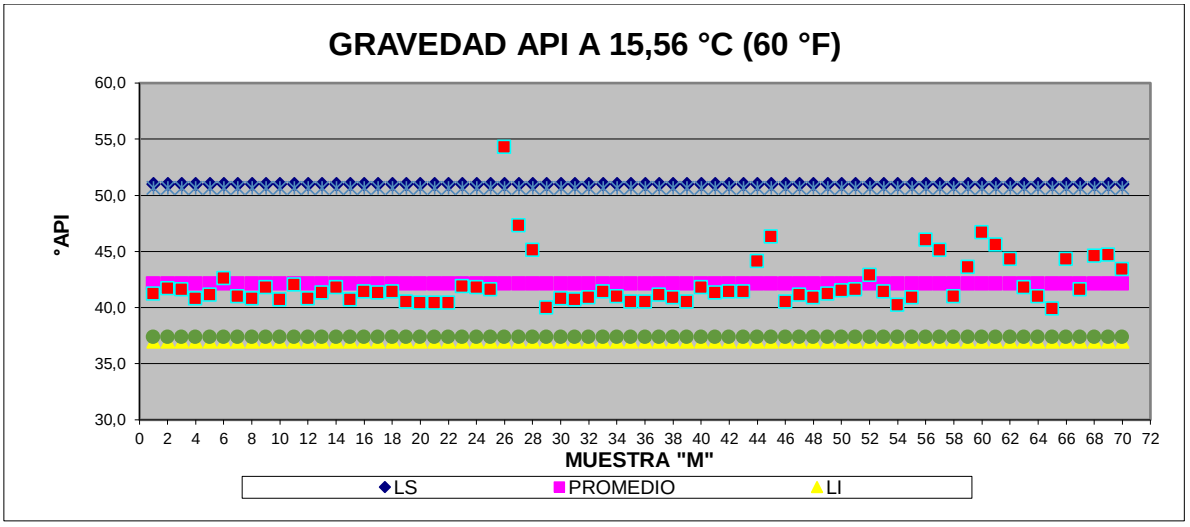
Calor de combustión bruto: en la figura 21 se puede ver que el 100% de las muestras son conformes con la especificación de calidad (superior a 42800 kJ/kg) con valores superiores a 45613 kJ/kg y un valor máximo de 47069 kJ/kg. Es de aclarar que el valor medido para esta propiedad es el calor de combustión bruto (así lo entrega el método ASMT D 240) y no se ha disminuido el aporte generado por el calor latente de vaporización del agua. Aun así, los resultados están por encima del valor especificado.



Fuente: elaboración propia

Figura 21. Calor de combustión

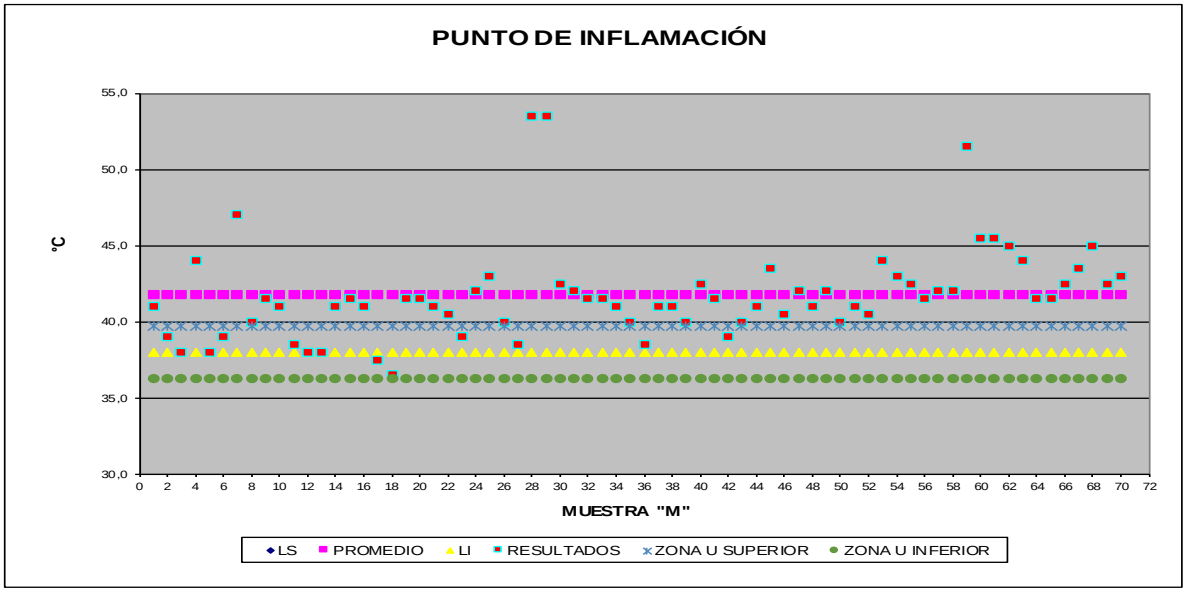
Gravedad API: esta propiedad cualitativa y cuantitativa de la gravedad específica se mantiene muy controlada, por ser el primer método de inspección de control de calidad que se realiza en toda la cadena de distribución y por la facilidad de realizar el análisis. En la figura 22 se puede ver que todas las muestras son conformes a excepción de la muestra M26 dado su carácter sintético. Gran parte las muestras oscilan alrededor del valor promedio de gravedad API (42.1 °API a 60 °F. La muestra con menor gravedad API es la M65 indicando un carácter más denso.



Fuente: elaboración propia

Figura 22. Gravedad API

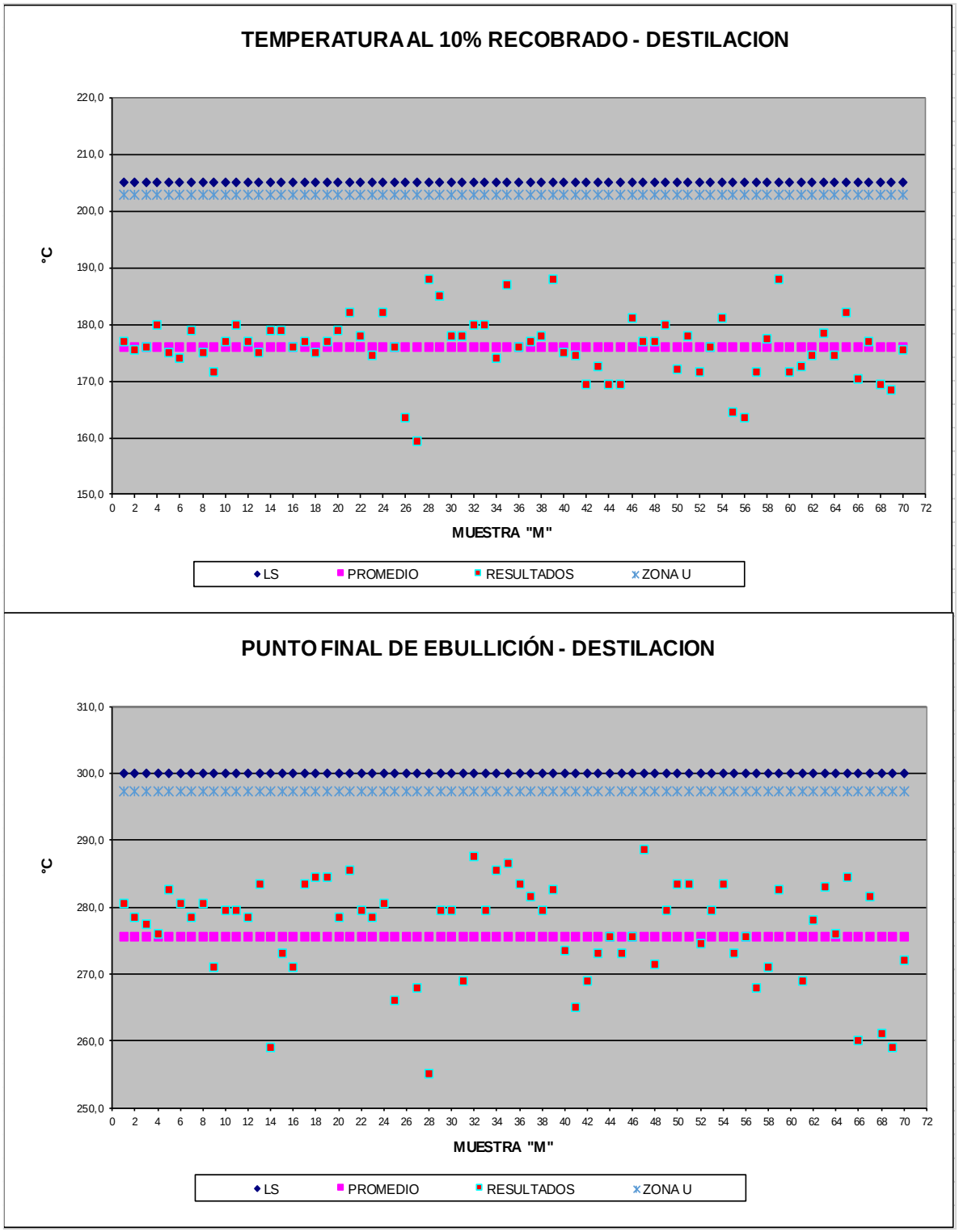
Punto de inflamación: En la figura 23 se observa dispersión en los resultados con un valor máximo de 53.5 °C y un valor mínimo de 36.5 °C. Hay 13 muestras en zona de incertidumbre representando el 15.6 % de las muestras analizadas. Esta propiedad es una medida de la volatilidad y la seguridad que ofrece el combustible al manipularlo, reflejando, falta de control de esta propiedad en el proceso de producción de este combustible. Se espera que, con la evaluación del efecto de la composición en la caracterización fisicoquímica, se pueda ver el componente que está afectando principalmente esta propiedad.



Fuente: elaboración propia

Figura 23. Punto de inflamación

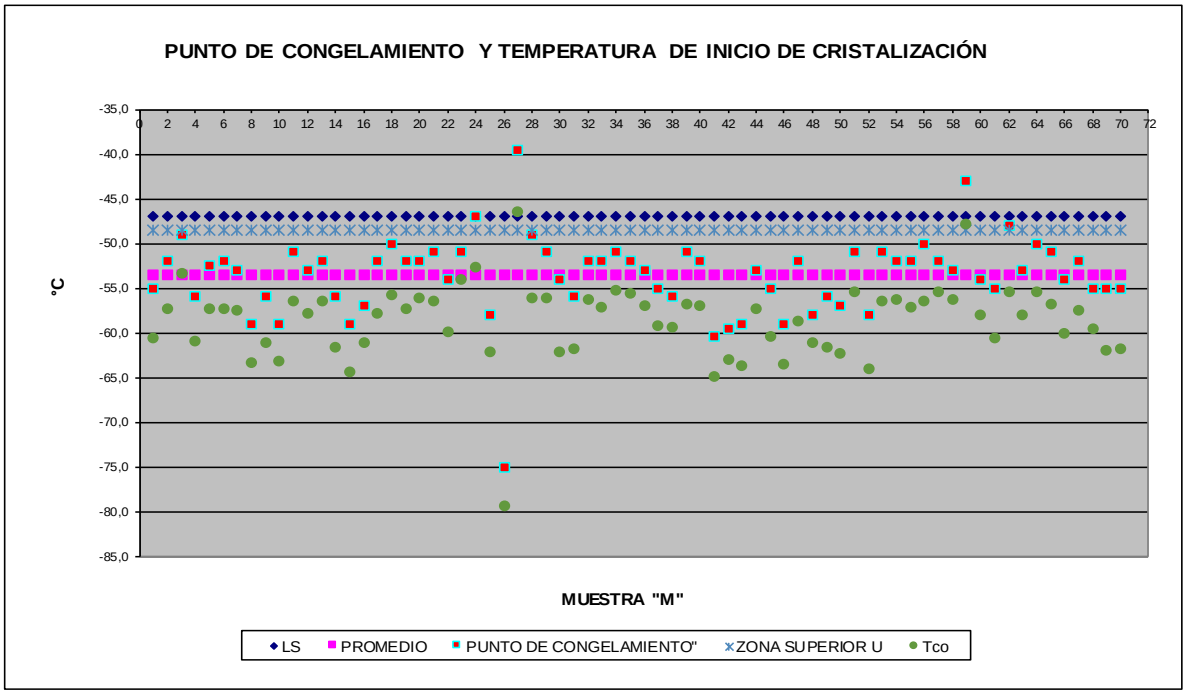
Destilación: de la tabla 16 se puede ver la curva de destilación presenta un comportamiento normal en el 100 % de las muestras analizadas con un rango promedio de destilación (149.7 a 275.6) °C y un valor promedio en el 50% del recobrado de 207.9 °C. En lo que respecta el análisis de evaluación de conformidad en el 10% del recobrado y el punto final de ebullición, en la figura 24 se puede ver que el 100 % de las muestras son conformes, aunque se presentan dispersión en su comportamiento con valores máximos y mínimos en el 10% del recobrado y punto de ebullición muy distantes. Valor máximo (diferencia de 28.5 °C en el 10% del recobrado y 56 °C en el punto final de ebullición).



Fuente: elaboración propia

Figura 24. Destilación

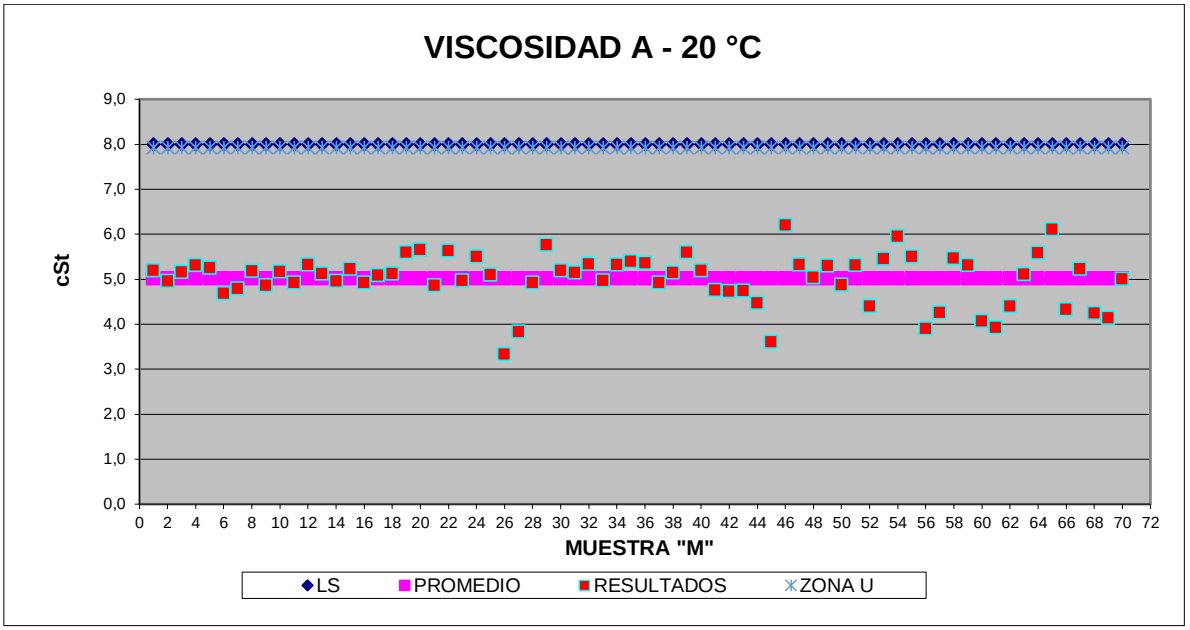
Punto de congelamiento y temperatura de inicio de cristalización (Tco): Estos dos parámetros son presentados a la vez porque representan la temperatura de inicio de formación de sólidos en el combustible Jet A1. La diferencia radica en que el punto de congelamiento representa una propiedad física que se determina de forma visual mediante método ASTM D 2386 y es determinada cuando desaparece los cristales formados y la Tco es una técnica analítica que se evalúa con un equipo de calorimetría diferencial, capaz de sentir químicamente la aparición de formación de cristales. En la figura 25 se observa dispersión en los resultados y con el 100% de las muestras presentando temperaturas mayores en el punto de congelamiento comparado con la Tco. Se obtiene valores máximos de -39.5 °C y -46.4 °C y mínimos de -75 °C y -79.5 °C para el punto de congelamiento y la Tco respectivamente. La diferencia máxima encontrada entre estos dos parámetros es 8.2 °C y la mínima es 3.1 °C, pero en promedio se puede ver que el punto de congelamiento está por encima 5.1 °C con respecto a la Tco. El análisis de evaluación de conformidad indica que hay 2 muestras no conformes (M27 y M59) y 2 muestras en zona de incertidumbre (M24 y M62). Teniendo en cuenta la Tco, solamente la muestra M27 seria no conforme y la muestra M59 estaría en zona de incertidumbre. Estas dos últimas muestras mencionadas son de Estados Unidos de América, cuyo combustible de uso en el Jet A con un punto de congelamiento máximo de -40 °C.



Fuente: elaboración propia

Figura 25. Punto de congelamiento y temperatura de inicio de cristalización

Viscosidad: Esta propiedad se debe evaluar a -20 °C para verificar la fluidez del combustible a bajas temperaturas dada sus condiciones de uso. En la figura 26 se puede ver que el 100% de las muestras son conformes con un valor promedio de 5.0 cSt y valores máximos y mínimos de 6.2 cSt y 3.3 cSt. En un porcentaje mayor a 90% se puede ver que las muestras están entre 4 cSt y 6 cSt indicando que se podría reducir esta especificación de calidad en Colombia.



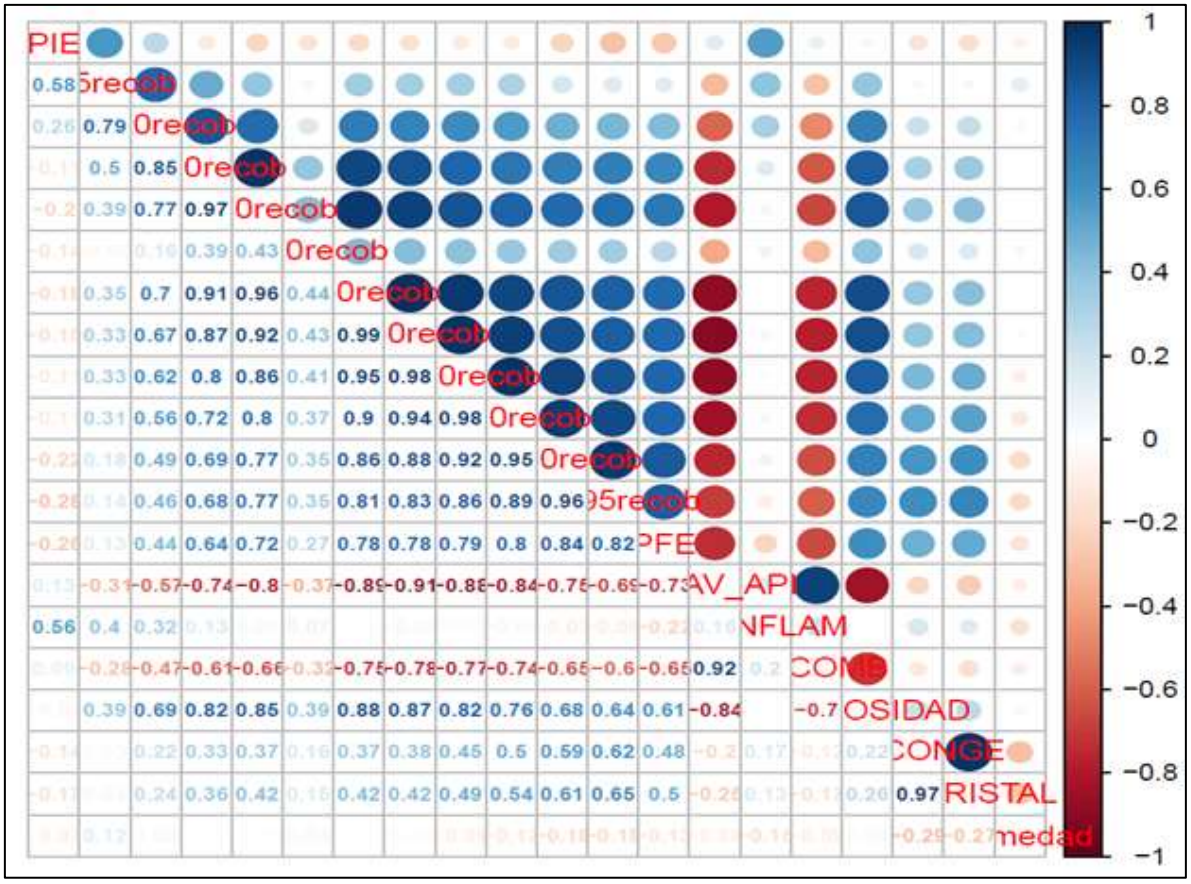
Fuente: elaboración propia

Figura 26. Viscosidad a -20 °C

4.1.4. Análisis estadístico por composición de componentes

En esta sección se presenta el análisis estadístico para evaluar el efecto de la composición en las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1. La variable de entrada es la composición y la variable de salida o respuesta son las propiedades fisicoquímicas.

***Correlaciones entre las variables de salida*:** Con el fin de determinar si existen relaciones lineales significativas entre las variables que componen el conjunto de variables de salida, se procedió a calcular la matriz de correlaciones de la figura 27.



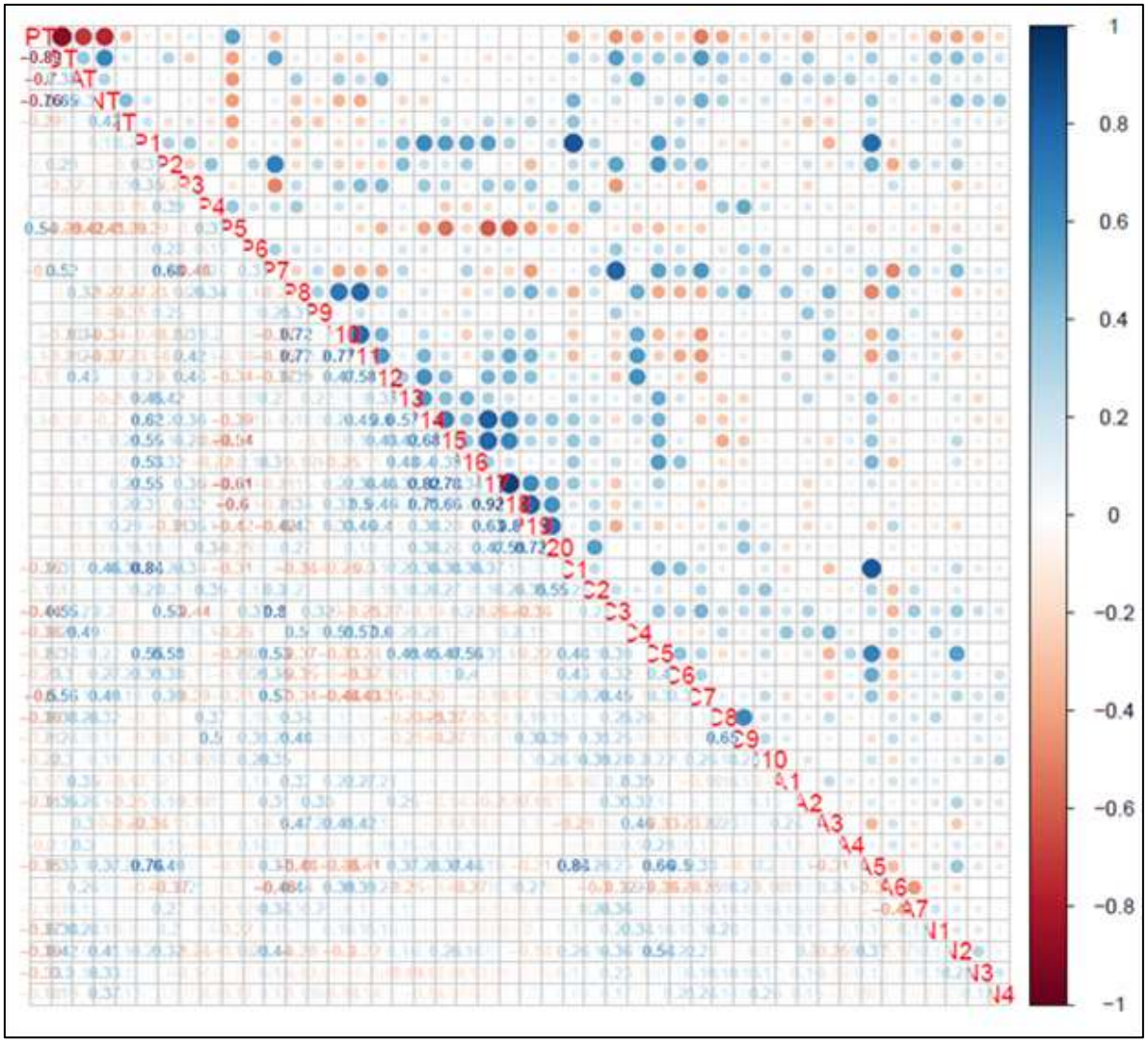
Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 27. Matriz de correlaciones de la variable de salida – propiedades fisicoquímicas

Se considera una relación lineal fuerte (significativa) si el coeficiente de correlación es mayor que 0.5 (relación lineal directa) o menor a -0.5 (relación lineal inversa).

En la matriz de correlaciones de las variables respuesta se observa que, excepto HUMEDAD, T30 %recobrado, todas las variables tienen relaciones lineales significativas directas (coeficiente positivo) o inversas (coeficiente negativo).

Correlaciones entre las variables de entrada: La figura 28 contiene la matriz de correlaciones para las variables de entrada, fisicoquímicas.



Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 28. Matriz de correlaciones de la variable entrada - componentes

En la matriz de correlaciones de las variables de entrada se observa que las variables IT, P3, P6, P9, C6, C10, A1, A2, A3, A4, A6, A7, N1, N3 y N4, no tienen relaciones lineales significativas. Las otras variables de entrada tienen relaciones lineales significativas inversas o directas.

Relaciones lineales entre las variables de composición y las variables fisicoquímicas: Como se observó anteriormente, las variables se encuentran fuertemente correlacionadas, por tanto, se debe aplicar métodos de reducción de dimensión con el fin de obtener variables que no violen el supuesto de no existencia de multicolinealidad de la regresión. En principio, se aplicará sólo a las variables de entrada, en el enfoque colectivo también se aplicará a las variables respuesta.

El método de reducción de dimensión elegido será componentes principales dado que, es un procedimiento matemático que transforma un conjunto de variables CORRELACIONADAS en un conjunto de nuevas variables NO CORRELACIONADAS llamadas componentes principales, con el propósito de reducir la dimensión de los datos y facilitar su interpretación y análisis. (Rencher and William, 2012)

La Tabla 18 presenta el resultado de los componentes principales, donde se observa que el 81% de la varianza se acumula con 7 dimensiones o componentes principales, pasando de tener 31 variables de entrada altamente correlacionadas (ver matriz de correlaciones) a 7 variables de entrada incorrelacionadas (llamadas componentes principales) con una mínima pérdida de información.

Tabla 18. Caracterización fisicoquímica – Otras propiedades

Dimensión	Valor propio	Porcentaje de varianza	Porcentaje de varianza acumulada
Dim.1	6.77	21.82	21.82
Dim.2	6.34	20.46	42.28
Dim.3	4.29	13.83	56.11
Dim.4	2.86	9.22	65.34
Dim.5	2.44	7.87	73.21
Dim.6	1.53	4.93	78.14
Dim.7	**1.03**	**3.33**	**81.47**
Dim.8	0.84	2.72	84.19
Dim.9	0.73	2.36	86.55
Dim.10	0.60	1.92	88.47
Dim.11	0.46	1.47	89.94
Dim.12	0.38	1.22	91.16
Dim.13	0.35	1.14	92.30
Dim.14	0.31	0.99	93.28
Dim.15	0.29	0.94	94.23
Dim.16	0.28	0.90	95.13
Dim.17	0.24	0.78	95.91
Dim.18	0.21	0.68	96.59
Dim.19	0.20	0.64	97.22
Dim.20	0.15	0.50	97.72
Dim.21	0.14	0.45	98.17
Dim.22	0.13	0.41	98.59
Dim.23	0.11	0.34	98.93
Dim.24	0.09	0.30	99.23
Dim.25	0.08	0.26	99.49
Dim.26	0.06	0.19	99.68
Dim.27	0.04	0.12	99.80

Dimensión	Valor propio	Porcentaje de varianza	Porcentaje de varianza acumulada
Dim.28	0.03	0.09	99.89
Dim.29	0.02	0.08	99.96
Dim.30	0.01	0.03	99.99
Dim.31	0.00	0.01	100.00

Fuente: elaboración propia

Enfoque individual: En este enfoque se realizan las regresiones de cada variable respuesta Y versus los componentes principales como variables de entrada. Con un nivel de confianza del 90% $valores\, p < \alpha = 0.1$, en la tabla 19 se muestran los modelos de regresión lineal resultantes, es importante resaltar que se validaron todos los supuestos de la regresión, a saber, no multicolinealidad en las variables de entrada y homoscedasticidad, no autocorrelación y normalidad de los residuos.

De las regresiones individuales de la tabla 19 se resalta que los ajustes son mayores al 50%, excepto para Humedad, en esta última regresión la única variable de entrada fue A2, con un ajuste sólo del 7% (esta variable podría tenerse en cuenta cómo entrada). El mayor ajuste se obtuvo para la variable PIE, la explicación detallada de esta ecuación se detalla a continuación.

$$PIE = (0.000042 + 0.000008 * \text{PC2} + 0.000008 * \text{PC5} + \mathbf{0.000014} * \mathbf{PC7} + 0.000004 * \text{C6} + 0.000005 * \text{C10} + 0.000006 * \text{A1} + 0.000008 * \text{A2} - \mathbf{0.000020} * \mathbf{A3} - 0.000011 * \text{A7})^{-0.5}$$

Como variables explicatorias de PIE se tienen PC2, PC5, PC7, C6, C10, A1, A2, A3 Y A7, con mayor peso PC7 y A3. Del análisis estadístico, que contiene la composición de los PC's, se puede concluir que las variables de mayor peso en dichos componentes son P18, C4, C2, P7, P20 y C8. Así, de la Tabla 19, se puede afirmar, con un nivel de confianza del 90% que las variables P18, C4, C2, P7, P20, C8, C6, C10, A1, A2, A3, A7, explican a PIE en un 70%.

En resumen, se puede decir que las variables con mayor peso en cada componente son:
C5 (PC1), P18 (PC2), C8(PC3), P4(PC4), C4 (PC5), C3 (PC6), C2 (PC7), P5, P7, PT, NT, P20, C1, C6, A3, A6 y N1 (variables resaltadas en negrilla).

Tabla 19. Regresiones individuales - componentes

Variable de Entrada	Ecuación	Estadístico F	Valor p	R^2
PIE	$PIE = (0.000042 + 0.000008 * \mathrm{PC2} + 0.000008 * \mathrm{PC5} + \mathbf{0.000014} * \mathbf{PC7} + 0.000004 * \mathrm{C6} + 0.000005 * \mathrm{C10} + 0.000006 * \mathrm{A1} + 0.000008 * \mathrm{A2} - \mathbf{0.000020} * \mathbf{A3} - 0.000011 * \mathrm{A7})^{-0.5}$	6.606	0.0001786	77 %
T_10recob	$\mathrm{T}_{10\mathrm{recob}} = e^{(5.13989+0.05612*\mathrm{PC2}+0.06041*\mathrm{PC4}-\mathbf{0.08613}*\mathbf{PC7}-0.04960*\mathrm{P6}+\mathbf{0.12582}*\mathbf{A3}+0.05436*\mathrm{A7})}$	3.997	0.006494	50 %
T_20recob	$\mathrm{T}_{20\mathrm{recob}} = e^{(5.156223+0.060129*\mathrm{PC2}+0.082106*\mathrm{PC3}-0.088969*\mathrm{PC7}+0.030232*\mathrm{P3}-0.034352*\mathrm{P6}-0.045709*\mathrm{P9}+0.015096*\mathrm{C6}+0.031823*\mathrm{A2}+0.129194*\mathrm{A3}+0}$	4.351	0.002512	69 %
T_30recob	$\mathrm{T}_{30\mathrm{recob}} = 180.779 + \mathbf{17.923} * \boldsymbol{PC2} + 11.293 * PC3 - 12.147 * PC5 - \mathbf{16.743} * \boldsymbol{PC7} - 6.277 * P9 + 4.516 * C6 + 5.981 * A2 + 14.493 * A7$	4.341	0.002929	61 %
T_40recob	$\mathrm{T}_{40\mathrm{recob}} = (9.627 * 10^{22} + 5.165 * 10^{22} * PC2 - 6.040 * 10^{22} * PC5 + 1.849 * 10^{22} * C6)^{0.1}$	5.265	0.005449	36 %
T_50recob	$\mathrm{T}_{50\mathrm{recob}} = (9.433 * 10^{22} + \mathbf{1.071} * \mathbf{10^{23}} * \boldsymbol{PC2} - 8.501 * 10^{22} * PC5 - 7.771 * 10^{22} * PC7 - 3.784 * 10^{22} * P6 + 2.439e * 10^{22} * C6 + \mathbf{1.012} * \mathbf{10^{23}} * \boldsymbol{A6} + 6.520 * 10^{22} * A7\ )^{0.1}$	5.643	0.0006956	63 %
T_60recob	$\mathrm{T}_{60\mathrm{recob}} = (\ 4.563 * 10^{27} + \mathbf{6.469} * \mathbf{10^{27}} * \boldsymbol{PC2} - \mathbf{6.286} * \mathbf{10^{27}} * \boldsymbol{PC5} - 4.319 * 10^{27} * PC7 + 2.003 * 10^{27} * C6 + 5.375 * 10^{27} * A7 + 1.414 * 10^{27} * N3\ )^{0.08}$	6.321	0.0004317	61 %
T_70recob	$\mathrm{T}_{60\mathrm{recob}} = (\ 1.026 * 10^{35} + \mathbf{1.483} * \mathbf{10^{35}} * \boldsymbol{PC2} - 8.894 * 10^{34} * PC5 - 6.262 * 10^{34} * P6 + 3.438 * 10^{34} * C6 + 5.589 * 10^{34} * C10 + \mathbf{1.860} * \mathbf{10^{35}} * \boldsymbol{A6}\ )^{0.07}$	6.124	0.0005324	60 %
T_80recob	$\mathrm{T}_{80\mathrm{recob}} = (1.994 * 10^{23} + 2.419 * 10^{23} * PC2 - 1.431 * 10^{23} * PC5 + \mathbf{8.939} * \mathbf{10^{23}} * \boldsymbol{IT} + \mathbf{6.303} * \mathbf{10^{23}} * \boldsymbol{C6} + 1.101 * 10^{23} * C10 + 1.511 * 10^{23} * N1)^{0.1}$	10.07	$1.376 * 10^{-5}$	70 %
T_90recob	$\mathrm{T}_{90\mathrm{recob}} = (3.211 * 10^{23} + \mathbf{3.565} * \mathbf{10^{23}} * \mathbf{PC2} - \mathbf{2.771} * \mathbf{10^{23}} * \mathbf{PC5} + 1.248 * 10^{23} * \mathrm{IT} + 1.586 * 10^{23} * \mathrm{C6} + 1.982 * 10^{23} * \mathrm{C10} + 1.416 * 10^{23} * \mathrm{A2})^{0.1}$	6.53	0.000347	62 %
T_95recob	$\mathrm{T}_{95\mathrm{recob}} = 222.198 - 22.882 * PC5 + 7.268 * IT + \mathbf{12.643} * \boldsymbol{P6} + 6.409 * C6 + 9.285 * A2 + \mathbf{22.763} * \boldsymbol{N1}$	5.895	0.0006822	60 %
PFE	$PFE = 242.304 + \mathbf{18.860} * \mathbf{PC2} - \mathbf{18.036} * \mathbf{PC5} + 10.284 * \mathrm{IT} + 6.701 * \mathrm{C6} + 11.093 * \mathrm{C10} + 7.149 * \mathrm{A2} + \mathbf{20.066} * \mathbf{N1}$	9.535	$1.554 * 10^{-5}$	74 %
GRAV_API	$GRAV_API = (1.907 * 10^{-25} + \mathbf{7.903} * \mathbf{10^{-25}} * \boldsymbol{PC2} - 2.942 * 10^{-25} * PC5 + 1.561 * 10^{-25} * IT - 3.480 * 10^{-25} * P6 + 2.023 * 10^{-25} * C10 - 1.491 * 10^{-25} * A2 + \mathbf{8.381} * \mathbf{10^{-25}} * \boldsymbol{A6} + 4.758 * 10^{-25} * N1)^{-0.07}$	9.578	$1.249 * 10^{-5}$	77 %
P_INFLAM	$P_INFLAM = (3.228 * 10^{-07} - 2.529 * 10^{-07} * PC3 - 3.831 * 10^{-07} * PC4 + 1.909 * 10^{-07} * P6 + \mathbf{7.597} * \mathbf{10^{-08}} * \boldsymbol{C6} - \mathbf{4.453} * \mathbf{10^{-07}} * \boldsymbol{A3})^{-0.25}$	10.61	$1.491 * 10^{-5}$	67 %
C_COMB	$C_COMB = (8.478 * 10^{-141} + 3.036 * 10^{-141} * PC2 + 1.746 * 10^{-141} * P3 - 2.040 * 10^{-141} * P6 + \mathbf{7.056} * \mathbf{10^{-141}} * \boldsymbol{A3} + \mathbf{9.333} * \mathbf{10^{-141}} * \boldsymbol{A6} + 5.279 * 10^{-141} * N1)^{-0.03}$	7.08	0.0001986	64 %
VISCOSIDAD	$VISCOSIDAD = 3.6848 - 1.0223 * PC7 + 0.4070 * IT + 0.4633 * P3 - 0.3690 * P6 + \mathbf{2.8077} * \boldsymbol{A3} + \mathbf{1.0837} * \boldsymbol{N1}$	8.403	$5.69 * 10^{-5}$	67 %
P_ CONGE	$P_CONGE = -70.864 + 9.236 * PC1 + 9.252 * PC3 - \mathbf{18.288} * \boldsymbol{PC5} - 12.034 * PC7 + 12.719 * P6 + 2.723 * C6 + 16.354 * A3 - 8.058 * A4 + \mathbf{17.240} * \boldsymbol{N1}$	5.064	0.001056	68 %
T_CRISTAL	$T_CRISTAL = -70.587 + \mathbf{12.155} * \boldsymbol{PC3} - \mathbf{8.334} * \boldsymbol{PC5} + 7.876 * P6 + 4.586 * A1 + 5.020 * A2$	7.45	0.000213	60 %
Humedad	$Humedad = 54.505 + 6.899 * A2$	4.945	0.02949	7%

Fuente: elaboración propia

Finalmente, en la tabla 20 se presenta el resumen del efecto de los componentes hidrocarburos de mayor efecto en los resultados de las propiedades fisicoquímicas. La humedad no se tiene en cuenta, ya que los resultados indican un ajuste muy bajo (7%) indicando que se tenía que haber analizado como variable de entrada. En efecto la conclusión es clara, ya que es un componente adicional en el combustible Jet A1, aunque se tome como análisis de control de calidad, debido a los efectos que puede llegar a tener por tratarse de un combustible de aviación. En la sección siguiente se presenta la evaluación del efecto generado por la presencia de agua tomándose como variable de entrada principal.

Tabla 20. Componentes que afectan las propiedades fisicoquímicas

ANALISIS	COMPONENTES	COMPONENTES DE MAYOR PESO
Calor de combustión	P3, P6, P18, A3, A6, N1	A3 y A6
Destilación – T10	P4, P6, P18, C2, A3, A7	C2, A3
Destilación – PFE	IT, P18, C4, C6, C10, A2, N1	P18, N1
Gravedad API a 60 °F (15,56 °C)	IT, P6, P18, C4, C10, A2, A6, N1	P18, A6
Punto de congelamiento	P6, C2, C4, C5, C6, C8, A3, A4, N1	C4, N1
Punto de inflamación (Tag)	P4, P6, C6, C8, A3	C6, A3
Viscosidad cinemática -20 °C	IT, P3, P6, C2, A3, N1	A3, N1
Temperatura de inicio de cristalización (Tco)	P6, C4, C8, A1, A2	C4, C8

Fuente: elaboración propia

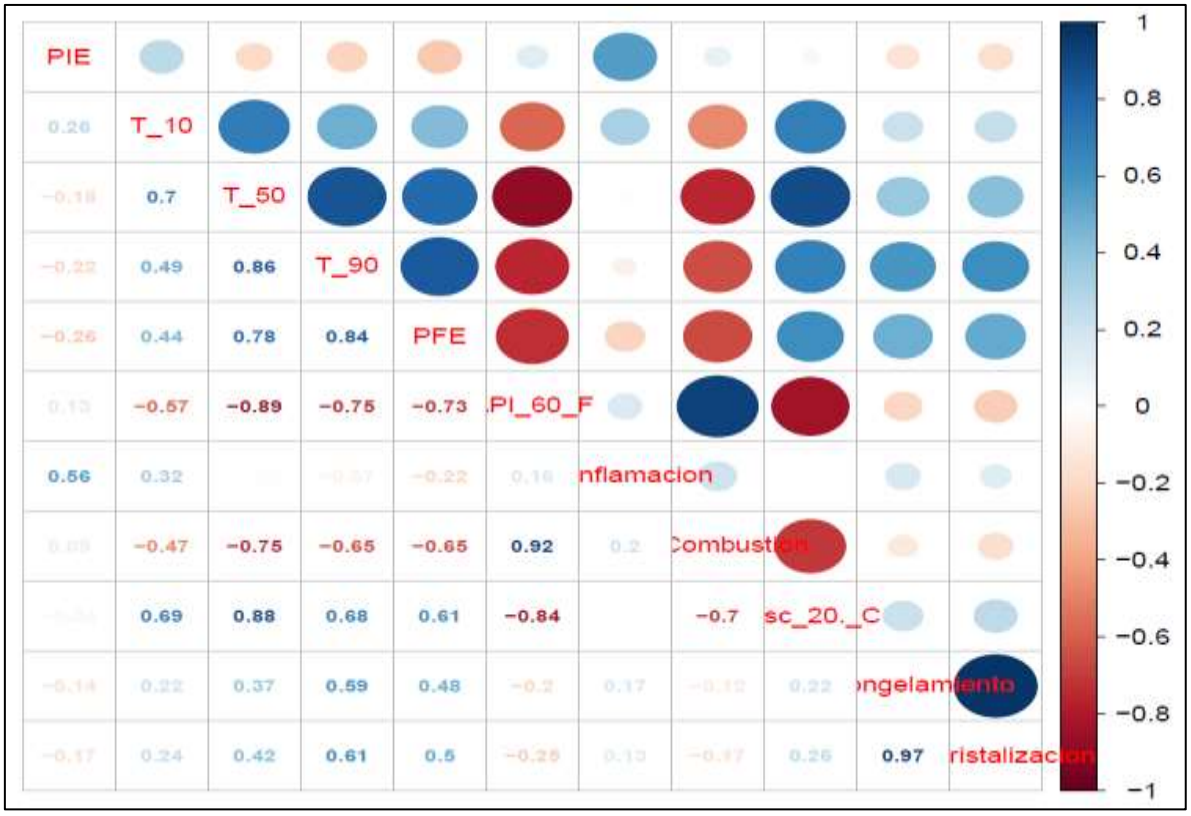
En los resultados de evaluación de conformidad (sección 4.1.3.) en los parámetros de punto de congelamiento y temperatura de cristalización se verificó una tendencia similar y de hecho son parámetros que evalúan propiedades de fluidez y están relacionadas. Por consiguientes se debería pensar que los componentes que los afectan deberían ser similares. El análisis estadístico genera componentes diferentes, aunque en común están P6, C4 y C8.

El componente de mayor peso en 4 de las propiedades fisicoquímicas evaluadas es A3. Como componentes en común que afectan a gran parte de las propiedades fisicoquímicas son P6 (7 propiedades), A3 (5 propiedades) y N1 (5 propiedades)

4.1.5. Análisis estadístico por composición de carbonos

En esta sección se presenta el análisis estadístico para evaluar el efecto de la composición por número de carbonos en las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1. La variable de entrada es la composición por número de carbonos y la variable de salida o respuesta son las propiedades fisicoquímicas. El análisis se realiza de forma similar a la sección 4.1.4.

***Correlaciones entre las variables de entrada*:** Con el fin de determinar si existen relaciones lineales significativas entre las variables que componen el conjunto de variables respuesta, se procedió a calcular la matriz de correlaciones de la figura 29.



Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 29. Matriz de correlaciones variable de salida – No. Carbono

Se considera una relación lineal fuerte (significativa) si el coeficiente de correlación es mayor que 0.5 (relación lineal directa) o menor a -0.5 (relación lineal inversa).

En la matriz de correlaciones de las variables respuesta se puede ver que todas las variables tienen relaciones lineales significativas directas (coeficiente positivo) o inversas (coeficiente negativo).

Correlaciones entre las variables de entrada: Con el fin de determinar si existen relaciones lineales significativas entre las variables que componen el conjunto de variables de entrada, se procedió a calcular la matriz de correlaciones, donde se puede observar en la tabla 21 que no todas las variables de entrada se encuentran correlacionadas.

Tabla 21. Condiciones de correlación – No. Carbonos

Correlacionadas		No correlacionadas	
C1C7	C7C9	C1C8	C5C11
C1C9	C8C8	C2C7	C5C12
C1C10	C9C11	C2C9	C5C13
C1C11	C9C12	C2C13	C6C8
C1C12	C10C11	C2C14	C6C9
C1C13		C2C15	C6C10
C1C14		C2C16	C6C11
C1C15		C2C17	C6C12
C1C16		C2C18	C6C13
C1C17		C2C19	C7C10
C1C18		C3C7	C7C11
C2C8		C3C14	C7C12
C2C10		C3C17	C8C9
C2C11		C3C18	C8C10
C2C12		C3C19	C8C11
C3C8		C4C7	C8C12
C3C9		C4C8	C9C10
C3C10		C4C9	C9C13
C3C11		C410	C10C7
C3C12		C4C12	C10C8
C3C13		C4C13	C10C9
C3C15		C4C14	C10C10
C3C16		C4C15	C10C12
C4C11		C5C7	C10C13
C7C7		C5C8	C10C14
C7C8		C5C9	C10C15
		C5C10	C11C13

Para aquellas que si lo están, con el fin de cumplir el supuesto de no multicolinealidad de la regresión (independencia de las variables de entrada), se procede a reducir la dimensionalidad de las variables con correlaciones significativas por el método de componentes principales.

Análisis de componentes principales para las variables de entrada correlacionadas: La tabla 22 contiene el resultado del análisis de componentes principales, se observa que en 8 dimensiones se acumula el 82% de la varianza de las variables de entrada correlacionadas. Así, las 31 variables originales fuertemente correlacionadas se agrupan en 8 nuevas variables independientes e incorrelacionadas llamadas componentes principales (PC's).

Tabla 22. Análisis de componentes principales para las variables de entrada correlacionadas – No. Carbonos

Dimensión	Valor propio	Porcentaje de varianza	Porcentaje de varianza acumulada
Dim.1	9.09	29.31	29.31
Dim.2	5.94	19.16	48.47
Dim.3	3.26	10.50	58.98
Dim.4	2.50	8.06	67.03
Dim.5	1.77	5.72	72.76
Dim.6	1.15	3.70	76.46
Dim.7	0.97	3.12	79.58
Dim.8	**0.83**	**2.67**	**82.25**
Dim.9	0.72	2.34	84.59
Dim.10	0.64	2.06	86.64
Dim.11	0.54	1.74	88.39
Dim.12	0.50	1.61	89.99
Dim.13	0.45	1.46	91.46
Dim.14	0.39	1.26	92.71
Dim.15	0.36	1.15	93.87
Dim.16	0.27	0.87	94.73
Dim.17	0.25	0.80	95.53
Dim.18	0.22	0.70	96.23
Dim.19	0.19	0.60	96.83
Dim.20	0.17	0.55	97.38
Dim.21	0.16	0.53	97.91
Dim.22	0.13	0.42	98.33
Dim.23	0.12	0.40	98.73
Dim.24	0.10	0.33	99.06
Dim.25	0.08	0.26	99.32
Dim.26	0.06	0.20	99.52
Dim.27	0.05	0.18	99.69
Dim.28	0.04	0.12	99.81
Dim.29	0.03	0.10	99.91

Dimensión	Valor propio	Porcentaje de varianza	Porcentaje de varianza acumulada
Dim.30	0.02	0.05	99.97
Dim.31	0.01	0.03	100.00

Fuente: elaboración propia

Relaciones lineales entre las variables de composición por número de carbonos y las variables fisicoquímicas: Las regresiones se realizaron de manera individual, es decir, las 8 componentes y las variables no correlacionadas como variables explicatorias de cada una de las variables de salida. Se usó un nivel de confianza del 90%, entonces se consideraron como significativos $valores\ p < \alpha = 0.1$. También, se validaron todos los supuestos de la regresión, además de la multicolinealidad solucionada con el análisis de componentes principales, la homoscedasticidad, no autocorrelación y normalidad de los residuos. En la Tabla 23 se encuentran las ecuaciones de cada una de las regresiones.

De la tabla 23 se puede resaltar que:

- Todas las regresiones tienen ajustes del 94% o superior.
- El PC8 es el que menos relación tiene con las variables explicadas, mientras que el PC1 aparece en todas las regresiones.
- Las variables con mayor ajuste son Punto de Congelamiento y Temperatura de inicio de Cristalización, 98% para cada una.
- La identificación de los PCs es: PC1 (C1C13), PC2 (C1C9), PC3 (C9C11), PC4 (C9C12), PC5 (C7C8), PC6 (C8C8), PC7(C7C9), PC8 (C3C16)

Tabla 23. Regresiones individuales – No. Carbonos

Variable de Entrada	Ecuación	Estadístico F	Valor p	R^2
PIE	$PIE = (2.569 * 10^{-5} + 3.097 * 10^{-6} * C2C9 + 1.254 * 10^{-6} * C2C14 + 2.19 * 10^{-5} * C2C17 + 1.41 * 10^{-5} * C2C18 + 1.34 * 10^{-5} * C3C7 + 2.00 * 10^{-5} * C3C17 - 7.86 * 10^{-6} * C3C19 + 2.32 * 10^{-6} * C4C7 + 2.77 * 10^{-6} * C4C8 + 2.06 * 10^{-6} * C4C9 + 2.94 * 10^{-6} * C410 + 3.33 * 10^{-6} * C4C12 + 2.50 * 10^{-6} * C4C13 + 1.44 * 10^{-6} * C4C14 + 4.17 * 10^{-6} * C5C8 + 2.63 * 10^{-6} * C5C11 - 2.53 * 10^{-6} * C5C12 + 1.17 * 10^{-5} * C6C8 + 7.57 * 10^{-6} * C6C9 + 1.26 * 10^{-5} * C6C10 - 9.19 * 10^{-6} * C7C10 - 1.82 * 10^{-5} * C7C11 + 6.45 * 10^{-6} * C7C12 + 1.20 * 10^{-6} * C8C9 - 2.75 * 10^{-6} * C8C10 - 2.94 * 10^{-6} * C8C11 + 1.88 * 10^{-5} * C9C13 + 5.87 * 10^{-6} * C10C7 + 2.95 * 10^{-6} * C10C8 - 3.94 * 10^{-6} * C10C9 + 1.87 * 10^{-6} * C10C10 + 4.64 * 10^{-6} * C10C13 + 3.07 * 10^{-6} * C10C14 + 6.73 * 10^{-6} * C10C15 + 2.05 * 10^{-6} * C11C13 - 5.47 * 10^{-7} * PC1 + 2.44 * 10^{-6} * PC2 - 3.23 * 10^{-6} * PC3 + 3.59 * 10^{-6} * PC4\ )^{-0.5}$	12.41	$1.524 * 10^{-10}$	94%
T_10	$T_{10} = 207.169 - 5.669 * C2C9 - 2.1603 * C2C15 + 4.2786 * C2C16 - 11.6974 * C2C17 - 11.7723 * C2C18 - 1.8518 * C3C14 - 14.3801 * C3C17 + 96.1984 * C3C18 - 2.8442 * C4C7 - 5.9888 * C4C8 - 3.6456 * C410 - 1.5091 * C4C12 - 2.3994 * C4C14 + 5.2782 * C5C7 - 3.1409 * C5C8 - 4.1572 * C5C11 - 2.9903 * C5C13 - 7.7961 * C6C8 - 5.1418 * C6C9 - 14.448 * C6C10 - 9.2056 * C6C12 - 11.9688 * C6C13 + 6.9018 * C7C10 + 20.6638 * C7C11 - 0.8451 * C8C9 + 2.1293 * C8C11 - 2.1056 * C9C10 + 2.3624 * C10C9 - 1.5029 * C10C10 - 5.4097 * C10C13 - 2.8179 * C10C14 - 9.2827 * C10C15 + 2.0781 * C11C13 - 0.6427 * PC1 + 3.1751 * PC3 - 1.9338 * PC4 + 1.3835 * PC5 - 1.5184 * PC7$	7.884	$3.387 * 10^{-8}$	91%
T_50	$T_{50} = (4.66 * 10^{11} - 3.13 * 10^{10} * C2C9 + 7.88 * 10^{9} * C2C13 + 3.97 * 10^{10} * C2C16 - 6.81 * 10^{10} * C2C17 - 1.80 * 10^{11} * C2C18 - 9.43 * 10^{9} * C3C14 - 1.79 * 10^{10} * C3C19 - 1.83 * 10^{10} * C4C7 - 1.56 * 10^{10} * C4C9 - 1.22 * 10^{10} * C4C14 + 1.38 * 10^{10} * C5C9 - 1.57 * 10^{10} * C5C10 + 2.88 * 10^{10} * C5C12 - 6.53 * 10^{10} * C6C9 - 4.54 * 10^{10} * C6C10 - 1.52 * 10^{10} * C6C11 + 3.62E * 10^{10} * C7C12 - 5.55E * 10^{9} * C8C10 - 1.71 * 10^{10} * C9C10 + 5.36 * 10^{10} * C10C8 - 2.06 * 10^{10} * C10C9 - 1.36 * 10^{10} * C10C12 + 1.50 * 10^{10} * C11C13 - 8.58 * 10^{9} * PC1 + 2.24 * 10^{10} * PC2 + 1.03 * 10^{10} * PC3 - 1.22 * 10^{10} * PC4 + 1.21 * 10^{10} * PC5 - 1.16 * 10^{10} * PC7)^{0.2}$	26.5	$2.2 * 10^{-16}$	95%

T_90	$T_{90} = (25727353 - 1.21 * 10^{6} * C2C9 - 253288 * C2C13 - 365198 * C2C14 + 2020655 * C2C16 - 1016324 * C2C19 - 2236590 * C3C7 - 975848 * C3C14 + 1569913 * C3C17 - 989997 * C3C19 - 457928 * C4C7 - 800893 * C410 - 313447 * C4C12 - 1576803 * C4C13 - 539747 * C5C10 + 750306 * C5C12 - 726573 * C5C13 - 769332 * C6C11 - 1938614 * C7C11 + 736573 * C7C12 - 5.27 * 10^{5} * C8C10 - 1701843 * C8C12 - 370268 * C9C10 + 599743 * C10C8 - 6.9810^{5} * C10C9 - 412280 * C10C10 - 491389 * C10C12 - 1.5010^{6} C10C13 - 1.68 * 10^{6} * C10C15 - 411843 * PC1 + 391120 * PC2 + 663989 * PC3 - 273478 * PC4 + 1107738 * PC5 - 458444 * PC7)^{0.3}$	17.57	$6.874 * 10^{-14}$	94%
PFE	$PFE = 274.5426 - 8.6282 * C1C8 - 3.1558 * C2C9 - 1.3468 * C2C13 - 2.066 * C2C14 - 41.2425 * C2C17 - 37.2018 * C2C18 - 3.2135 * C3C14 + 3.6052 * C3C19 + 3.073 * C4C9 + 2.6661 * C4C12 - 6.2658 * C5C7 - 3.1205 * C5C9 + 6.3708 * C5C12 - 7.8079 * C6C10 + 4.3384 * C6C11 + 9.1043 * C6C12 + 9.1233 * C6C13 + 6.2626 * C7C10 - 12.1323 * C7C11 + 6.6917 * C7C12 + 4.928 * C8C11 + 5.9137 * C9C10 + 7.3939 * C10C8 + 2.6091 * C10C9 + 1.4598 * C10C10 - 11.0091 * C10C13 - 1.4271 * PC1 + 0.8031 * PC2 + 1.7564 * PC5 + 3.3359 * PC6 + 1.4288 * PC7 - 1.2678 * PC8$	17.24	$3.247 * 10^{-14}$	94%
API_60_F	$API_{60_F} = (1.04 * 10^{-24} - 7.83 * 10^{-26} * C2C9 - 1.51 * 10^{-25} * C2C15 + 2.03 * 10^{-25} * C2C16 - 2.59 * 10^{-25} * C3C17 - 5.62 * 10^{-26} * C3C19 - 6.45 * 10^{-26} * C4C9 - 4.63 * 10^{-26} * C410 - 7.02 * 10^{-26} * C4C12 + 6.01 * 10^{-26} * C5C8 - 2.14 * 10^{-25} * C6C9 - 8.68 * 10^{-26} * C6C12 - 2.09 * 10^{-25} * C6C13 - 1.55 * 10^{-25} * C7C10 + 1.88 * 10^{-25} * C7C11 + 2.29 * 10^{-25} * C7C12 - 3.81 * 10^{-26} * C8C9 - 6.39 * 10^{-26} * C8C12 - 5.31 * 10^{-26} * C9C10 - 9.93 * 10^{-26} * C10C7 - 8.38 * 10^{-26} * C10C9 - 4.03 * 10^{-26} * C10C12 - 9.96 * 10^{-26} * C10C15 + 6.39 * 10^{-26} * C11C13 - 1.90 * 10^{-26} * PC1 + 4.02 * 10^{-26} * PC2 + 8.11 * 10^{-26} * PC3 - 4.34 * 10^{-26} * PC4 + 2.84 * 10^{-26} * PC5 + 6.37 * 10^{-26} * PC6 - 6.12 * 10^{-26} * PC7)^{-0.067}$	20.73	$5.159 * 10^{-16}$	94%
P_Inflamación	$P_{Inflamacion} = (1.54 * 10^{-2} - 9.00 * 10^{-4} * C1C8 + 1.05 * 10^{-3} * C2C9 - 3.22 * 10^{-4} * C2C13 - 8.41 * 10^{-4} * C2C14 - 1.01 * 10^{-3} * C2C16 - 4.47 * 10^{-3} * C2C18 + 1.64 * 10^{-3} * C2C19 + 5.36 * 10^{-3} * C3C7 + 4.15 * 10^{-4} * C3C14 + 8.10 * 10^{-3} * C3C17 + 1.08 * 10^{-3} * C4C7 + 1.68 * 10^{-3} * C4C8 + 2.14 * 10^{-3} * C4C9 + 1.35 * 10^{-3} * C4C12 + 6.71 * 10^{-4} * C4C14 - 1.15 * 10^{-3} * C4C15 - 5.02 * 10^{-4} * C5C9 + 1.02 * 10^{-3} * C5C11 + 1.22 * 10^{-3} * C5C12 + 1.30 * 10^{-3} * C5C13 + 4.94 * 10^{-3} * C6C9 - 1.66 * 10^{-3} * C6C10 + 3.17 * 10^{-3} * C6C12 + 2.08 * 10^{-3} * C6C13 - 9.27 * 10^{-3} * C7C11 + 1.10 * 10^{-3} * C8C9 - 5.78 * 10^{-4} * C8C10 + 1.94 * 10^{-3} * C8C12 + 1.79 * 10^{-3} * C9C10 + 7.13 * 10^{-3} * C9C13 + 2.93 * 10^{-3} * C10C7 + 9.29 * 10^{-4} * C10C8 + 9.99 * 10^{-4} * C10C10 - 4.84 * 10^{-4} * C10C12 - 2.18 * 10^{-3} * C10C13 + 3.37 * 10^{-3} * C10C15 - 1.10 * 10^{-3} * C11C13 + 2.28 * 10^{-4} * PC1 + 9.22 * 10^{-4} * PC2 - 7.48 * 10^{-4} * PC3 + 8.45 * 10^{-4} * PC4 + 3.84 * 10^{-4} * PC5 - 4.27 * 10^{-4} * PC6 + 8.46 * 10^{-4} * PC7)^{-1}$	9.814	$3.283 * 10^{-8}$	95%

C_Combustión bruto	$C_Combustion = 46326.953 + 40.049 * C1C8 - 248.163 * C2C7 - 56.923 * C2C15 + 131.979 * C2C16 + 234.547 * C2C17 + 415.456 * C3C17 - 54.755 * C3C19 - 96.462 * C4C13 - 118.732 * C6C8 - 108.447 * C6C10 - 68.671 * C6C11 - 184.263 * C7C11 + 52.974 * C8C9 - 28.12 * C8C10 - 63.662 * C8C11 - 76.324 * C8C12 - 52.951 * C9C10 + 305.484 * C9C13 - 98.025 * C10C7 - 41.012 * C10C9 - 20.361 * C10C10 - 102.861 * C10C12 - 164.259 * C10C14 - 44.946 * C11C13 + 28.909 * PC1 - 35.521 * PC3 - 63.493 * PC6 + 28.075 * PC7$	53.9	$2.2 * 10^{-16}$	97%
Visc_20 _C	$Visc_{20_C} = 5.22 + 0.57 * C2C16 - 1.41 * C2C18 + 0.11 * C3C14 - 0.68 * C3C17 - 0.16 * C4C9 - 0.12 * C410 - 0.14 * C4C12 - 0.30 * C4C13 - 0.14 * C4C14 - 0.45 * C4C15 + 0.18 * C5C12 - 0.32 * C6C9 + 0.38 * C7C11 + 0.42 * C7C12 + 0.08 * C8C11 - 0.52 * C10C15 + 0.13 * C11C13 - 0.06 * PC1 + 0.13 * PC2 + 0.11 * PC3 - 0.14 * PC4 - 0.10 * PC7$	22.09	$2.2 * 10^{-16}$	91%
P_Congelamiento	$P_{Congelamiento} = -55.6 + 3.60 * C2C7 - 1.23 * C2C9 + 0.45 * C2C14 + 2.76 * C2C16 - 4.27 * C3C17 + 1.06 * C3C19 + 1.27 * C5C7 + 1.40 * C5C8 + 0.67 * C5C9 - 0.94 * C5C11 + 0.98 * C5C12 - 1.61 * C6C11 - 1.72 * C6C12 - 2.52 * C6C13 + 5.96 * C7C11 + 0.45 * C8C10 - 0.82 * C8C11 - 1.04 * C8C12 - 1.41 * C9C10 - 0.90 * C10C7 + 0.70 * C10C9 - 0.42 * C10C10 - 2.23 * C10C14 - 2.39 * C10C15 + 0.76 * C11C13 - 1.20 * PC1 - 0.20 * PC2 - 1.03 * PC3 - 0.69 * PC4 - 0.60 * PC5 + 0.63 * PC7 + 0.53 * PC8$	52.69	$2.2 * 10^{-16}$	98%
T_Cristalización	$T_{Cristalizacion} = -52.73 - 1.02 * C2C9 - 0.35 * C2C13 + 0.54 * C2C14 + 2.61 * C2C16 + 10.75 * C2C17 + 5.23 * C2C18 + 0.55 * C3C14 - 2.52 * C3C17 - 0.66 * C3C19 - 1.08 * C4C9 + 0.84 * C410 + 3.60 * C4C15 + 1.18 * C5C8 + 1.24 * C5C9 - 1.31 * C5C10 - 1.37 * C5C11 - 1.24 * C5C13 + 3.93 * C6C8 - 1.71 * C6C9 + 3.60 * C6C10 - 1.30 * C6C11 - 2.01 * C6C12 - 3.23 * C6C13 - 0.42 * C8C9 + 0.38 * C8C10 - 2.44 * C8C11 - 1.81 * C8C12 - 2.05 * C9C10 - 1.67 * C10C7 - 1.67 * C10C9 - 1.03 * C10C10 - 1.11 * C10C14 + 0.86 * C11C13 - 1.39 * PC1 + 0.36 * PC2 - 0.69 * PC3 - 0.35 * PC4$	42.67	$2.2 * 10^{-16}$	98%

Fuente: elaboración propia

Con base el análisis de resultados de los numeral 4.1.2 y el análisis estadístico, en la tabla 24 se presenta el resumen del efecto de la composición por No. Carbonos en los resultados de las propiedades fisicoquímicas.

Tabla 24. Composición por No. Carbonos que afectan las propiedades fisicoquímicas

Parámetro	Variables influyentes							Variables de más peso
T10% recobrado	C1C9	**C1C13**	C2C9	C2C15	C2C16	C2C17	C2C18	C3C18
	C3C14	**C3C17**	C3C18	C4C7	C4C8	C4C10	C4C12	C6C10
	C4C14	C5C7	C5C8	C5C11	C5C13	C6C8	C6C9	**C7C11**
	C6C10	C6C12	C6C13	C7C8	C7C9	C7C10	C7C11	
	C8C11	C9C10	C9C11	C9C12	C10C9	C10C10	C10C13	
	C10C14	C10C15	C11C13					
Punto Final de ebullición	C1C8	C1C9	**C1C13**	C2C9	C2C13	C2C14	C2C17	C2C17
	C2C18	C3C14	C3C16	C3C19	C4C9	C4C12	C5C7	C2C18
	C5C9	C5C12	C6C10	C6C11	C6C12	C6C13	C7C8	**C7C11**
	C7C9	C7C10	C7C11	C7C12	C8C8	C8C11	C9C10	
	C10C8	C10C9	C10C10	C10C13				
Gravedad API a 60 °F (15,56 °C)	C1C9	**C1C13**	C2C9	C2C15	C2C16	C3C17	C3C19	**C3C17**
	C4C9	C4C10	C4C12	C5C8	C6C9	C6C12	C6C13	C6C9
	C7C8	C7C9	C7C10	**C7C11**	C7C12	C8C8	C8C9	C7C12
	C8C12	C9C10	C9C11	C9C12	C10C7	C10C9	C10C12	
	C10C15	C11C13						
Punto de Inflamación	C1C8	C1C9	**C1C13**	C2C9	C2C13	C2C14	C2C16	**C3C17**
	C2C18	C2C19	C3C7	C3C14	C3C17	C4C7	C4C8	**C7C11**
	C4C9	C4C12	C4C14	C4C15	C5C9	C5C11	C5C12	C9C13
	C5C13	C6C9	C6C10	C6C12	C6C13	C7C8	C7C9	
	C7C11	C8C8	C8C9	C8C10	C8C12	C9C10	C9C11	
	C9C12	C9C13	C10C7	C10C8	C10C10	C10C12	C10C13	
	C10C15	C11C13						
Calor de Combustión	C1C8	**C1C13**	C2C7	C2C15	C2C16	C2C17	C3C17	C2C17
	C3C19	C4C13	C6C8	C6C10	C6C11	C7C9	**C7C11**	**C3C17**
	C8C8	C8C9	C8C10	C8C11	C8C12	C9C10	C9C11	C9C13
	C9C13	C10C7	C10C9	C10C10	C10C12	C10C14	C11C13	
	C1C9	**C1C13**	C2C16	C2C18	C3C14	C3C17	C4C9	C2C16
	C4C10	C4C12	C4C13	C4C14	C4C15	C5C12	C6C9	C2C18

Parámetro	Variables influyentes							Variables de más peso
Viscosidad a -20 °C	C7C9	**C7C11**	C7C12	C8C11	C9C11	C9C12	C10C15	C3C17
	C11C13							
Punto de Congelamiento	C1C9	**C1C13**	C2C7	C2C9	C2C14	C2C16	C3C16	C2C7
	C3C17	C3C19	C5C7	C5C8	C5C9	C5C11	C5C12	**C3C17**
	C6C11	C6C12	C6C13	C7C8	C7C9	C7C11	C8C10	**C7C11**
	C8C11	C8C12	C9C10	C9C11	C9C12	C10C7	C10C9	
	C10C10	C10C14	C10C15	C11C13				
Temperatura de inicio de Cristalización	C1C9	**C1C13**	C2C9	C2C13	C2C14	C2C16	C2C17	C2C17
	C2C18	C3C14	**C3C17**	C3C19	C4C9	C4C10	C4C15	C2C18
	C5C8	C5C9	C5C10	C5C11	C5C13	C6C8	C6C9	C6C8
	C6C10	C6C11	C6C12	C6C13	C8C9	C8C10	C8C11	
	C8C12	C9C10	C9C11	C9C12	C10C7	C10C9	C10C10	
	C10C14	C11C13						

Fuente: elaboración propia

De la tabla 24, se puede ver que la clase de hidrocarburos que tiene efectos sobre todas las propiedades fisicoquímicas es C1C13 (parafínicos normales de numero de carbono 13) y otra clase de hidrocarburos que influye en todas las propiedades estudiadas a excepción de la temperatura de inicio de cristalización es C7C11 (alquilaromaticos mono ramificados de numero de carbono 11), incluso como variable de más peso en varias propiedades. Aspecto similar ocurre con la clase de hidrocarburos C3C17 (isoparafinicos (isoalcanos) altamente ramificados de No. Carbono 17) a excepción del PFE..

4.1.6. Comparación de resultados de composición

Realizando una comparación entre los valores reportados por algunos autores en sus investigaciones. En la tabla 25, se puede observar que hay diversas técnicas avanzadas que se utilizan para la identificación y cuantificación de la composición del combustible Jet A1, pero son dedicadas a la estimación de ciertos componentes de interés y al momento del tratamiento de datos (normalización) los valores cambian de técnica a técnica. Otro aspecto para tener en cuenta es la procedencia de las muestras, ya que el combustible Jet A1, al ser un derivado del petróleo varía su composición dependiendo de la composición que tenga este. Por consiguiente, identificar la composición y el efecto que pueden tener sus componentes en las propiedades fisicoquímicas del combustible que se está utilizando en un país, se

vuelve un tema de gran importancia, para efectos de control de los procesos en las refinerías y control de calidad del combustible durante su transporte y almacenamiento.

Tabla 25. Comparación de resultados obtenidos - componentes

Autores	**Kallio et al. (2014)**	**Pearson et al. (2015)**	**Vozka and Kilaz, (2019)**	**Vozka and Kilaz, (2019)**	**Esta investigación (2020)**
Técnica Analítica	**Review**	**GC-MS Y GC-FID**	**HPLC**	**GCXGC-GID**	**GC-MS**
Componente	**% masa**	**% masa**	**% masa**	**% masa**	**% masa**
Parafínicos (saturados)	49.5	52.51	82.2	82.3	67.85
Nafténicos (ciclosaturados)	27.6	24.89			15.12
Aromáticos	14.1	23.23	17.8	17.7	11.86
Naftalenos					3.90
Tetralinas e indanos					1.27
Otros hidrocarbonos	8.7				

Fuente: elaboración propia

En los trabajos realizados por Van der Westhuizen et al. (2011), con la aplicación de la técnica GCxGC-FID realizan una identificación y cuantificación de la composición con base en número de carbonos, encontrando que la composición está distribuida entre 5 y 19 carbonos parafínicos (saturados), cicloparafínicos (ciclosaturados), aromáticos y naftalenos, con una composición predominante entre los carbonos 9 y 14 (91.21 % masa). Según Shi et al. (2017), en su investigación usando la técnica GCXGC-MS/FID para diversos tipos de combustibles de aviación tipo turbina, encuentran que la composición con base en el número de carbonos se encuentra distribuida entre 7 y 19 carbonos, distribuidos en 10 clases de hidrocarburos (ver tabla 4). En esta investigación se encuentra que la composición predominante del Jet A1 de acuerdo con el número de carbonos esta entre 9 y 14 carbonos (87.97 % masa promedio)

4.2. EFECTO GENERADO EN EL JET A1 POR UN PROCESO DE MEZCLADO CON AGUA

La evaluación del efecto generado en el combustible Jet A1 por un proceso de mezclado con agua será presentada de la siguiente forma:

- Diseño de experimentos
- Evaluación composicional y evaluación de la conformidad.
- Análisis estadístico.

4.2.1. Diseño de experimentos

En un lote de combustible Jet A1 de 20 litros garantizado su homogeneidad y estabilidad mediante el almacenamiento en un container de vidrio y en un ambiente de temperatura controlada entre 20 °C a 23 °C, se prepararon muestras de 500 ml para realizar el diseño de experimentos que se muestra en la tabla 26. El tiempo de mezclado hasta observar visualmente dilución fue superior a 16 (concentraciones superiores a 1000 ppm)

En la tabla 16, se presenta la matriz de experimentos realizada con las variables de entrada y las variables de salida o respuesta y que posteriormente fue analizado estadísticamente mediante software libre R versión 3.6.2.

Tabla 26. Diseño de experimentos realizado

NIVEL	VARIABLE DE ENTRADA	VARIABLE DE SALIDA	
	CONCENTRACION DE AGUA (ppm)	COMPOSICION	PROPIEDADES FISICOQUIMICAS
Nivel 0	0	- Componentes parafínicos - Componentes nafténicos - Componentes aromáticos - Componentes naftalenos - Componentes indanos y tetralinas	- Calor de combustión - Destilación - Gravedad API - Punto de congelamiento - Punto de inflamación - Temperatura de inicio de cristalización (Tco) - Viscosidad.
Nivel 1	Humedad relativa del aire (10 ppm)		
Nivel 2	100		
Nivel 3	200		
Nivel 4	300		
Nivel 5	500		
Nivel 6	700		
Nivel 7	1000		
Nivel 8	1500		
Nivel 9	3000		
Nivel 10	5000		
Nivel 11	10000		

Esta matriz indica el número de ensayos que se debe realizar con dos replicas para obtenerse un buen modelo de estudio en lo que respecta al efecto generado por el contacto de agua con el combustible Jet A1. Con este diseño de experimentos se podrá establecer la concentración de agua que al poner en contacto y darse un proceso de mezclado y homogenización (agua en estado de dilución), afecta la composición y las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1 dejándolo por fuera de especificaciones de calidad (Evaluación de conformidad)

4.2.2. Evaluación composicional y evaluación de la conformidad.

A las muestras preparadas de acuerdo con el diseño de experimentos descrito en la sección 4.2.1 se realizaron evaluación de composición y caracterización fisicoquímica del combustible Jet A1 para poder realizar la evaluación de conformidad.

4.2.2.1. Evaluación composicional

Evaluación composicional colectiva: En la tabla 27 se presenta los resultados obtenidos de composición por tipo de familia de hidrocarburos y en el anexo 3 se presenta la composición completa identificada.

De la tabla 27 y la figura 30 se puede ver:

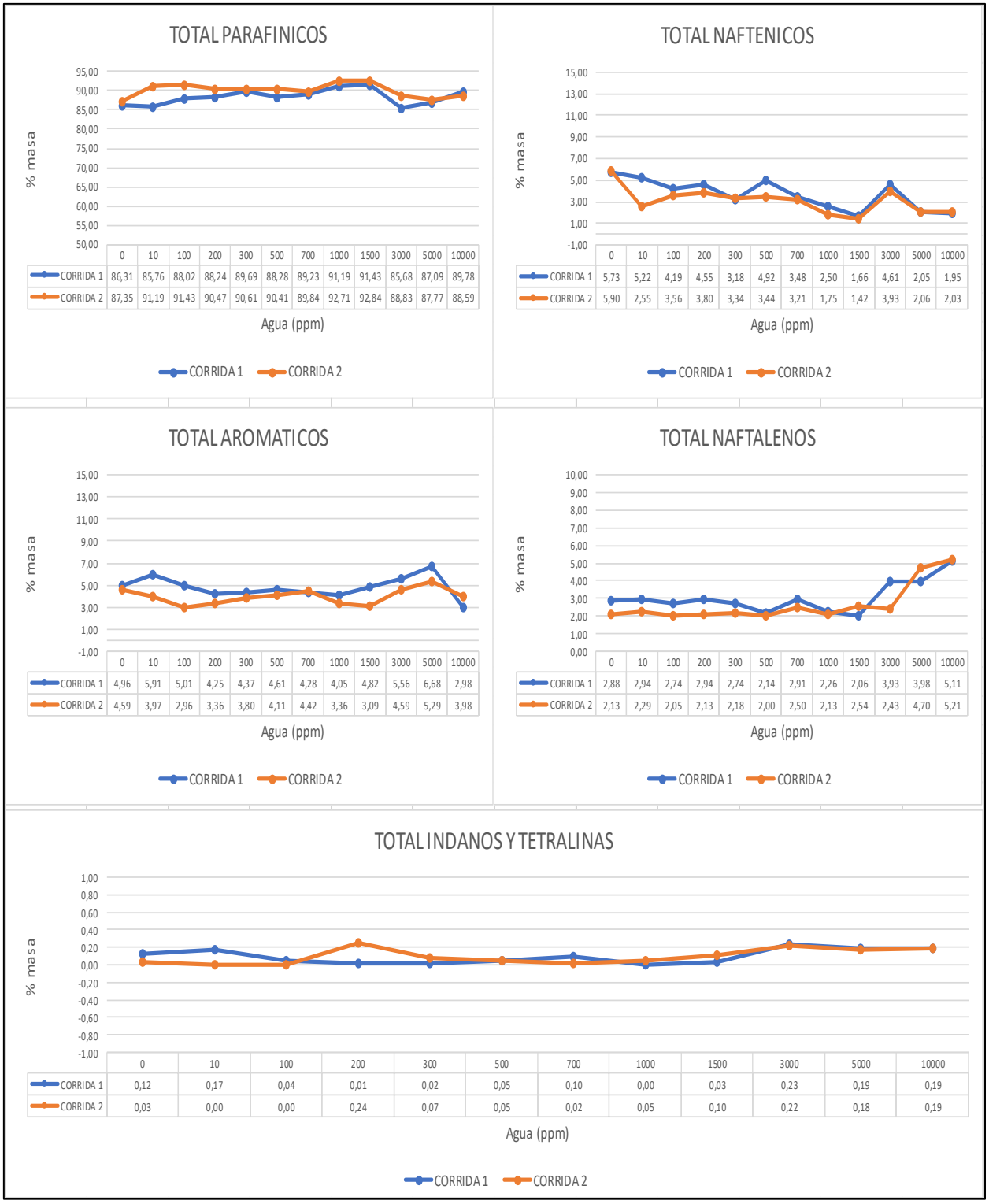
- El total de componentes parafínicos es el más alto corroborando lo encontrado en la sección 4.1.1.2. y se mantuvo estable en las diferentes cantidades de agua en que estuvo sometido el Jet A1. Los cambios encontrados con respecto al % masa que presentan esta familia de hidrocarburos es pequeño y no mantiene una tendencia.
- El total de componentes nafténicos presenta una tendencia a disminuir el % masa hasta 5000 ppm de agua donde tiene a estabilizarse. La composición cambia desde 5.73 % masa y 5.90 % masa hasta 1.95 % masa y 2.03 % masa para las corridas 1 y 2 respectivamente.
- El total de componentes aromáticos presenta cambios, pero no son muy notorios. Los principales cambios se observan en 5000 ppm donde presenta un aumento tanto para las corridas 1 y 2, pero en 10000 ppm presento una disminución con respecto a la composición inicial respectivamente.
- El total de componentes nafténicos presenta una tendencia constante hasta 1500 ppm, pero de 3000 ppm a 10000 ppm tiende aumentar. Se puede visualizar un cambio desde 2.88 % masa de composición inicial hasta llegar a 5.11% masa en 10000 ppm de agua para la corrida 1 y 2.13 % masa a 5.21 % masa para la corrida 2.

- El total de compuestos tetralinas e indanos es muy estable desde su composición inicial hasta las 10000 ppm de agua. Su contenido es muy pequeño inferior a 0.25% masa.

Es de resaltar que para determinar la composición de estas muestras se siguió la misma metodología usada por GC-MS, pero para poder ver efectos y tendencias de componentes puros, fue necesario aplicar un criterio técnico de presencia superior al 50 % en todas las muestras. Lo que se pretende es visualizar cambios y tendencias en el total de componentes y en componentes en particular.

Tabla 27. Resultados por familia de hidrocarburos generados por proceso de mezclado agua - Jet A1

Corrida	Muestra	Concentración (ppm)	Total parafínicos (% masa)	Total nafténicos (% masa)	Total aromáticos (% masa)	Total naftalenos (% masa)	Total indanos y tetralinas (% masa)
1	D0	0	86,31	5,73	4,96	2,88	0,12
	D1	10	85,76	5,22	5,91	2,94	0,17
	D2	100	88,02	4,19	5,01	2,74	0,04
	D3	200	88,24	4,55	4,25	2,94	0,01
	D4	300	89,69	3,18	4,37	2,74	0,02
	D5	500	88,28	4,92	4,61	2,14	0,05
	D6	700	89,23	3,48	4,28	2,91	0,10
	D7	1000	91,19	2,50	4,05	2,26	0,00
	D8	1500	91,43	1,66	4,82	2,06	0,03
	D9	3000	85,68	4,61	5,56	3,93	0,23
	D10	5000	87,09	2,05	6,68	3,98	0,19
	D11	10000	89,78	1,95	2,98	5,11	0,19
2	D0R	0	87,35	5,90	4,59	2,13	0,03
	D1R	10	91,19	2,55	3,97	2,29	0,00
	D2R	100	91,43	3,56	2,96	2,05	0,00
	D3R	200	90,47	3,80	3,36	2,13	0,24
	D4R	300	90,61	3,34	3,80	2,18	0,07
	D5R	500	90,41	3,44	4,11	2,00	0,05
	D6R	700	89,84	3,21	4,42	2,50	0,02
	D7R	1000	92,71	1,75	3,36	2,13	0,05
	D8R	1500	92,84	1,42	3,09	2,54	0,10
	D9R	3000	88,83	3,93	4,59	2,43	0,22
	D10R	5000	87,77	2,06	5,29	4,70	0,18
	D11R	10000	88,59	2,03	3,98	5,21	0,19



Fuente: elaboración propia

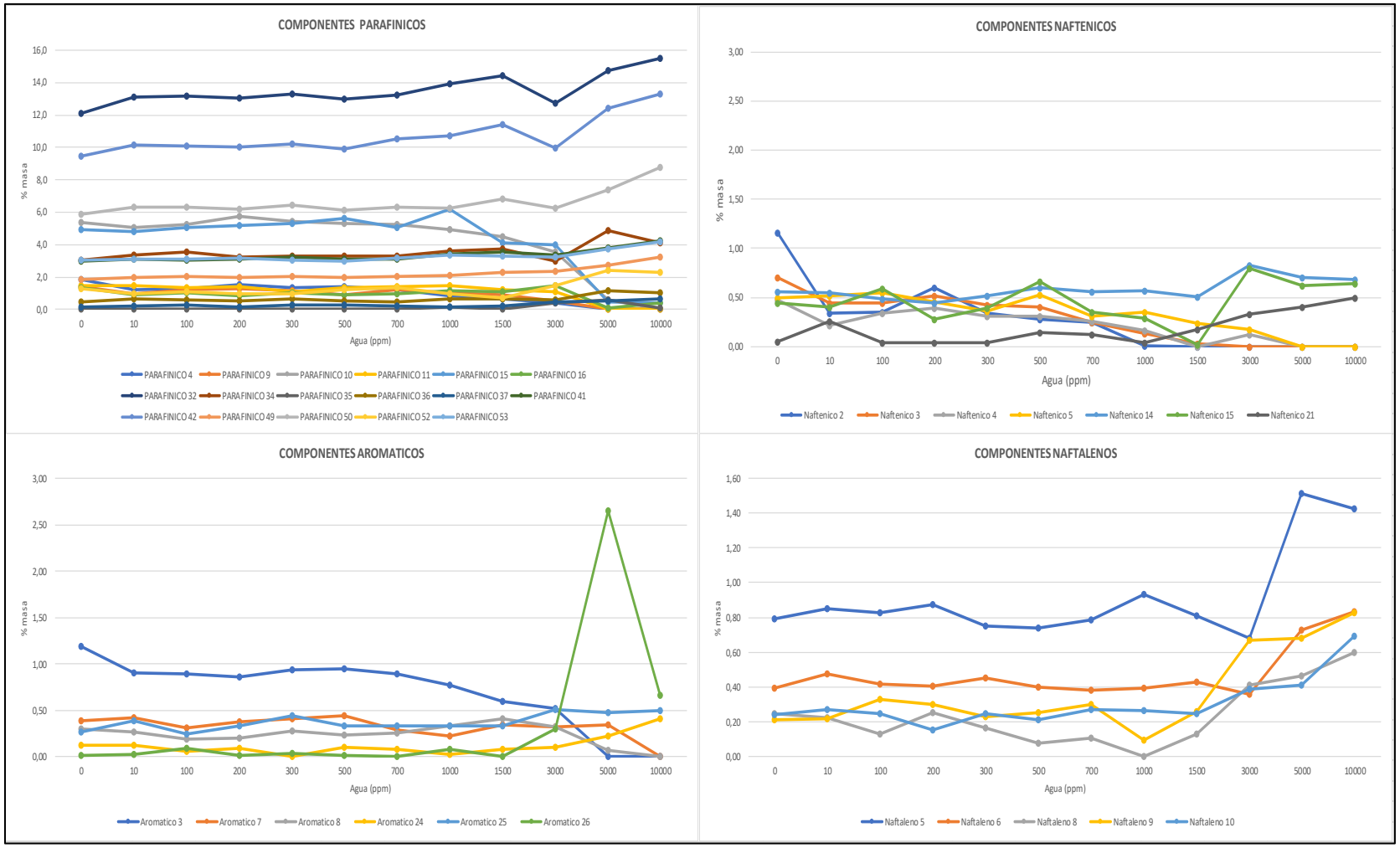
Figura 30. Efecto en familia de hidrocarburos por proceso de mezclado agua - Jet A1

Evaluación composicional individual: En la figura 31 se presenta los componentes individuales que desde un punto de vista técnico se observa variaciones en su comportamiento. Se identificaron 122 componentes normalizados con un 50% mínimo de presencia en cada muestra analizada. La familia con mayor número de componentes es la parafínica con 56, seguido de la familia aromática con 31 y luego las familias de compuestos nafténicos, naftalenos e indanos con 21, 11 y 3 componentes respectivamente.
Aunque en algunas muestras aparecían tetralinas no cumplían con el requisito implementado para realizar el análisis (presencia superior a 50%) y su cantidad era muy pequeña, prácticamente despreciable, por consiguiente, no permitía verificar el efecto del contacto de agua en los componentes individuales.

En la figura 31 se presenta los promedios de las corridas 1 y 2, ya que presentan comportamientos y valores similares como se puede ver en el anexo 3. De la figura 31 se puede inferir:

- Hay variación en 17 componentes parafínicos (30%) con un cambio pronunciado en 3000 ppm agua agregada. En esta cantidad se ve reflejado un aumento en los componentes 32, 34, 36, 37, 41, 42, 49, 50, 52 y 53 y una disminución en los componentes 4, 9, 10, 11, 15 y 16. Desde 1000 ppm de agua aparece un nuevo componente parafínico 35.
- Se presenta una variación en 7 componentes nafténicos (33%) con un cambio pronunciado en 3000 ppm agua. En esta cantidad de agua agreagada se ve reflejado un aumento en los componentes 15 y 21 y una disminución en los componentes 2, 3, 4 y 5. No se presenta aparición de nuevos componentes nafténicos.
- Realizando un análisis similar a los anteriores, se encuentra una variación en 6 componentes aromáticos (19%) con un cambio pronunciado en la misma cantidad de agua agregada (3000 ppm agua). En esta etapa se ve reflejado un aumento en los componentes 24, 25 y 26 y una disminución en los componentes 3, 7 y 8. No se presenta aparición de nuevos componentes aromáticos.
- Con los componentes naftalenos se observa una variación en 5 componentes naftalenos (45%) con tendencia todos al aumento. Dichos componentes son 5, 6, 8, 9 y 10. No se presenta aparición de nuevos componentes naftalenos.

La discusión sobre los cambios presentados en estos componentes será realizada después del análisis de evaluación de conformidad y análisis estadístico. Se considera pertinente los resultados obtenidos de estas dos secciones para obtener un mejor análisis.



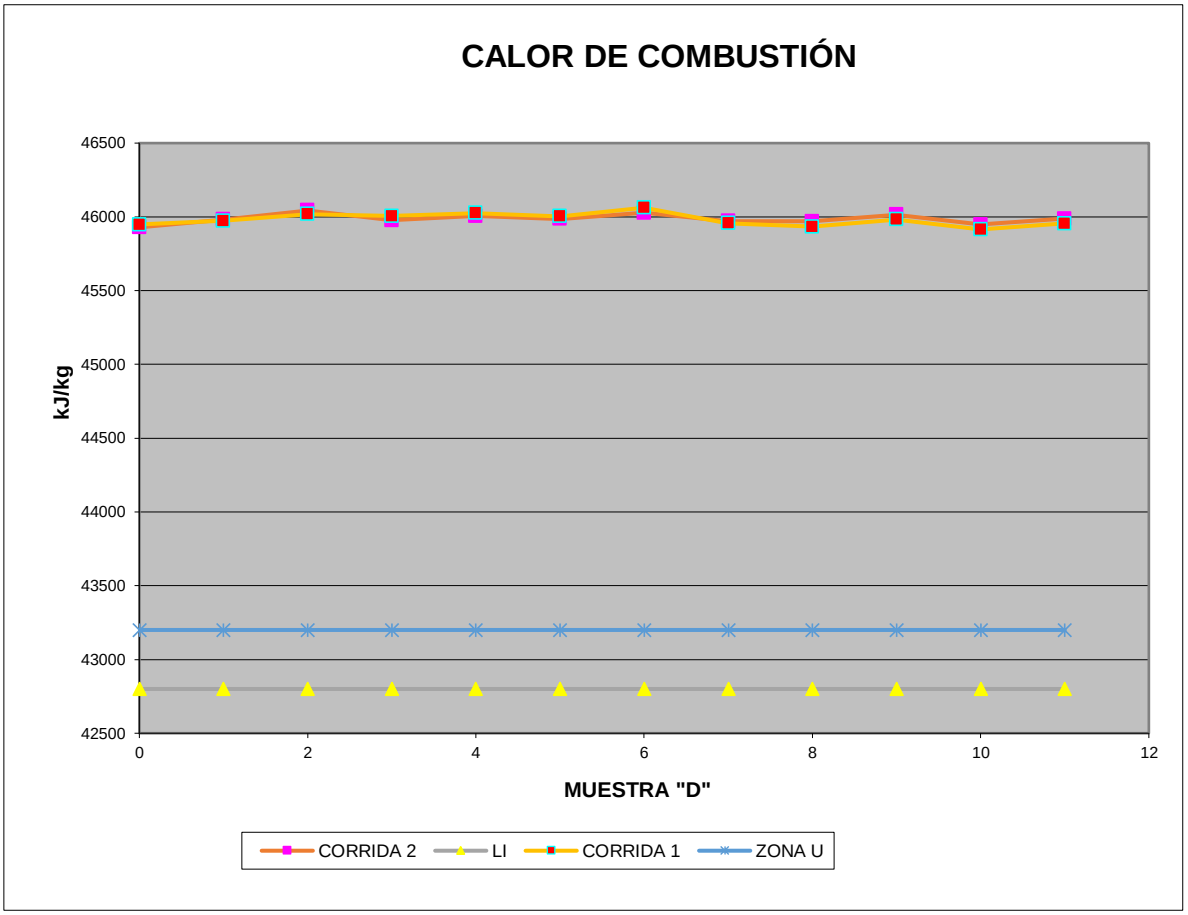
Fuente: elaboración propia

Figura 31. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en componentes individuales

4.2.2.2. Evaluación de la conformidad

La evaluación de la conformidad de las propiedades fisicoquímicas es una de las herramientas para verificar la aceptación (conforme), no aceptación (no conforme) o que está en la zona de incertidumbre (no se pude afirmar nada).
Con base en las especificaciones de calidad encontradas en las normas ASTM D1655 (ASTM, 2020) y NTC 1899 (ICONTEC, 2018), se puede ver reflejado lo siguiente:

Calor de combustión bruto: En la figura 32, se puede ver que esta propiedad permanece prácticamente constante en todas las concentraciones de agua a las estuvo sometidas las muestras de Jet A1. En análisis de evaluación de conformidad indica que el 100 % de las muestras fueron conformes para las corridas y 2.



Fuente: elaboración propia

Figura 32. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en el calor de combustión

Destilación: En la figura 33 se presenta el comportamiento presentado para el punto inicial de ebullición (PIE), temperatura al 10% del recobrado (T10), temperatura al 50% del recobrado (T50) y el punto final de ebullición (PFE). Se observa un incremento paulatino en el PIE hasta alcanzar alrededor de 205 °C (Máximo permitido para la T10), induciendo en que hay perdidas de componentes livianos.

El incremento se hace más notorio en cantidades de agua agregada mayores a 3000 ppm (D9). Un comportamiento similar presenta la T10 ingresando a la zona de incertidumbre en la muestra D10 y saliendo por fuera de especificaciones la muestra D11 (muestra no conforme). Se realiza énfasis en el comportamiento de la T50, por caracterizarse este punto como uno de los más estables en la curva de destilación y que sirve para análisis de índice de cetano. Parámetro de evaluación necesario en ciertos combustibles para evaluar las características de desempeño en el motor. El comportamiento es muy estable hasta la muestra D9 donde se empieza a generar un pequeño incremento.

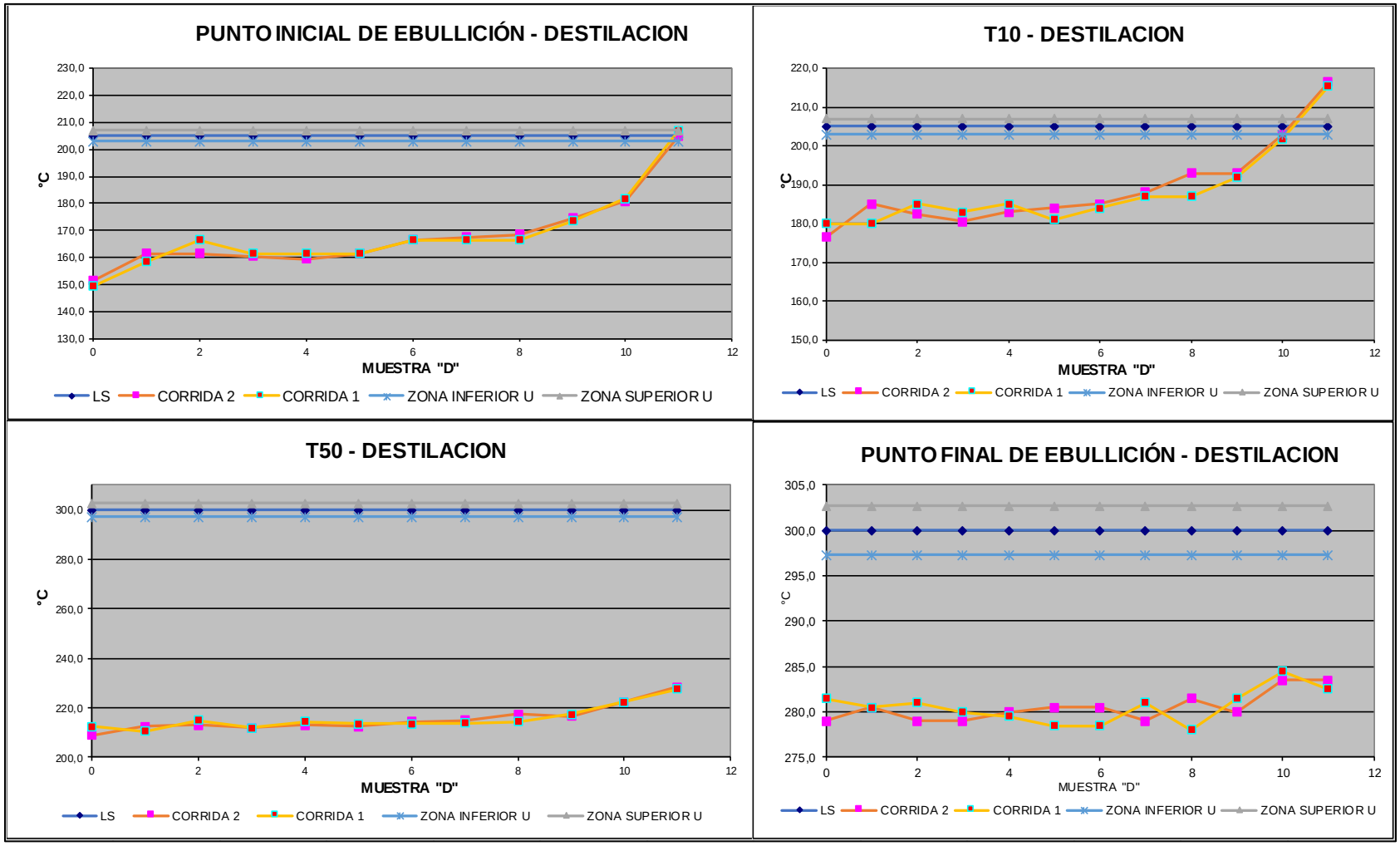
El PFE de ebullición es conforme en el 100% de las muestras, donde se observa un ligero comportamiento similar a la T50. Estos cambios no son mayores y casi están dentro del margen de incertidumbre del ensayo.

En general se puede concluir que el proceso de mezclado con agua en las muestras evaluadas no presenta grandes cambios en el comportamiento de las etapas finales de la curva de destilación. En las etapas iniciales se presentan cambios en cantidades superiores a 3000 ppm, indicando que puede presentarse un fenómeno de pérdidas de componentes livianos.

En el anexo 4 se presenta los resultados de las propiedades fisicoquímicas de las muestras para las corridas 1 y 2. Se puede evidenciar que comportamientos similares son presentados en los otros puntos de la curva de destilación.

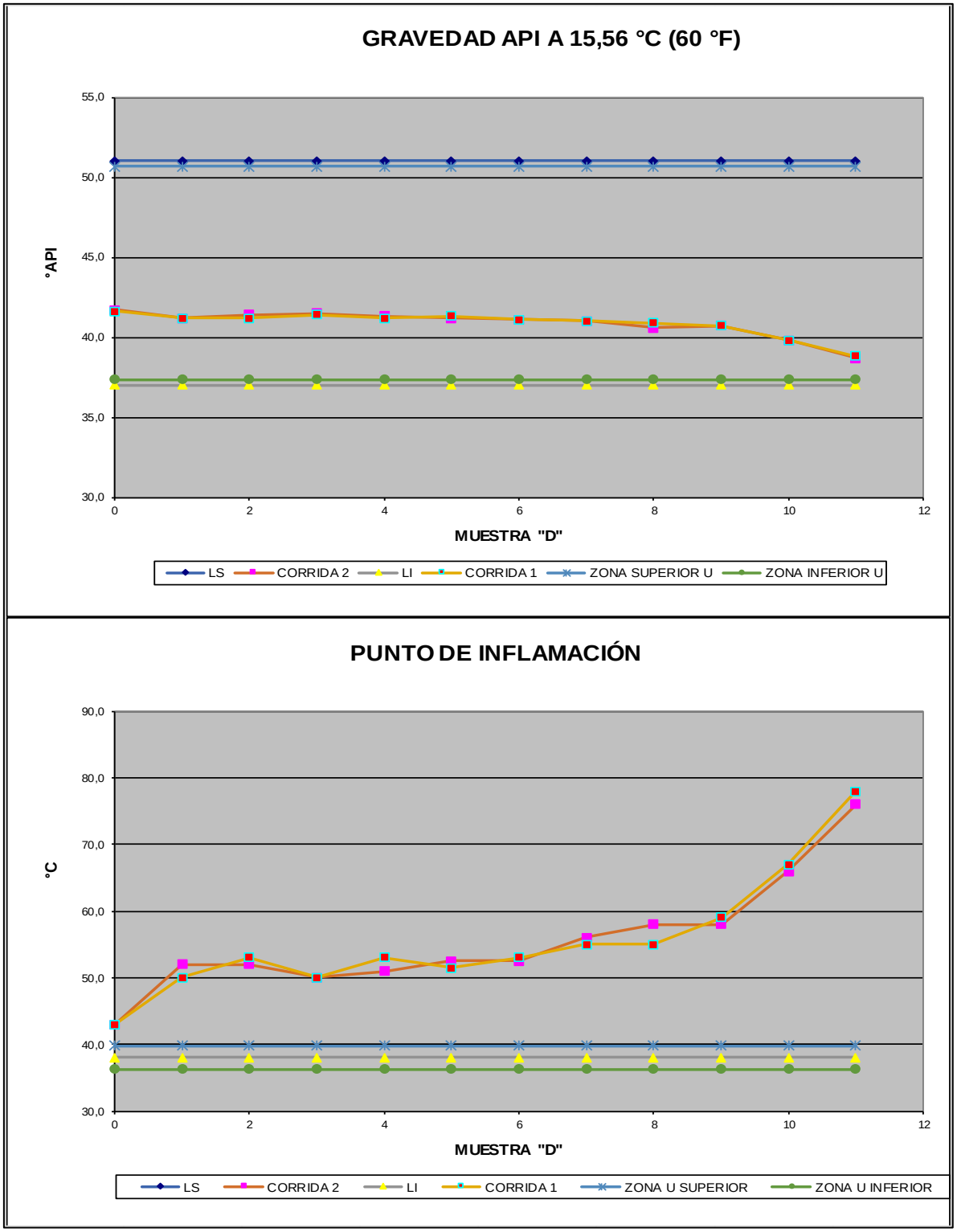
Gravedad API y punto de inflamación: Estos parámetros se presentan en conjunto por tratarse de propiedades físicas complementarias (realmente la propiedad es la gravedad especifica). En la figura 34 se puede ver que ambos parámetros tienden a cambiar su comportamiento desde la muestra D8 o D9, cuando estuvieron sometidas las muestras a cantidades de 1500 ppm de agua y 3000 ppm de agua respectivamente.

A medida que disminuye la gravedad API el combustible se vuelve más denso, indicando menos componentes livianos y que en una evaluación del punto de inflamación indicaría que este parámetro debería aumentar como puede verse en su comportamiento. Los dos parámetros presentan una evaluación de conformidad del 100 % en todas las muestras.



Fuente: elaboración propia

Figura 33. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en la destilación



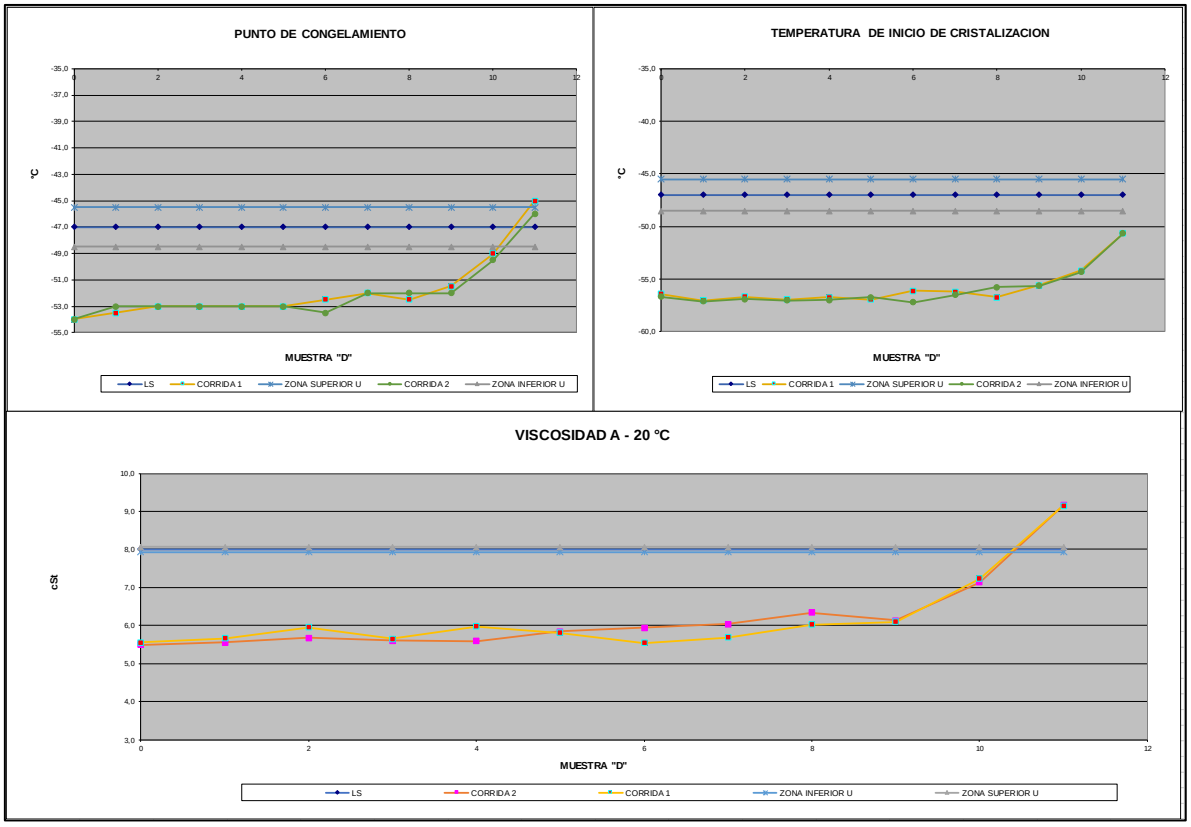
Fuente: elaboración propia

Figura 34. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en la gravedad API y punto de inflamación

Viscosidad, punto de congelamiento y temperatura de inicio de cristalización (Tco): estas propiedades son presentadas en simultaneo por tratarse de pruebas que están relacionadas con la fluidez del combustible. En la figura 35 se puede ver que las tres propiedades están presentando comportamientos similares.

En el caso de la viscosidad se observa tendencias similares al punto de inflamación y gravedad API. Desde la muestra D9 (muestra sometida a 3000 ppm de agua) a la muestra D11 (muestra sometida a 10000 ppm de agua), se presenta un aumento en la viscosidad hasta llegar el punto en que para la muestra D11, sale de conformidad con valores superiores a 9 cSt.

Para el punto de congelamiento y la Tco los comportamientos son similares. Desde la muestra D9 se presenta una tendencia en aumento de las temperaturas, llegando a tener valores para la muestra D11 en zona de no conformidad para el punto de congelamiento en la corrida 1 y muestra en zona de incertidumbre para la corrida 2. La Tco presenta un comportamiento similar, aclarando que la Tco presenta temperaturas más bajas comparada con el punto de congelamiento (aspecto que se encontró en la sección 4.1.3.1).



Fuente: elaboración propia

Figura 35. Efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1 en las propiedades de fluidez

4.2.3. Análisis estadístico

En esta sección se presenta el análisis estadístico realizado al diseño de experimentos divido en dos secciones:

- Análisis Univariado
- Análisis Multivariado

4.2.3.1. Análisis Univariado

- **Medidas de tendencia central y variabilidad**

Con el fin de validar y verificar el conjunto de datos, se calcularon las medidas estadísticas de tendencia central y de variabilidad que se muestran en la tabla 28. Para ello se usaron las variables fisicoquímicas y los totales de los parafínicos, nafténicos, aromáticos, naftalenos e indanos.

De la tabla 28 se puede observar que para las 24 muestras analizadas (un blanco y 11 concentraciones con sus respectivas réplicas), respecto a la variabilidad, es de resaltar que en la mayoría los coeficientes están por debajo del 10%, lo cual indica que las mediciones son homogéneas, poco variables. Sin embargo, para el total de Nafténicos y Naftalenos, tienen variaciones medianamente homogéneas, moderadamente variables y, el total de Indanos es muy heterogénea, lo que indica que son extremadamente variables.

- **Análisis gráfico y análisis de varianza**

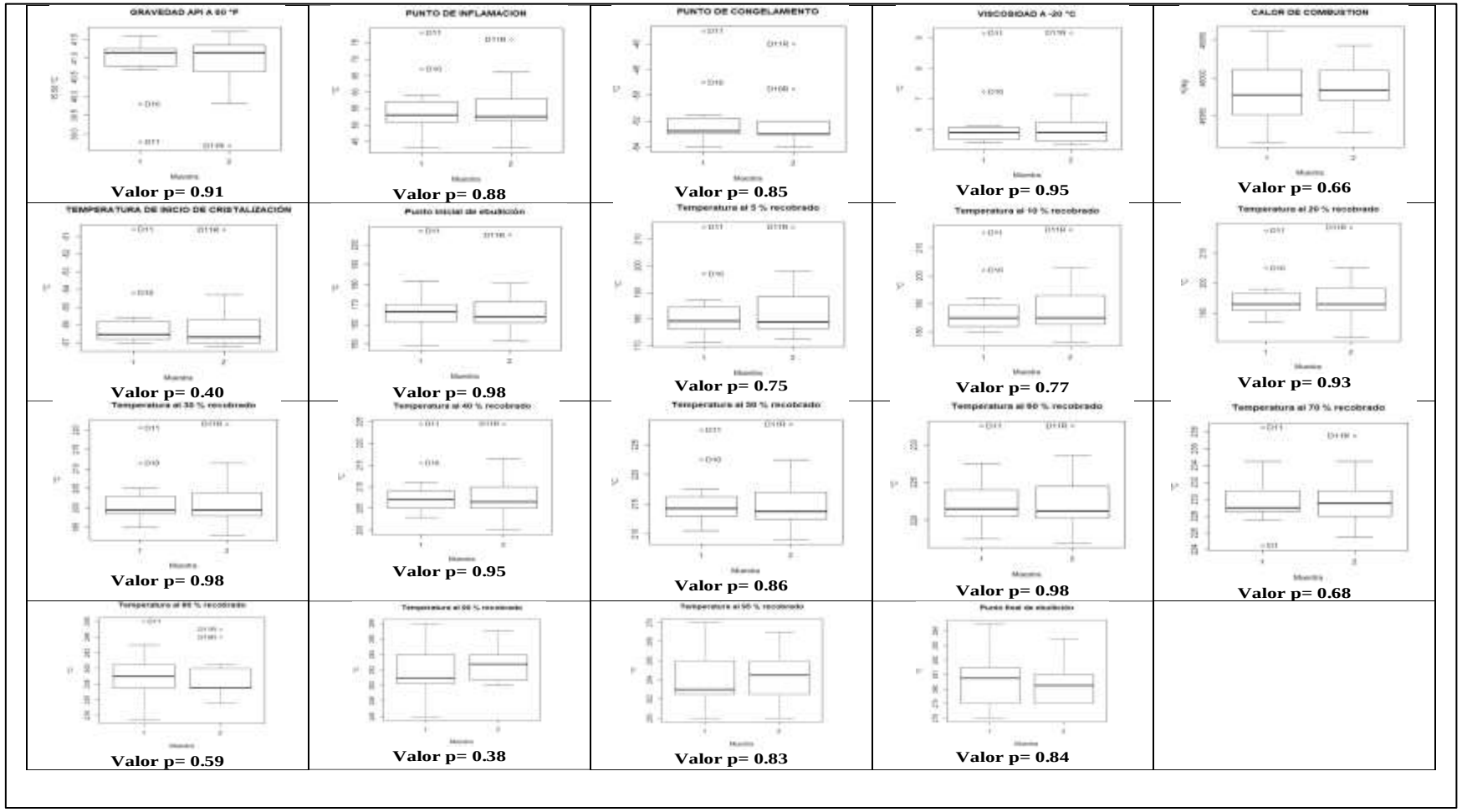
Con miras a visualizar el comportamiento gráfico de las variables, se graficaron los diagramas de cajas y bigotes Box-plot de las figuras 36 y 37, diferenciando ambas réplicas. Adicionalmente, se realizó la prueba no paramétrica de Kruskal-Wallis (dada la no normalidad de los datos) para determinar si existen diferencias estadísticamente significativas entre ambas muestras.

De la figura 36 se resalta que no existen diferencias estadísticamente significativas (valor $p>0.05$) para ambas muestras y que, existen datos atípicos en la mayoría de las mediciones, todos correspondientes a las muestras 10 y 11, incluidas sus réplicas. De otro lado de la figura 37, se observan diferencias significativas (valor $p<0.05$) para Parafínicos y Aromáticos, y no existen datos atípicos para ninguna muestra analizada.

Tabla 28. Medidas estadísticas univariadas en el proceso de mezclado agua-Jet A1

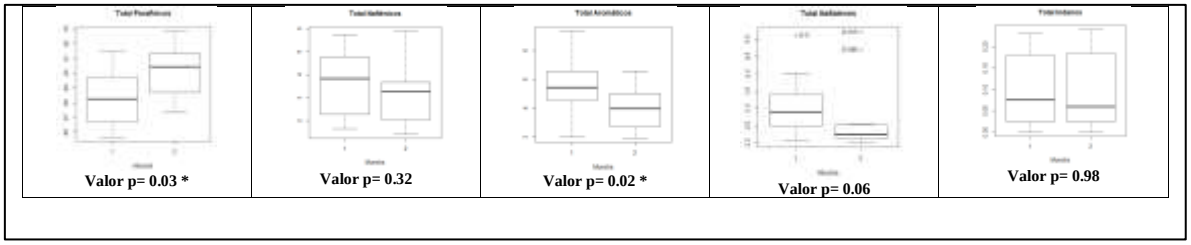
Medida	GRAV_API	P_INFLAM	P_CONGE	VISCOSIDAD	C_COMB	T_CRISTAL	P_I_ebullicion	T_5recob	T_10recob	T_20recob	T_30recob	T_40recob
Promedio ± Desv. Est.	40.85 ± 0.80	55.60 ± 8.58	-51.92 ± 2.31	6.20 ± 1.01	45984.10 ± 37.08	-55.90 ± 1.80	168.33 ± 13.87	183.35 ± 11.85	188.81 ± 10.54	195.54 ± 8.52	202.13 ± 7.24	208.42 ± 6.14
Coeficiente de variación	1.95%	15.44%	-4.44%	16.32%	0.08%	-3.23%	8.24%	6.46%	5.58%	4.36%	3.58%	2.94%
Mínimo	38.70	43.00	-54.00	5.49	45915.00	-57.20	149.50	171.50	176.50	182.00	193.00	200.00
Máximo	41.70	78.00	-45.00	9.16	46062.00	-50.63	207.00	214.50	216.50	218.50	221.50	224.50
Medida	T_50recob	T_60recob	T_70recob	T_80recob	T_90recob	Te_95recob	P_f_ebull	TOTAL PARAFINICOS	TOTAL NAFTENICOS	TOTAL AROMATICOS	TOTAL NAFTALENOS	TOTAL INDANOS
Promedio	215.58 ± 4.96	222.65 ± 4.09	230.08 ± 3.36	239.13 ± 2.98	252.35 ± 2.80	264.27 ± 2.75	280.54 ± 1.70	89.28 ± 2.04	3.38 ± 1.32	4.38 ± 0.92	2.87 ± 0.98	0.10 ± 0.08
Mínimo	209.00	217.00	224.50	233.50	246.00	260.00	278.00	85.68	1.42	2.96	2.00	0.00
Máximo	228.50	232.50	238.50	246.00	258.00	270.00	284.50	92.84	5.90	6.68	5.21	0.24
Coeficiente de variación	2.30%	1.84%	1.46%	1.25%	1.11%	1.04%	0.61%	2.28%	**39.07%**	21.06%	**34.18%**	**85.45%**

Fuente: elaboración propia



Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 36. Box-plot por muestra



Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 37. Box-plot por muestra (*indica diferencias estadísticamente significativas)

En referencia a las diferentes cantidades aplicadas para cada muestra se realizó, de igual manera, la prueba Kruskal-Wallis, como se muestra en la tabla 29.

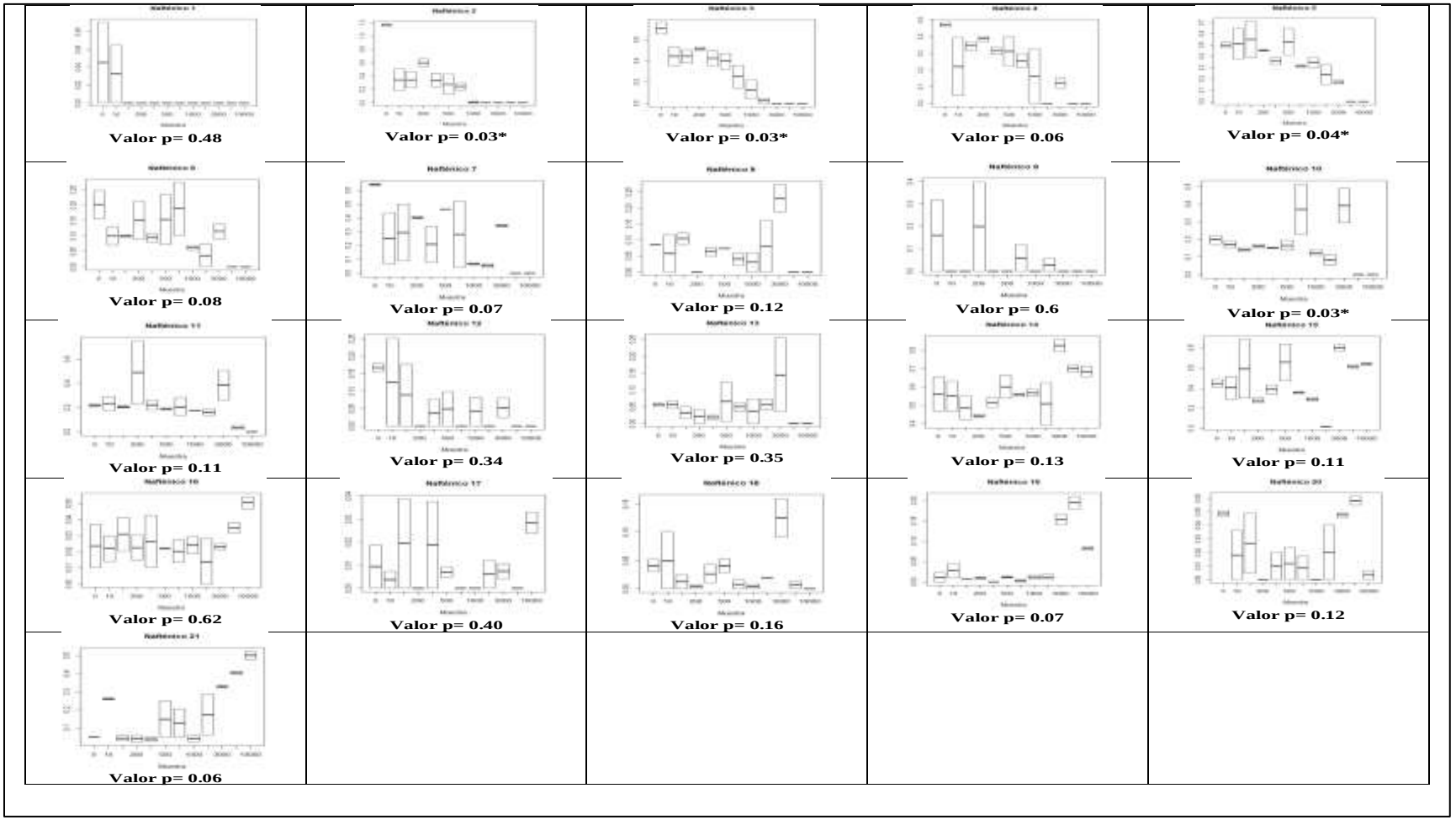
De la tabla 29 se puede concluir que las variables que no presentaron cambios significativos para las diferentes cantidades de agua agregadas fueron T80, T90, T95, PFE, total parafínicos, total aromáticos, total naftalenos e indanos. Las demás variables si muestran diferencias significativas en las diferentes cantidades.
Se realizó un análisis particular para los diferentes Nafténicos dado que presentan diferencias estadísticamente significativas para las diversas cantidades de agua agreagada. Se puede concluir que el Nafténico 2, Nafténico 3, Nafténico 5 y el Nafténico 10, presentan diferencias significativas para las diferentes concentraciones usadas. Ver figura 38.

Tabla 29. Prueba Kruskal-Wallis (*indica diferencias estadísticamente significativas)

Variable	Valor p
Gravedad API	0.02 *
Punto de inflamación	0.03 *
Punto de congelamiento	0.03 *
Viscosidad	0.04 *
Calor de combustión	0.04 *
Temperatura de inicio de cristalización	0.06 *
Punto inicial de ebullición	0.03 *
T5	0.03 *
T10	0.04 *
T20	0.04 *
T30	0.03 *
T40	0.04 *
T50	0.03 *
T60	0.03 *
T70	0.048*

Variable	Valor p
T80	0.06
T90	0.09
T95	0.07
Punto final de ebullición	0.37
Total parafínicos	0.19
Total nafténicos	0.04*
Total aromáticos	0.37
Total naftalenos	0.20
Total indanos	0.31

Fuente: elaboración propia



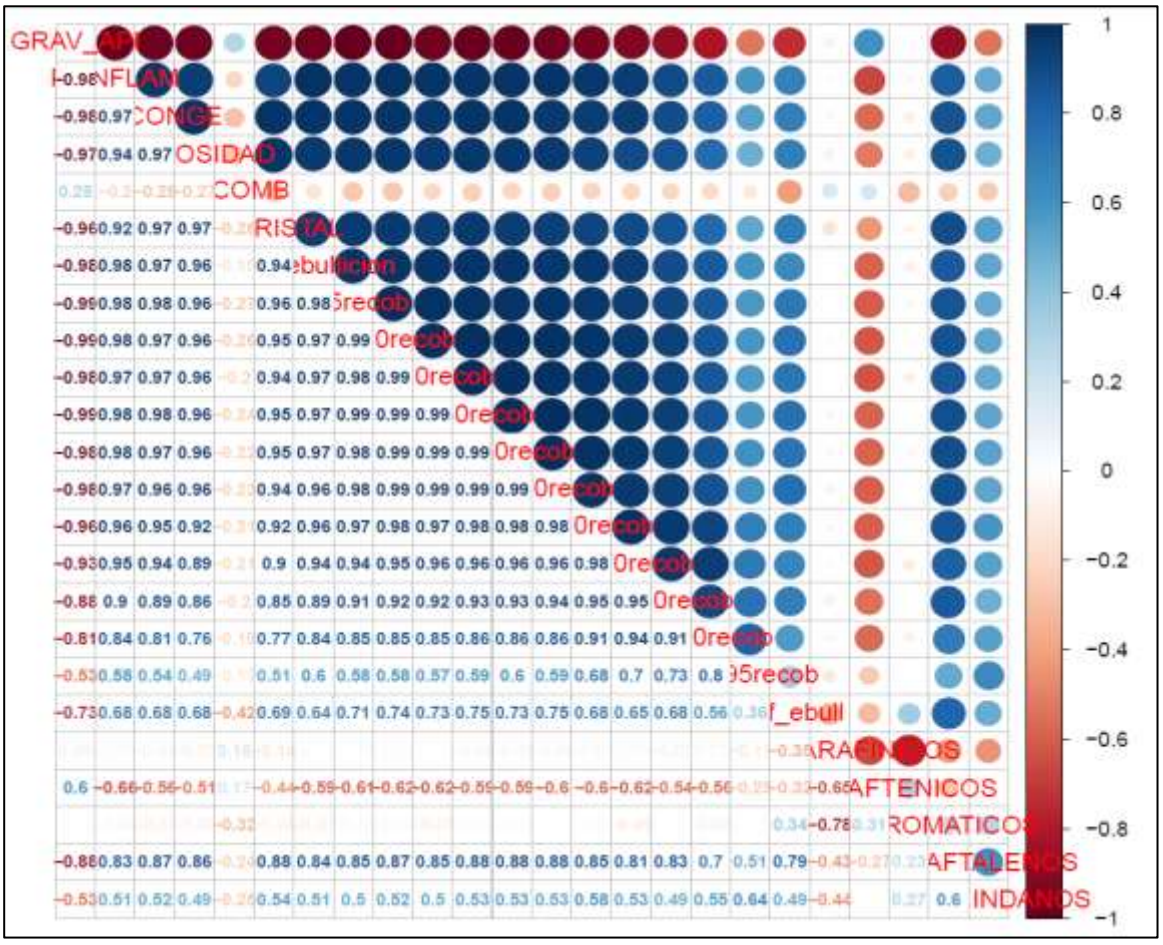
Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 38. Box-plot particularizada para nafténicos (*indica diferencias estadísticamente significativas)

4.2.3.2. Análisis multivariado

- **Correlaciones**

Con el fin de determinar si existen relaciones lineales significativas entre las variables, se procedió a calcular la matriz de correlaciones de la figura 39.



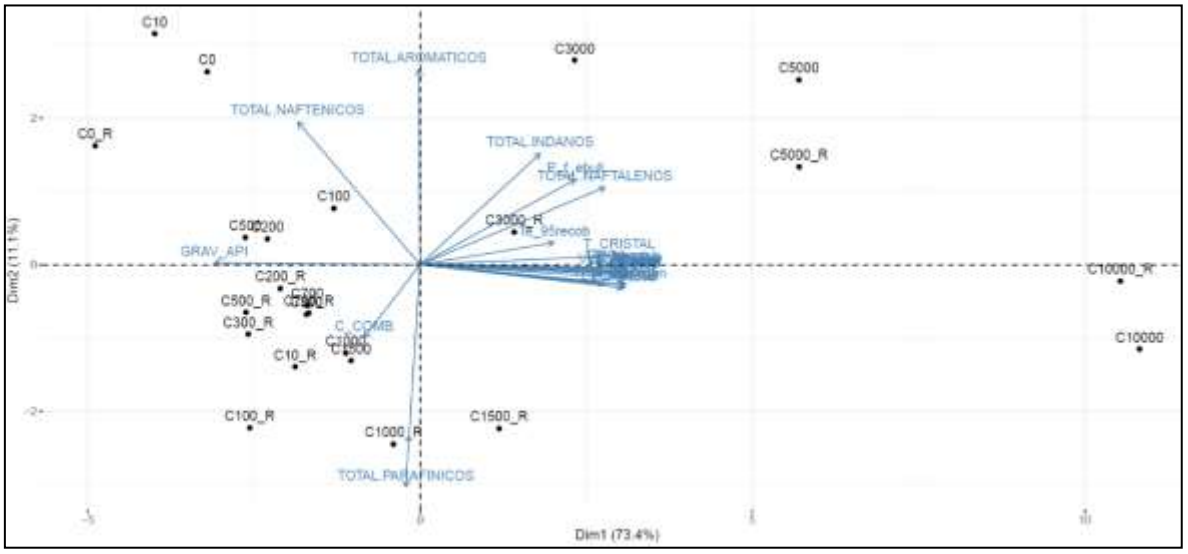
- Fuente: elaboración propia
- Nota: esquema arrojado por el software

Figura 39. Matriz de correlaciones generada para evaluar el efecto por proceso de mezclado agua - Jet A1

Se considera una relación lineal fuerte (significativa) si el coeficiente de correlación es mayor que 0.5 (relación lineal directa) o menor a -0.5 (relación lineal inversa). En la figura 39 se observa que, excepto calor de combustión, total parafínicos y total aromáticos, todas las variables tienen relaciones lineales significativas directas (coeficiente positivo) o inversas (coeficiente negativo).

- **Análisis gráfico multivariado**

Con el fin de explorar agrupamientos en las variables, se construyó el gráfico Biplot de la figura 40, que permite visualizar, de manera simultánea, las relaciones entre las variables, las cantidades de agua agregadas y las muestras.



Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 40. Biplot

Al numerar del 1 al 4 los cuadrantes, iniciando en la esquina superior derecha y girando en el sentido de las agujas del reloj, de la figura 40 se puede concluir:
Con respecto a las muestras:

- Dado que se ubican en el extremo del segundo cuadrante, las muestras sometidas a cantidades de 10000 ppm de agua (C10000, C10000R) y las de 5000 ppm de agua (C5000, C5000R) son las más atípicas.
- De igual manera, pero en menor medida, si se observa el primer cuadrante, se encuentra que las muestras de 0 ppm y 10 ppm también tienen comportamiento diferente de las demás.
- Debido a que se encuentran muy cercanas y dispersas en todos los cuadrantes, las muestras entre 100 ppm y 1500 ppm tienen comportamiento similar

En cuanto a las variables se puede concluir:

- Las variables calor de combustión, total parafínicos y total aromáticos no se encuentran cercanas a ninguna variable, lo que se explica porque no presentan correlaciones fuertes.

- Las variables gravedad API y total nafténicos se ubican hacia el izquierdo y sobre la dimensión 1 (eje X), debido a que tienen relaciones muy fuertes con las demás variables, pero son relaciones inversas (coeficientes negativos).
- Las demás variables se encuentran fuertemente correlacionadas, por tanto, se superponen en el gráfico

En cuanto a las relaciones múltiples se puede concluir:

- Las muestras sometidas a cantidades de 3000 ppm de agua son las que más efecto tienen sobre todas las variables a excepción de variables total parafínicos, total aromáticos, total nafténicos, gravedad API y calor de combustión.
- Las muestras sometidas a cantidades de (0, 10 y 100) ppm de agua son las que más efecto tienen sobre la variable total nafténicos.
- Las muestras sometidas a cantidades de 500 ppm de agua y 200 ppm de agua son las que más efecto tienen sobre la variable gravedad API.
- Las muestras sometidas a cantidades de (1000 y 1500) ppm de agua son las que más efecto tienen sobre la variable calor de combustión y total parafínicos.

- **Efecto de la cantidad de agua agregada sobre las diferentes variables**

Con el fin de estimar una ecuación que permita determinar el efecto de la cantidad de agua agreagada sobre las variables, se construyeron una serie de modelos lineales generalizados, como se muestra en la tabla 30. Para T80, T90, T95, Punto final de ebullición, total parafínicos, total aromáticos, total naftalenos e indanos, no se construyó modelo porque la concentración no tiene efecto sobre ellas, como se observó en la tabla 29.

Tabla 30. Efecto de la cantidad de agua agregada sobre las variables observadas

Ecuación	Valor p (Prueba F)	R^2%
$Gravedad\ API = 41.35 - 0.00026 * W$	0.00	99%
$Punto\ de\ inflamación = 50.37 + 0.002814 * W$	0.00	99%
$Punto\ de\ congelamiento = -53 + e^{1.632+0.0007807*W}$	0.00	96%
$Viscosidad = 5.57 + 0.0003416 * W$	0.00	98%
$Temperatura\ de\ cristalización = -57.03 + 0.0006116 * W$	0.00	98%
$Punto\ inicial\ de\ ebullición = 168.33 + 0.004634 * W$	0.00	99%
$Temperatura\ al\ 5\%\ recobrado = 183.35 + 0.00399 * W$	0.00	98%
$Temperatura\ al\ 10\%\ recobrado = 188.2 + 0.003541 * W$	0.00	97%
$Temperatura\ al\ 20\%\ recobrado = 190.3 + 0.002823 * W$	0.00	95%
$Temperatura\ al\ 30\%\ recobrado = 197.6 + 0.002437 * W$	0.00	97%
$Temperatura\ al\ 40\%\ recobrado = 204.6 + 0.002053 * W$	0.00	97%
$Temperatura\ al\ 50\%\ recobrado = 212.5 + 0.001642 * W$	0.00	96%

Ecuación	Valor p (Prueba F)	R^2%
$Temperatura\ al\ 60\%\ recobrado = 220.1 + 0.00135 * W$	0.00	97%
$Temperatura\ al\ 70\%\ recobrado = 228.1 + 0.001076 * W$	0.00	92%
$Total\ Nafténicos = 3.785 + 0.0002197 * W$	0.00	85%

W: cantidad de agua agregada (ppm) Fuente: elaboración propia

De la tabla 30, se puede ver que los cambios en la concentración explican por lo menos el 85% de la variabilidad de todas las variables evaluadas. Además, dado el valor positivo del intercepto, se puede concluir que, al aumentar la cantidad de agua, todas las variables aumentan excepto gravedad API porque su intercepto es negativo.

De la evaluación de conformidad, el comportamiento presentado por las muestras en el diseño de experimentos y el análisis estadístico se puede resumir que el procedimiento establecido para evaluar el efecto generado por un proceso de mezclado agua - combustible Jet A1, buscando dilución, presento los siguientes aspectos:

- Se presenta un efecto notable en el contacto del combustible Jet A1 con cantidades superiores a 3000 ppm de agua, especialmente para las propiedades de fluidez, de inflamación, etapas iniciales en la destilación y la gravedad API.
- El punto de congelamiento y la Tco tienden aumentar las temperaturas, en la medida en que muestras de combustible Jet A1 que son sometidas a cantidades de 10000 ppm de agua pueden llegar a estar por fuera de especificaciones de calidad.
- Un aspecto similar se encuentra con la viscosidad evaluada a -20 °C, donde se presenta una tendencia al aumento llegando a quedar en zona no conforme con valores superiores a 9,0 cSt.
- El punto de inflamación presenta una tendencia al aumento, alejándose del valor de especificación de calidad (mínimo 38 °C). Para efectos de seguridad industrial, este aspecto puede ser muy útil, pero para el uso en motores de turbina, es necesario verificar el efecto del punto de inflamación en el desempeño del motor. En motores de combustión interna por compresión (motores diésel), hay un efecto negativo cuando las muestras presentan un punto de inflamación bajo, ya que cambia la relación de compresión en el motor. Para comportamientos inversos, no se tiene referencias.
- El calor de combustión se ve afectado de forma muy pequeña por los cambios generados en las muestras de Jet A1.
- La gravedad API y las etapas iniciales de la destilación se ven afectadas con aumentos en las temperaturas de destilación y disminución en la gravedad API para cantidades de agua superiores a 3000 ppm. Lo que sugiere perdidas de componentes livianos en las muestras de Jet A1.

- El efecto generado por un proceso de mezclado agua - combustible Jet A1 buscando dilución influye estadísticamente en los componentes ya que presentan diferencias significativas para las diferentes concentraciones usadas

Los cambios presentados en las muestras de Jet A1 concuerdan con los fundamentos teóricos relacionados con la perdida de componentes livianos (disminución de gravedad API, aumento de la temperatura de inflamación, aumento en las etapas iniciales de la destilación (PIE, T5 y T10) y aumento en la viscosidad. Con las propiedades de fluidez no hay comportamientos de este tipo, ya que las muestras contienen aditivos depresores de propiedades de flujo en frio para asegurar el uso del combustible a temperaturas bajas.

El efecto ocasionado efecto generado por un proceso de mezclado agua - combustible Jet A1 hasta alcanzar visualmente una dilución presenta cambios notorios en las pruebas, ocasionados por cambios composicionales principalmente de los componentes Nafténico 2, Nafténico 3, Nafténico 5 y el Nafténico 10, que se caracterizan por ser componenentes livianos. Este efecto puede tener explicación y discusión por el tiempo efectuado para llevar a cabo el proceso (tiempo superior a 16 horas e inferior a 24 horas). Sería muy útil:

- Realizar un análisis de humedad a las muestras resultantes del diseño de experimentos, para verificar los niveles de agua que finalmente tienen las muestras después de haber efectuado el proceso.
- Realizar un análisis estadístico verificando el efecto de la composición en las propiedades fisicoquímicas evaluadas, tomando como variables de entrada la composición y variables de salida las propiedades fisicoquímicas.
- Evaluar nuevamente el nivel de 3000 ppm de agua (o mayor) y repetir el procedimiento de mezclado (tiempo, temperatura y velocidad de agitación) para una muestra de agua pura destilada y muestra de Jet A1 sin contaminar y verificar posibles pérdidas por evaporación, presión de vapor, etc.
- Llevar el proceso a una escala mayor.

4.2.4. Pruebas de verificación

Como pruebas de verificación, se optó por:

- Realizar un análisis de humedad a las muestras resultantes del diseño de experimentos, para verificar los niveles de agua que finalmente tienen las muestras después de haber efectuado el proceso.
- Realizar un análisis estadístico verificando el efecto de la composición en las propiedades fisicoquímicas evaluadas tomando como variables de entrada y la composición y variables de salida las propiedades fisicoquímicas.

4.2.4.1. Análisis de humedad

El análisis de humedad se realizó siguiendo la metodología descrita en la sección 3.3.8. En la tabla 31 se presenta en análisis de humedad realizada a las muestras correspondientes al diseño de experimentos para evaluar el efecto generado por un proceso de mezclado agua-Jet A1.

Tabla 31. Análisis de humedad - efecto contacto agua

ANALISIS DE HUMEDAD			
Corrida 1	**Valor**	**Corrida 1**	**Valor**
Muestra	**(ppm)**	**Muestra**	**(ppm)**
D0	52	**D0R**	60
D1	54	**D1R**	51
D2	53	**D2R**	53
D3	54	**D3R**	51
D4	48	**D4R**	51
D5	51	**D5R**	49
D6	52	**D6R**	54
D7	50	**D7R**	51
D8	56	**D8R**	54
D9	58	**D9R**	56
D10	54	**D10R**	55
D11	57	**D11R**	58
Promedio	53,3	**Promedio**	53,6
Desviación estándar	2,90	**Desviación estándar**	3,26

Fuente: elaboración propia

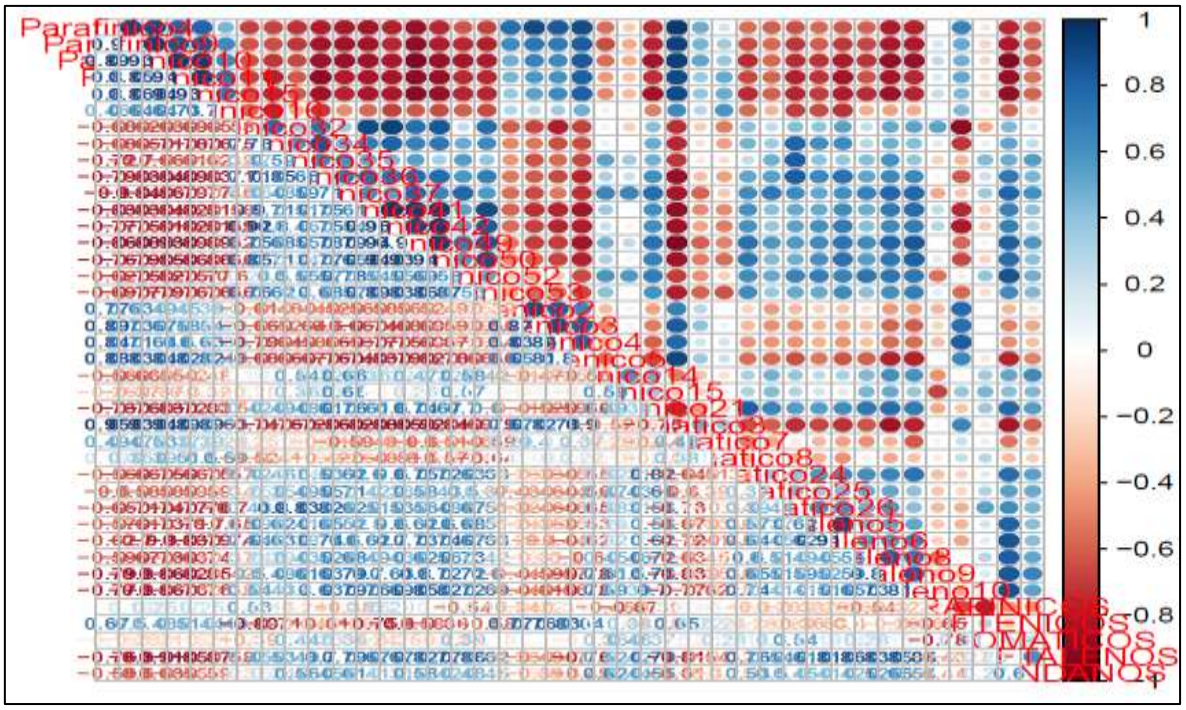
De la tabla 31 se puede ver que las muestras presentan valores de contenido de humead similares con respecto a la muestra inicial. Indicando que el proceso realizado para poner en contacto el agua con el combustible Jet A1, desarrolló otro fenómeno diferente a una dilución. Según Baena-Zambrana et al. (2013), en la curva de solubilidad del agua para el combustible Jet A1, a una temperatura de 25 °C, este combustible permite una solubilidad de agua de 0.0055 % volumen de agua (55 ppm de agua, tomando como densidad del agua 1.0 g/cm3).

4.2.4.1. Análisis estadístico composición – propiedades.

Para verificar el efecto de los componentes que fueron modificados por el proceso implementado de mezclado agua-Jet A1, se procede a realizar un análisis estadístico similar al de la sección 4.1.

- **Correlaciones entre las variables de entrada**

Con el fin de determinar si existen relaciones lineales significativas entre las variables que componen el conjunto de variables respuesta, se procedió a calcular la matriz de correlaciones de la figura 41, donde se puede observar que todas las variables de entrada se encuentran correlacionadas inversa (correlaciones negativas) o directamente (correlaciones positivas). Por lo tanto, con el fin de cumplir el supuesto de no multicolinealidad de la regresión (independencia de las variables de entrada), se procede a reducir la dimensionalidad de los datos por el método de componentes principales.



Fuente: elaboración propia
Nota: esquema arrojado por el software

Figura 41. Matriz de correlaciones de las variables de entrada efecto composición propiedades

- **Análisis de componentes principales para las variables de entrada**

La tabla 32 contiene el resultado del análisis de componentes principales, se observa que en 4 dimensiones se acumula el 83% de la varianza de todas las variables originales. Así, las 40 variables originales fuertemente correlacionadas se agrupan en 4 nuevas variables independientes e incorrelacionadas llamadas componentes principales (PC's).

Tabla 32. Análisis de componentes principales para las variables de entrada

Dimensión	Valor propio	Porcentaje de varianza	Porcentaje de varianza acumulada
Dim.1	23.15	57.87	57.87
Dim.2	5.35	13.37	71.24
Dim.3	2.62	6.54	77.78
Dim.4	**2.17**	**5.42**	**83.20**
Dim.5	1.19	2.97	86.18
Dim.6	0.89	2.21	88.39
Dim.7	0.73	1.82	90.21
Dim.8	0.66	1.65	91.86
Dim.9	0.60	1.50	93.36
Dim.10	0.57	1.43	94.79
Dim.11	0.44	1.10	95.89
Dim.12	0.33	0.83	96.72
Dim.13	0.30	0.75	97.47
Dim.14	0.24	0.59	98.06
Dim.15	0.19	0.47	98.54
Dim.16	0.16	0.41	98.95
Dim.17	0.13	0.32	99.27
Dim.18	0.08	0.19	99.46
Dim.19	0.07	0.19	99.64
Dim.20	0.06	0.15	99.79
Dim.21	0.05	0.11	99.91
Dim.22	0.02	0.06	99.96
Dim.23	0.01	0.04	100.00
Dim.24	0.00	0.00	100.00

Fuente: elaboración propia

- **Análisis de regresión lineal para las variables de entrada versus cada variable de salida**

Las regresiones se realizaron de manera individual, es decir, las 4 componentes como variables explicatorias de cada una de las variables de salida. Se usó un nivel de confianza del 90%, entonces se consideraron como significativos $valores\, p < \alpha = 0.1$. También, se validaron todos los supuestos de la regresión, además de la multicolinealidad solucionada con el análisis de componentes principales, la homoscedasticidad, no autocorrelación y normalidad de los residuos. En la tabla 33 se encuentran las ecuaciones de cada una de las regresiones.

Tabla 33. Regresiones individuales composición propiedades

Variable de Entrada	Ecuación	Estadístico F	Valor p	R^2
Gravedad API a 60 °F	$GravedadAPIA60F = 40.85 - \mathbf{0.16PC1} + 0.024PC2 + 0.028PC3 + 0.09PC4$	234.4	$6.89 * 10^{-16}$	98%
Punto de inflamación	$Puntodeinflamacion = 55.60 + \mathbf{1.70PC1} - 0.53PC2 \pm 1.02PC4$	181.2	$1.152 * 10^{-14}$	96%
Punto de congelamiento	$Puntodecongelamiento = -51.92 + \mathbf{0.45PC1} - 0.08PC2 - 0.23PC3 - 0.34PC4$	119.7	$3.411 * 10^{-13}$	95%
Viscosidad a 20 °C	$Viscosidada_{20C} = 6.2 + \mathbf{0.2PC1} - 0.13PC3 - 0.18PC4$	119	$6.375 * 10^{-13}$	95%
Calor de combustión	$Calordecombustion = 45984 - \mathbf{2.62PC1}$	0.1154	0.1044	11%
Tco	$Tco = -55.89 + 0.34PC1 - 0.23PC3 - \mathbf{0.39PC4}$	159.5	$3.922 * 10^{-16}$	96%
PIE	$PIE = 168.3 + 2.68PC1 - 0.56PC2 - \mathbf{2.74PC4}$	157	$4.573 * 10^{-14}$	96%
T5	$T5 = 183.3 + \mathbf{2.36PC1} - 0.54PC2 - 1.77PC4$	332.4	$2.2 * 10^{-16}$	98%
T10	$T10 = 188.81 + \mathbf{2.11PC1} - 0.45PC2 - 1.32PC4$	303.1	$2.2 * 10^{-16}$	98%

Variable de Entrada	Ecuación	Estadístico F	Valor p	R^2
T20	$T20 = 195.54 + \mathbf{1.66PC1} - 0.45PC2 - 1.21PC4$	97.06	$4.318 * 10^{-16}$	93%
T30	$T30 = 202.12 + \mathbf{1.44PC1} - 0.87PC4$	198.3	$2.316 * 10^{-14}$	95%
T40	$T40 = 208.42 + \mathbf{1.21PC1} - 0.82PC4$	171.3	$9.927 * 10^{-14}$	94%
T50	$T50 = 215.58 + \mathbf{0.98PC1} - 0.48PC4$	158.1	$2.188 * 10^{-13}$	94%

Fuente: elaboración propia

La tabla 34 contiene las variables con mayor peso en cada componente. De las tablas 33 y 34 se resalta:

- La variable Calor de combustión sólo es explicada en un 11% por PC1, las demás variables no la explican. Todas las demás variables respuesta tienen ajustes por encima del 93%
- El componente PC1 es el que mayor peso tiene para todas las variables, dicho componente, según la tabla 34, los componentes con mayor peso están compuestos principalmente por los parafínicos 9, 10, 11, 15, 49, principalmente por el compuesto parafínico 10. y el Aromático 3.
- De forma similar, de la tabla 34 se puede ver que las variables con más peso en PC2 son total parafínicos y total nafténicos, en PC3 son Nafténico 2 y nafténico 3 y en PC4 son aromático 26 y aromático 7.

Tabla 34. Resumen de las variables con más peso en cada componente.

PC1	PC2	PC3	PC4
Parafinico10	**Total parafínicos**	**Naftenico2**	**Aromatico26**
Aromatico3	**Total nafténicos**	**Naftenico3**	**Aromatico7**
Parafinico49	Naftenico15	Aromatico8	Total aromáticos
Parafinico15	Total aromáticos	Parafinico16	Parafinico34
Parafinico9	Parafinico32	Naftenico4	Naftaleno10
Parafinico11	Naftenico14	Parafinico35	Parafinico35

Fuente: elaboración propia

En el análisis estadístico realizado inicialmente (sección 4.2.3.2.) se había encontrado que el efecto generado por el proceso de mezclado agua-Jet A1 buscando dilución, ocasionaba cambios composicionales principalmente de los componentes Nafténico 2, Nafténico 3, Nafténico 5 y el Nafténico 10. Con este nuevo enfoque, se encuentra mediante el análisis estadístico, composición (variables de entrada) - propiedades (variables de salida), a los componentes

Nafténico 2, nafténico 3 y nafténico 10 en común acompañado de nuevos componentes que afectan las propiedades fisicoquímicas.

Según Baena-Zambrana et al. (2013), la capacidad higroscópica del combustible Jet se determina por la solubilidad del agua; aunque determinar las causas o las maneras de cómo se genera la solubilidad del agua en un combustible sea difícil de precisar, las observaciones experimentales indican a un modelo teórico que implica en primera instancia la interrupción de la cadena de enlaces de hidrógenos del hidrocarburo para la adhesión de la molécula de agua; lo que sugiere que la disolución de *n* moléculas de agua, requiere la ruptura de *n* enlaces de hidrogeno-carbono. Este proceso varía para cada componente del hidrocarburo según su composición, donde los compuestos aromáticos tendrían mayor solubilidad con el agua que los compuestos parafínicos y nafténicos.

Aunque teóricamente sea difícil demostrar, los cambios presentados en las muestras de Jet A1 a cantidades de superiores a 3000 ppm de agua, concuerdan con los fundamentos teóricos relacionados con la perdida de componentes livianos. La disminución de gravedad API, aumento de la temperatura de inflamación, aumento en las etapas iniciales de la destilación (PIE, T5 y T10) y aumento en la viscosidad. Otro aspecto a tener en cuenta es un fenómeno de hidrolisis.

En química orgánica, la hidrólisis se presenta como la reacción opuesta a la condensación. En este contexto una molécula orgánica y el agua reaccionan rompiendo un enlace covalente para formar dos moléculas orgánicas con grupos funcionales que incluyen los átomos de la molécula de agua.

4.3. EVALUACIÓN TEÓRICA DEL COMBUSTIBLE JET A1

La evaluación teórica del combustible Jet A1 será abordada en dos secciones:
- Evaluación de las propiedades fisicoquímicas
- Medición de exactitud de las relaciones propiedad composición.

4.3.1. Evaluación de las propiedades fisicoquímicas

A continuación, se presenta las relaciones propiedad – composición desarrolladas teórica y estadísticamente para cada propiedad fisicoquímica.

4.3.1.1. Gravedad API

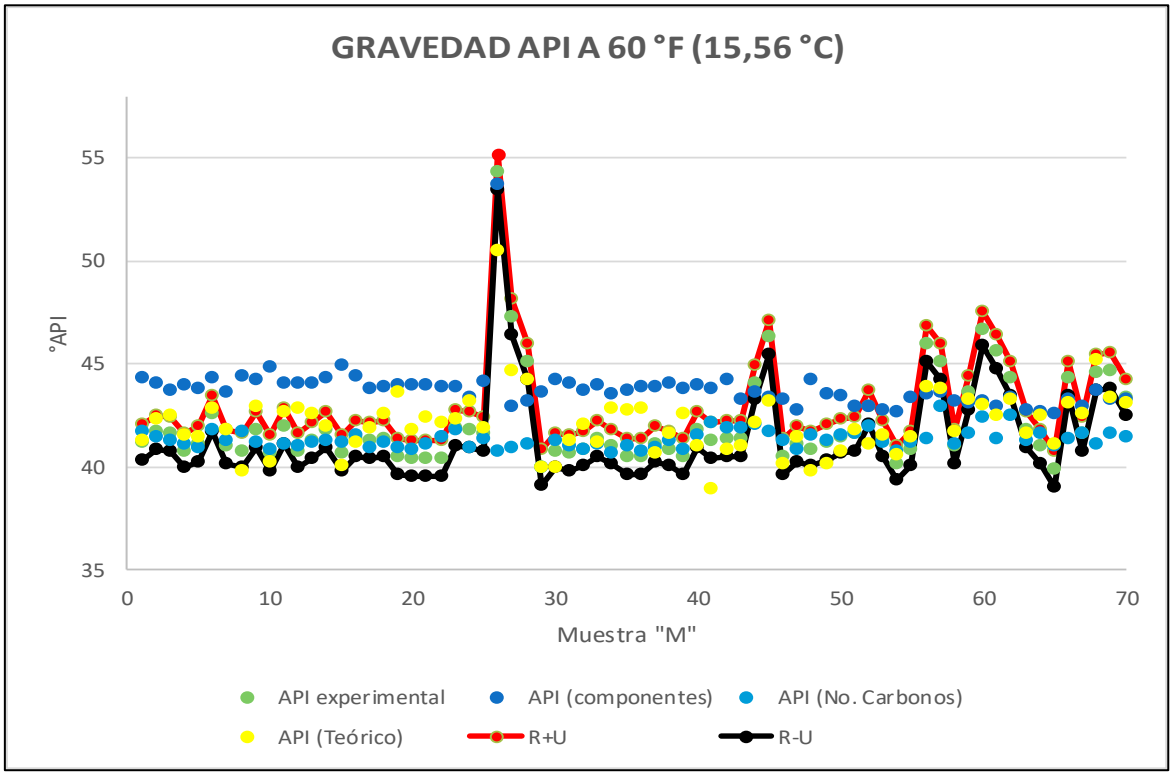
En la tabla 35 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para la Gravedad API.

Tabla 35. Relaciones propiedad composición Gravedad API

Tipo de Relación	Ecuación
Teórica	$Gmezcla = \sum_{i=1}^{n} Xi * Gi$ $\sum_{i=1}^{n} Xi = 1.0$ $API_{60\,°F} = \frac{141.5}{G_{60\,°F}} - 131.5$ Donde $Gmezcla$ Propiedad de la mezcla Gi Propiedad del componente puro i Xi Fracción molar del componente i
Estadística por componentes	$API_{60_F} = (1.907 * 10^{-25} + 7.903 * 10^{-25} * PC2 - 2.942 * 10^{-25} * PC5 + 1.561 * 10^{-25} * IT - 3.480 * 10^{-25} * P6 + 2.023 * 10^{-25} * C10 - 1.491 * 10^{-25} * A2 + 8.381 * 10^{-25} * A6 + 4.758 * 10^{-25} * N1)^{-0.07}$
Estadística por No. Carbonos	$API_{60_F} = (1.04* 10^{-24}- 7.83* 10^{-26} *\mathrm{C2C9} - 1.51* 10^{-25} *\mathrm{C2C15} + 2.03 * 10^{-25} *\mathrm{C2C16} - 2.59* 10^{-25} *\mathrm{C3C17} - 5.62* 10^{-26} *\mathrm{C3C19} - 6.45* 10^{-26} *\mathrm{C4C9} - 4.63* 10^{-26} *\mathrm{C410} - 7.02* 10^{-26} *\mathrm{C4C12} + 6.01* 10^{-26} *\mathrm{C5C8} - 2.14 * 10^{-25} *\mathrm{C6C9} - 8.68* 10^{-26} *\mathrm{C6C12} - 2.09* 10^{-25} *\mathrm{C6C13} - 1.55* 10^{-25} *\mathrm{C7C10} + 1.88* 10^{-25} *\mathrm{C7C11} + 2.29* 10^{-25} *\mathrm{C7C12} - 3.81* 10^{-26} *\mathrm{C8C9} - 6.39 * 10^{-26} *\mathrm{C8C12} - 5.31* 10^{-26} *\mathrm{C9C10} - 9.93* 10^{-26} *\mathrm{C10C7} - 8.38* 10^{-26} *\mathrm{C10C9} - 4.03* 10^{-26} *\mathrm{C10C12} - 9.96* 10^{-26} *\mathrm{C10C15} + 6.39* 10^{-26} *\mathrm{C11C13} - 1.90 * 10^{-26} *\mathrm{PC1} + 4.02* 10^{-26} *\mathrm{PC2} + 8.11* 10^{-26} *\mathrm{PC3} - 4.34* 10^{-26} *\mathrm{PC4} + 2.84* 10^{-26} *\mathrm{PC5} + 6.37* 10^{-26} *\mathrm{PC6} - 6.12* 10^{-26} *\mathrm{PC7})^{-0.067}$

Fuente: elaboración propia

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 35, se puede ver en la figura 42, el comportamiento que presenta cada relación. Se establece como criterio de evaluación de desempeño de las relaciones, un límite inferior generado por la diferencia del valor experimental con el valor de reproducibilidad y la incertidumbre (R= 0.5 °API, U= +/- 0.35 °API). El límite superior es generado por la suma del valor experimental del ensayo y el valor de reproducibilidad y la incertidumbre.



Fuente: elaboración propia

Figura 42. Comportamiento relaciones propiedad composición Gravedad API

De la figura 42, se puede ver qué la relación estadística por No. Carbones se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 71.4 %, seguido de la relación teórica con 50% y finalmente la relación estadística por componentes con 7.1 %. Con la relación estadística por componentes se observa una racha o tendencia de los valores por encima del valor experimental en la mayoría de los datos, indicando que con un ajuste se podría mejorar el comportamiento.

4.3.1.2. Calor de combustión bruto

En la tabla 36 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para el calor de combustión bruto.

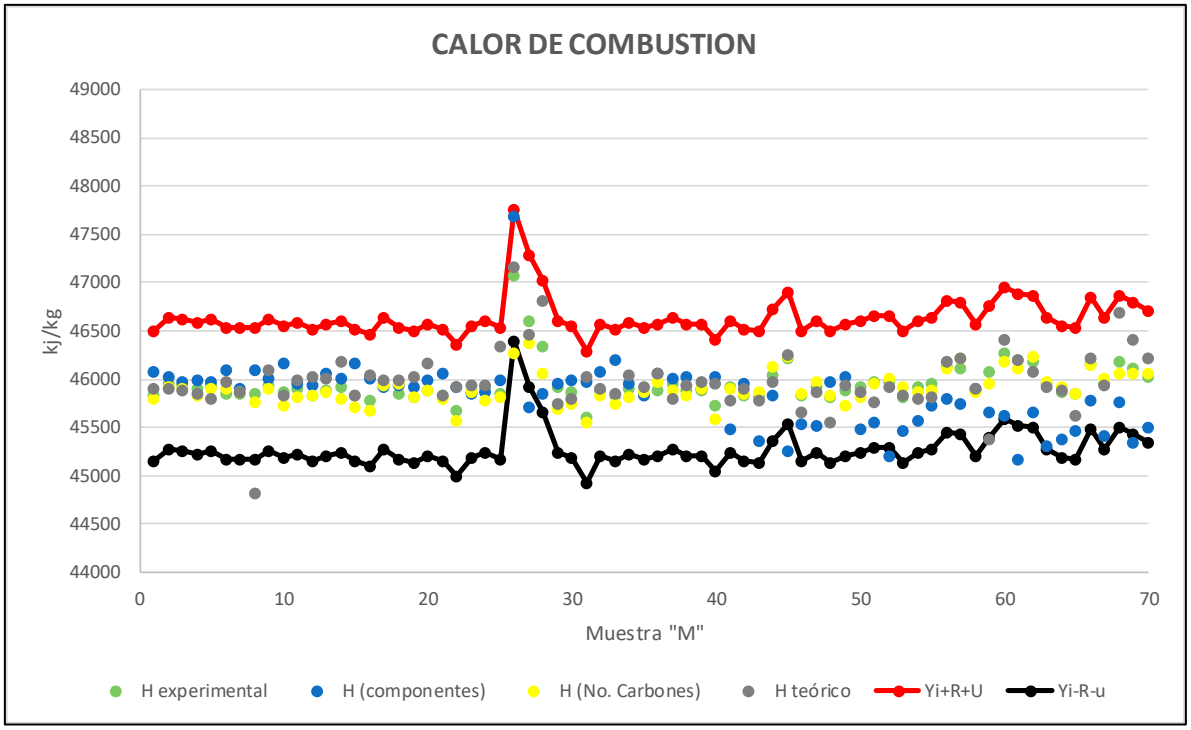
Tabla 36. Relaciones propiedad composición Calor de combustión bruto

Tipo de Relación	Ecuación
Teórica	$Hmezcla = \sum_{i=1}^{n} Xi * Gi$ $\sum_{i=1}^{n} Xi = 1.0$ Donde $Hmezcla$ Propiedad de la mezcla Hi Propiedad del componente puro i Xi Fracción molar del componente i
Estadística por componentes	$H = (8.478 * 10^{-141} + 3.036 * 10^{-141} * PC2 + 1.746 * 10^{-141} * P3 - 2.040 * 10^{-141} * P6 + 7.056 * 10^{-141} * A3 + 9.333 * 10^{-141} * A6 + 5.279 * 10^{-141} * N1)^{-0.03}$
Estadística por No. Carbonos	$H = 46326.953 + 40.049 * \mathrm{C1C8} - 248.163 * \mathrm{C2C7} - 56.923 * \mathrm{C2C15} + 131.979 * \mathrm{C2C16} + 234.547 * \mathrm{C2C17} + 415.456 * \mathrm{C3C17} - 54.755 * \mathrm{C3C19} - 96.462 * \mathrm{C4C13} - 118.732 * \mathrm{C6C8} - 108.447 * \mathrm{C6C10} - 68.671 * \mathrm{C6C11} - 184.263 * \mathrm{C7C11} + 52.974 * \mathrm{C8C9} - 28.12 * \mathrm{C8C10} - 63.662 * \mathrm{C8C11} - 76.324 * \mathrm{C8C12} - 52.951 * \mathrm{C9C10} + 305.484 * \mathrm{C9C13} - 98.025 * \mathrm{C10C7} - 41.012 * \mathrm{C10C9} - 20.361 * \mathrm{C10C10} - 102.861 * \mathrm{C10C12} - 164.259 * \mathrm{C10C14} - 44.946 * \mathrm{C11C13} + 28.909 * \mathrm{PC1} - 35.521 * \mathrm{PC3} - 63.493 * \mathrm{PC6} + 28.075 * \mathrm{PC7}$

Fuente: elaboración propia

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 36 y teniendo en cuenta el criterio establecido anteriormente y de acuerdo con los valores de reproducibilidad e incertidumbre para este método de prueba (R= 400 kJ/kg, U= 283 +/- kJ/kg). De la figura 43 se puede ver que el calor de combustión es un parámetro que se ajusta muy bien por las 3 relaciones presentadas.

La relación estadística por No. Carbones se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 98.6 %, seguido de la relación teórica con 97.1% y finalmente la relación estadística por componentes con 92.9%.



Fuente: elaboración propia

Figura 43. Comportamiento relaciones propiedad composición calor de combustión bruto

4.3.1.3. Punto de congelamiento

En la tabla 37 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para el Punto de congelamiento.

Tabla 37. Relaciones propiedad composición punto de congelamiento

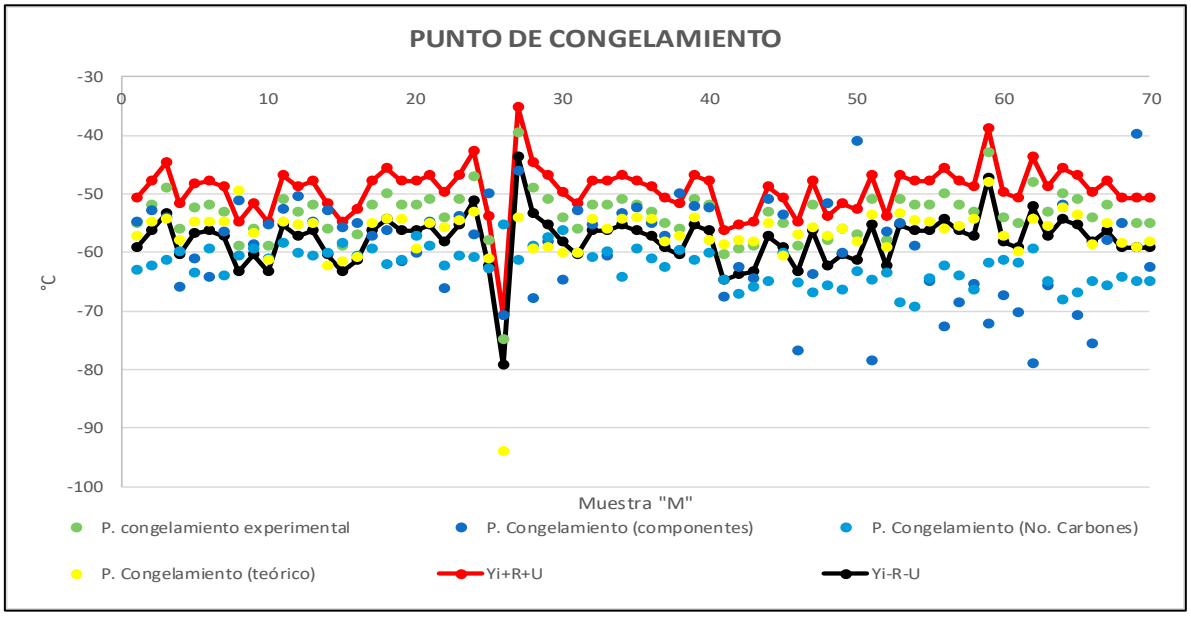
Tipo de Relación	Ecuación
Teórica	$exp\left(\frac{\Delta H_{m,i}}{RT_{m.i}}\left(\frac{T-T_{m.i}}{T}\right)\right) = \theta_i(T) = x_i^{\,L}$ Donde $\Delta H_{m,i}$ Entalpía de fusión del componente i T_{mi} Temperatura de fusión el componente i Xi Fracción molar del componente i Se evalúa la temperatura (T) para cada componente del Jet A1 y se escoge la mayor temperatura, que equivale a la Tco
Estadística por componentes	$Pcongelamiento = -70.864 + 9.236 * PC1 + 9.252 * PC3 - 18.288 * PC5 - 12.034 * PC7 + 12.719 * P6 + 2.723 * C6 + 16.354 * A3 - 8.058 * A4 + 17.240 * N1$

Tipo de Relación	Ecuación
Estadística por No. Carbonos	$P_{Congelamiento} = -55.6 + 3.60 * C2C7 - 1.23 * C2C9 + 0.45 * C2C14 + 2.76 * C2C16 - 4.27 * C3C17 + 1.06 * C3C19 + 1.27 * C5C7 + 1.40 * C5C8 + 0.67 * C5C9 - 0.94 * C5C11 + 0.98 * C5C12 - 1.61 * C6C11 - 1.72 * C6C12 - 2.52 * C6C13 + 5.96 * C7C11 + 0.45 * C8C10 - 0.82 * C8C11 - 1.04 * C8C12 - 1.41 * C9C10 - 0.90 * C10C7 + 0.70 * C10C9 - 0.42 * C10C10 - 2.23 * C10C14 - 2.39 * C10C15 + 0.76 * C11C13 - 1.20 * PC1 - 0.20 * PC2 - 1.03 * PC3 - 0.69 * PC4 - 0.60 * PC5 + 0.63 * PC7 + 0.53 * PC8$

Fuente: elaboración propia

Aunque en el desarrollo del trabajo, también se obtuvo relaciones propiedad composición estadísticas para la temperatura de inicio de cristalización (Tco), el parámetro de control de calidad para el combustible Jet A1 es el punto de congelamiento. La Tco se establece como técnica analítica para dar mayor soporte a los resultados encontrados para el punto de congelamiento.

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 37 y teniendo en cuenta el criterio establecido y de acuerdo con los valores de reproducibilidad e incertidumbre para este método de prueba (R= 2.5 °C, U= +/- 1.77 °C), de la figura 44 se puede ver que la relación teórica se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 68.6 %, seguido de la relación estadística por componentes con 40.0% y finalmente la relación estadística por No. Carbono con 10.0%.



Fuente: elaboración propia

Figura 44. Comportamiento relaciones propiedad composición punto de congelamiento

4.3.1.4. Temperatura de inicio de cristalización (Tco)

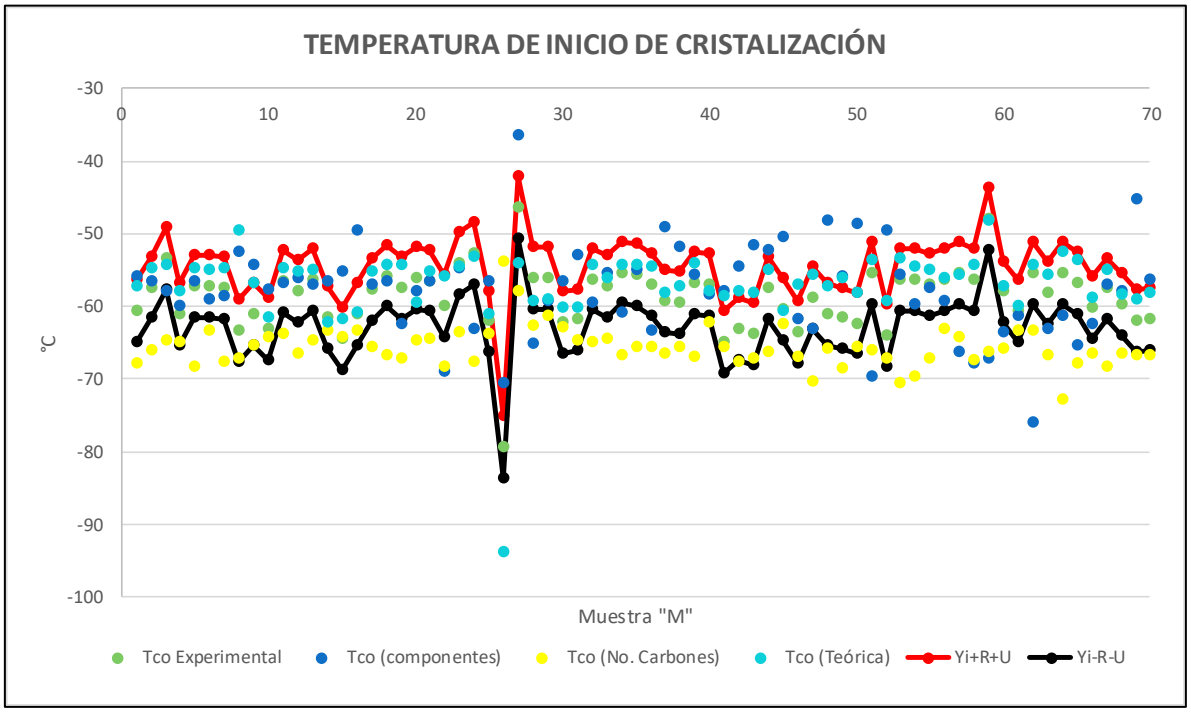
En la tabla 38 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para la Tco.

Tabla 38. Relaciones propiedad composición Tco

Tipo de Relación	Ecuación
Teórica	$exp\left(\frac{\Delta H_{m,i}}{RT_{m.i}}\left(\frac{T-T_{m.i}}{T}\right)\right) = \theta_i(T) = x_i^{\,L}$ Donde $\Delta H_{m,i}$ Entalpía de fusión del componente i T_{mi} Temperatura de fusión el componente i Xi Fracción molar del componente i Se evalúa la temperatura (T) para cada componente del Jet A1 y se escoge la mayor temperatura, que equivale a la Tco
Estadística por componentes	$Tco = -70.587 + \mathbf{12.155} * \boldsymbol{PC3} - \mathbf{8.334} * \boldsymbol{PC5} + 7.876 * P6 + 4.586 * A1 + 5.020 * A2$
Estadística por No. Carbonos	$Tco = -52.73 - 1.02 * \mathrm{C2C9} - 0.35 * \mathrm{C2C13} + 0.54 * \mathrm{C2C14} + 2.61 * \mathrm{C2C16} + 10.75 * \mathrm{C2C17} + 5.23 * \mathrm{C2C18} + 0.55 * \mathrm{C3C14} - 2.52 * \mathrm{C3C17} - 0.66 * \mathrm{C3C19} - 1.08 * \mathrm{C4C9} + 0.84 * \mathrm{C410} + 3.60 * \mathrm{C4C15} + 1.18 * \mathrm{C5C8} + 1.24 * \mathrm{C5C9} - 1.31 * \mathrm{C5C10} - 1.37 * \mathrm{C5C11} - 1.24 * \mathrm{C5C13} + 3.93 * \mathrm{C6C8} - 1.71 * \mathrm{C6C9} + 3.60 * \mathrm{C6C10} - 1.30 * \mathrm{C6C11} - 2.01 * \mathrm{C6C12} - 3.23 * \mathrm{C6C13} - 0.42 * \mathrm{C8C9} + 0.38 * \mathrm{C8C10} - 2.44 * \mathrm{C8C11} - 1.81 * \mathrm{C8C12} - 2.05 * \mathrm{C9C10} - 1.67 * \mathrm{C10C7} - 1.67 * \mathrm{C10C9} - 1.03 * \mathrm{C10C10} - 1.11 * \mathrm{C10C14} + 0.86 * \mathrm{C11C13} - 1.39 * \mathrm{PC1} + 0.36 * \mathrm{PC2} - 0.69 * \mathrm{PC3} - 0.35 * \mathrm{PC4}$

Fuente: elaboración propia

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 38 y teniendo en cuenta el criterio establecido y de acuerdo con los valores de reproducibilidad e incertidumbre para punto de congelamiento (R= 2.5 °C, U= +/- 1.77 °C), de la figura 45 se puede ver que la relación teórica se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 82.69%, seguido de la relación estadística por componentes con 40.0% y finalmente la relación estadística por No. Carbono con 22.9%. El desempeño de la relación es mayor en la Tco que en el punto de congelamiento a excepción del comportamiento presentado por la relación estadística por componentes que presenta un valor similar. Era de esperar un mejor ajuste con la relación teórica ya que el modelo esta desarrollado para determinar el inicio de la cristalización (Tco).



Fuente: elaboración propia

Figura 45. Comportamiento relaciones propiedad composición "Tco"

4.3.1.5. Punto de Inflamación

En la tabla 39 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para el punto de inflamación.

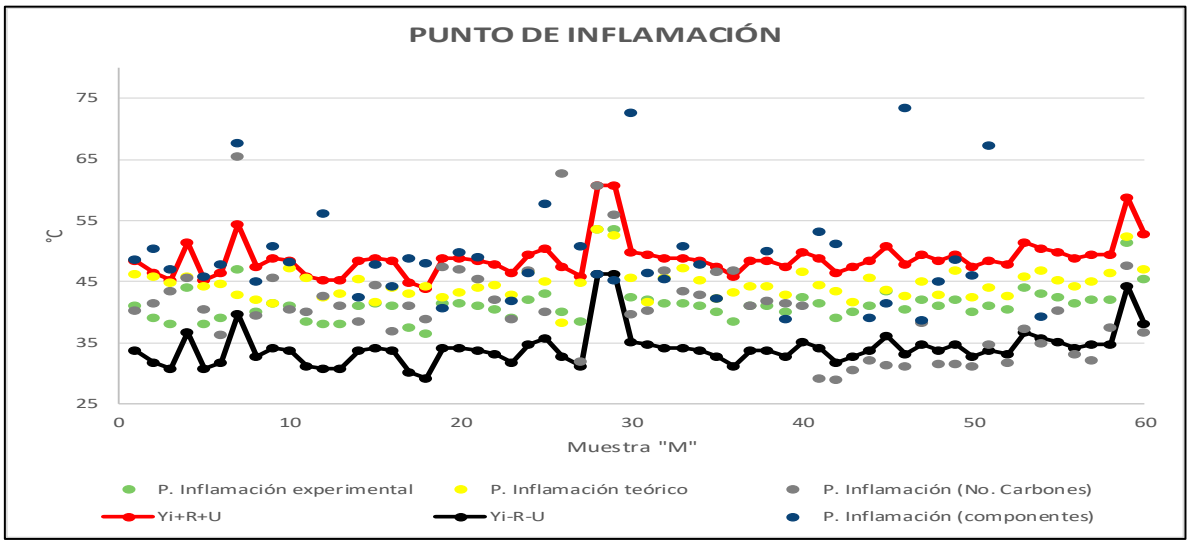
Tabla 39. Relaciones propiedad composición punto de inflamación

Tipo de Relación	Ecuación
Teórica	$1.0 = \sum \frac{xiP_i^{sat}}{P_{i,fp}^{sat}}$ $Ln\frac{P_2}{P_1} = \frac{\Delta H_{vap}}{R}\left(\frac{1}{T2} - \frac{1}{T1}\right)$ (Ecuación de Clausius Clapeyron) Donde $P_{i,fp}^{sat}$ presión de vapor saturado en el punto de inflamación del componente puro i $\Delta H_{vap,i}$ Entalpia de vaporización del componente i Xi Fracción molar del componente i Se supone una temperatura, se encuentra la presión de vapor saturado del componente puro y se verifica la relación

Tipo de Relación	Ecuación
Estadística por componentes	$P_{Inflamacion} = (3.228 * 10^{-07} - 2.529 * 10^{-07} * PC3 - 3.831 * 10^{-07} * PC4 + 1.909 * 10^{-07} * P6 + \mathbf{7.597 * 10^{-08} * C6 - 4.453 * 10^{-07} * A3})^{-0.25}$
Estadística por No. Carbonos	$P_{Inflamacion} = (1.54* 10^{-2} -9.00* 10^{-4} *\mathrm{C1C8} + 1.05* 10^{-3} *\mathrm{C2C9} - 3.22 * 10^{-4} *\mathrm{C2C13} - 8.41* 10^{-4} *\mathrm{C2C14} - 1.01* 10^{-3} *\mathrm{C2C16} - 4.47* 10^{-3} *\mathrm{C2C18} + 1.64* 10^{-3} *\mathrm{C2C19} + 5.36* 10^{-3} *\mathrm{C3C7} + 4.15* 10^{-4} *\mathrm{C3C14} + 8.10* 10^{-3} *\mathrm{C3C17} + 1.08* 10^{-3} *\mathrm{C4C7} + 1.68* 10^{-3} *\mathrm{C4C8} + 2.14 * 10^{-3} *\mathrm{C4C9} + 1.35* 10^{-3} *\mathrm{C4C12} + 6.71* 10^{-4} *\mathrm{C4C14} - 1.15* 10^{-3} *\mathrm{C4C15} - 5.02* 10^{-4} *\mathrm{C5C9} + 1.02* 10^{-3} *\mathrm{C5C11} + 1.22* 10^{-3} *\mathrm{C5C12} + 1.30* 10^{-3} *\mathrm{C5C13} + 4.94* 10^{-3} *\mathrm{C6C9} - 1.66* 10^{-3} *\mathrm{C6C10} + 3.17* 10^{-3} *\mathrm{C6C12} + 2.08* 10^{-3} *\mathrm{C6C13} - 9.27* 10^{-3} *\mathrm{C7C11} + 1.10* 10^{-3} *\mathrm{C8C9} - 5.78* 10^{-4} *\mathrm{C8C10} + 1.94* 10^{-3} *\mathrm{C8C12} + 1.79* 10^{-3} *\mathrm{C9C10} + 7.13* 10^{-3} *\mathrm{C9C13} + 2.93* 10^{-3} *\mathrm{C10C7} + 9.29* 10^{-4} *\mathrm{C10C8} + 9.99* 10^{-4} *\mathrm{C10C10} - 4.84* 10^{-4} *\mathrm{C10C12} - 2.18* 10^{-3} *\mathrm{C10C13} + 3.37* 10^{-3} *\mathrm{C10C15} - 1.10* 10^{-3} *\mathrm{C11C13} + 2.28 * 10^{-4} *\mathrm{PC1} + 9.22* 10^{-4} *\mathrm{PC2} - 7.48* 10^{-4} *\mathrm{PC3} + 8.45* 10^{-4} *\mathrm{PC4} + 3.84* 10^{-4} *\mathrm{PC5} - 4.27* 10^{-4} *\mathrm{PC6} + 8.46* 10^{-4} *\mathrm{PC7})^{-1}$

Fuente: elaboración propia

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 39 y teniendo en cuenta el criterio establecido y de acuerdo con los valores de reproducibilidad e incertidumbre para punto de inflamación (R= 4.3 °C, U= +/- 3.039 °C), de la figura 46 se puede ver que la relación teórica se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 68.6%, seguido de la relación estadística por No. Carbonos con 44.3% y finalmente la relación estadística por componentes con 38.6%.



Fuente: elaboración propia

Figura 46. Comportamiento relaciones propiedad composición punto de Inflamación

4.3.1.6. Viscosidad Cinemática

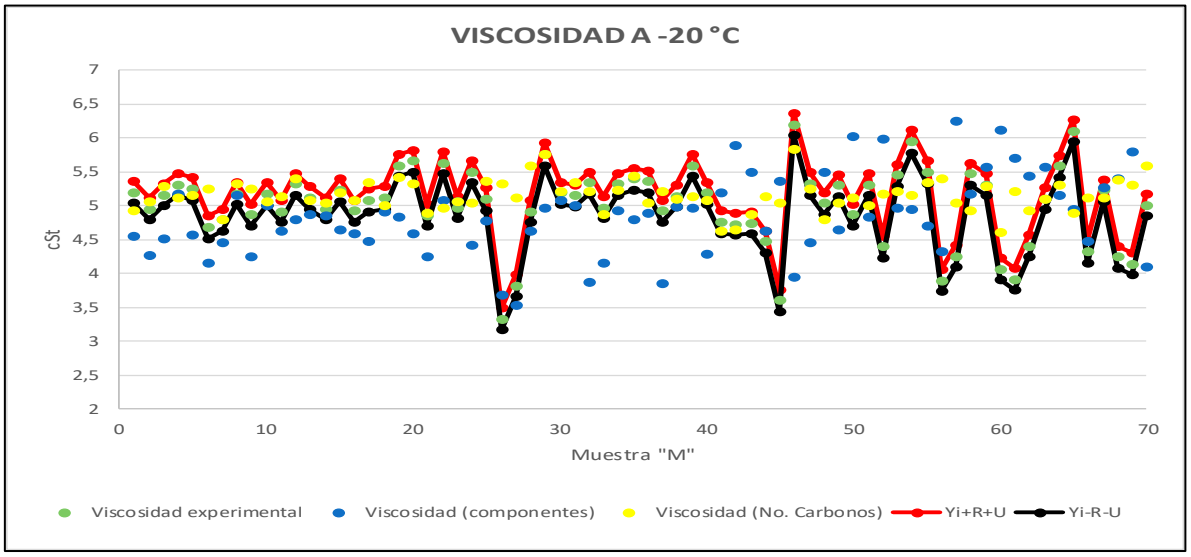
En la tabla 40 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para la viscosidad a -20 °C. No se presenta una relación teórica, por la falta de información de los componentes puros en lo que respecta a la viscosidad a -20 °C.

Tabla 40. Relaciones propiedad composición viscosidad cinematica a -20 °C

Estadística por componentes	$Visc_{-20_C} = 3.6848 - 1.0223 * PC7 + 0.4070 * IT + 0.4633 * P3 - 0.3690 * P6 + \mathbf{2.8077} * \boldsymbol{A3} + \mathbf{1.0837} * \boldsymbol{N1}$
Estadística por No. Carbonos	$Visc_{-20_C} = 5.22 + 0.57 * \mathrm{C2C16} - 1.41 * \mathrm{C2C18} + 0.11 * \mathrm{C3C14} - 0.68 * \mathrm{C3C17} - 0.16 * \mathrm{C4C9} - 0.12 * \mathrm{C410} - 0.14 * \mathrm{C4C12} - 0.30 * \mathrm{C4C13} - 0.14 * \mathrm{C4C14} - 0.45 * \mathrm{C4C15} + 0.18 * \mathrm{C5C12} - 0.32 * \mathrm{C6C9} + 0.38 * \mathrm{C7C11} + 0.42 * \mathrm{C7C12} + 0.08 * \mathrm{C8C11} - 0.52 * \mathrm{C10C15} + 0.13 * \mathrm{C11C13} - 0.06 * \mathrm{PC1} + 0.13 * \mathrm{PC2} + 0.11 * \mathrm{PC3} - 0.14 * \mathrm{PC4} - 0.10 * \mathrm{PC7}$

Fuente: elaboración propia

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 40 y siguiendo un proceso de análisis similar (R= 0.095 cSt, U= +/- 0.0671 cSt), de la figura 47 se puede ver que la relación estadística por No. Carbonos se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 42.9%, seguido de la relación estadística por componentes con 12.9% y finalmente la relación estadística por componentes con 41.4%.



Fuente: elaboración propia

Figura 47. Comportamiento relaciones propiedad composición viscosidad

4.3.1.7. Destilación

En la tabla 41 se presenta las relaciones propiedad composición desarrollas para la destilación en los puntos T10 (Temperatura al 10% recobrado) y PFE (punto final de ebullición por caracterizarse como parámetros de control de calidad y evaluación de la conformidad. Aunque en el desarrollo de las relaciones se han contemplado otros puntos de la curva de destilación.
No se presenta una relación teórica, por la falta de información de la composición en la fase de vapor. El método experimental para la evaluación de la curva de destilación no contempla esta información.

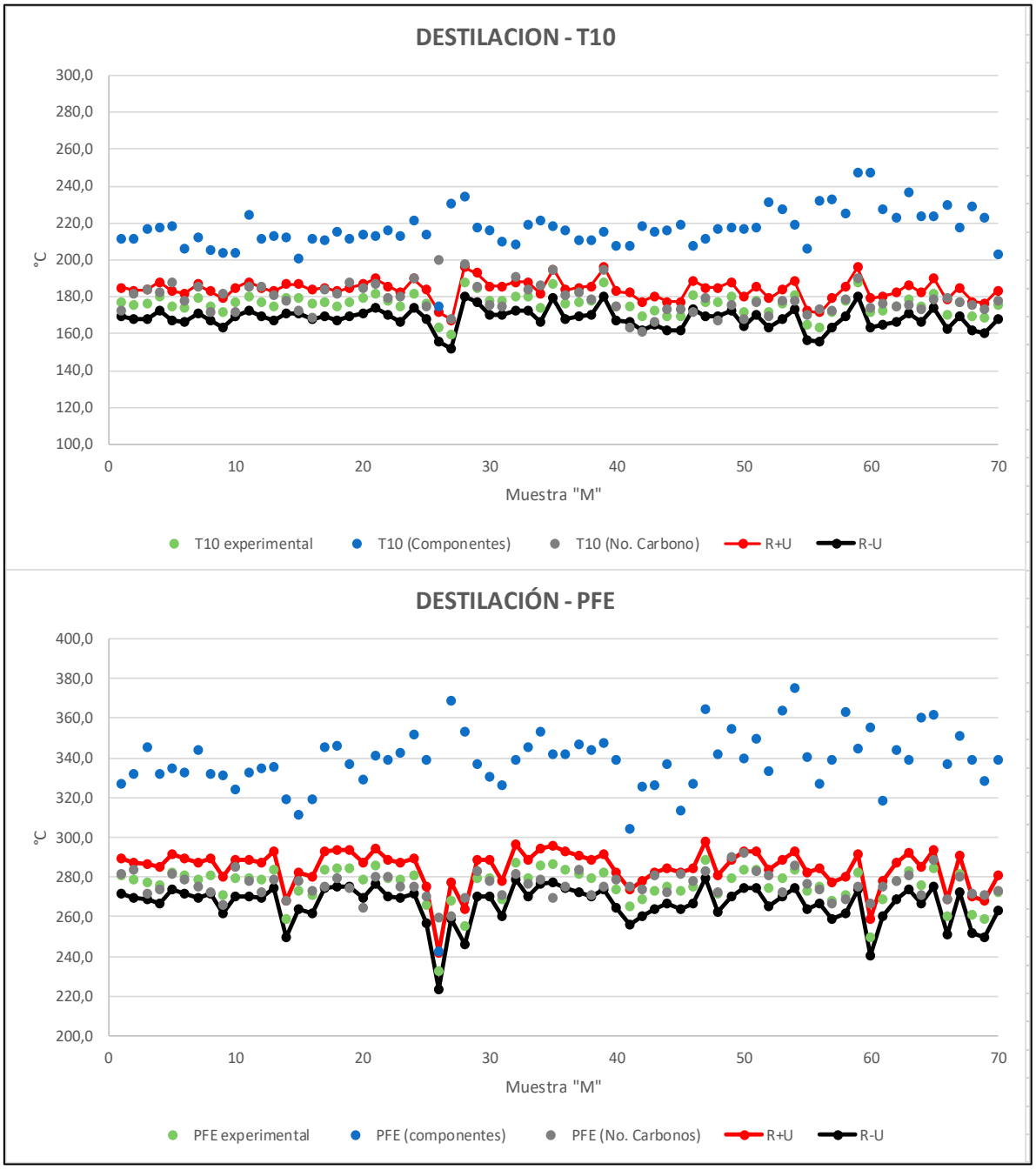
Tabla 41. Relaciones propiedad composición destilación

Estadística por componentes	$\mathrm{T}_{10} = e^{(5.13989+0.05612*\mathrm{PC2}+0.06041*\mathrm{PC4}-\mathbf{0.08613}*\mathbf{PC7}-0.04960*\mathrm{P6}+\mathbf{0.12582}*\mathbf{A3}+0.05436*\mathrm{A7})}$ $PFE = 242.304 + \mathbf{18.860} * \mathbf{PC2} - \mathbf{18.036} * \mathbf{PC5} + 10.284 * \mathrm{IT} + 6.701 * \mathrm{C6} + 11.093 * \mathrm{C10} + 7.149 * \mathrm{A2} + \mathbf{20.066} * \mathbf{N1}$
Estadística por No. Carbonos	$T_{10} = 207.169 - 5.669 * C2C9 - 2.1603 * C2C15 + 4.2786 * C2C16 - 11.6974 * C2C17 - 11.7723 * C2C18 - 1.8518 * C3C14 - 14.3801 * C3C17 + 96.1984 * C3C18 - 2.8442 * C4C7 - 5.9888 * C4C8 - 3.6456 * C410 - 1.5091 * C4C12 - 2.3994 * C4C14 + 5.2782 * C5C7 - 3.1409 * C5C8 - 4.1572 * C5C11 - 2.9903 * C5C13 - 7.7961 * C6C8 - 5.1418 * C6C9 - 14.448 * C6C10 - 9.2056 * C6C12 - 11.9688 * C6C13 + 6.9018 * C7C10 + 20.6638 * C7C11 - 0.8451 * C8C9 + 2.1293 * C8C11 - 2.1056 * C9C10 + 2.3624 * C10C9 - 1.5029 * C10C10 - 5.4097 * C10C13 - 2.8179 * C10C14 - 9.2827 * C10C15 + 2.0781 * C11C13 - 0.6427 * PC1 + 3.1751 * PC3 - 1.9338 * PC4 + 1.3835 * PC5 - 1.5184 * PC7$ $PFE = 274.5426 - 8.6282 * \mathrm{C1C8} - 3.1558 * \mathrm{C2C9} - 1.3468 * \mathrm{C2C13} - 2.066 * \mathrm{C2C14} - 41.2425 * \mathrm{C2C17} - 37.2018 * \mathrm{C2C18} - 3.2135 * \mathrm{C3C14} + 3.6052 * \mathrm{C3C19} + 3.073 * \mathrm{C4C9} + 2.6661 * \mathrm{C4C12} - 6.2658 * \mathrm{C5C7} - 3.1205 * \mathrm{C5C9} + 6.3708 * \mathrm{C5C12} - 7.8079 * \mathrm{C6C10} + 4.3384 * \mathrm{C6C11} + 9.1043 * \mathrm{C6C12} + 9.1233 * \mathrm{C6C13} + 6.2626 * \mathrm{C7C10} - 12.1323 * \mathrm{C7C11} + 6.6917 * \mathrm{C7C12} + 4.928 * \mathrm{C8C11} + 5.9137 * \mathrm{C9C10} + 7.3939 * \mathrm{C10C8} + 2.6091 * \mathrm{C10C9} + 1.4598 * \mathrm{C10C10} - 11.0091 * \mathrm{C10C13} - 1.4271 * \mathrm{PC1} + 0.8031 * \mathrm{PC2} + 1.7564 * \mathrm{PC5} + 3.3359 * \mathrm{PC6} + 1.4288 * \mathrm{PC7} - 1.2678 * \mathrm{PC8}$

Fuente: elaboración propia

Con la aplicación de las relaciones de la tabla 41 y teniendo en cuenta el criterio establecido anteriormente los valores de reproducibilidad e incertidumbre para destilación T10 (R=4.6 °C, U= +/- 3.25 °C) y PFE (R=5.3 °C, U= +/- 3.75 °C), de la figura 48 se puede ver que la relación estadística por No. Carbonos se ajusta en mayor escala al criterio establecido con 75.7% para T10 y 72.9 para PFE. Con las

relaciones estadísticas por componentes para T10 y PFE se observa que no se ajustan al criterio establecido, pero presentan un racha o tendencia por encima indicando que con la ayuda de un factor se podría mejorar el desempeño de las relaciones.



Fuente: elaboración propia

Figura 48. Comportamiento relaciones propiedad composición destilación

4.3.2. Medición de exactitud de las relaciones propiedad composición

La medición de exactitud de las relaciones propiedad composición se realiza con base en:

- Estimación del error absoluto porcentual promedio (MAPE) y la raíz cuadra del error cuadrático medio (RMSE o SEP)
- Comparación con un programa de pruebas de aptitud ASTM.
- Comparación con otras relaciones propiedad composición

4.3.2.1. Estimación del error MAPE y del error RMSE

En la tabla 42 se presenta los errores MAPE y RMSE para cada una de las relaciones propiedad composición desarrolladas para las propiedades fisicoquímicas evaluadas.

Tabla 42. Errores en las relaciones propiedad composición

Propiedad Fisicoquímica	RMSE			MAPE		
	Teórico	Componentes	Carbonos	Teórico	Componentes	Carbonos
T10 (°C)	-	42.52	**7.42**	-	23.35	**3.18**
PFE (°C)	-	64.14	**7.41**	-	22.64	**2.15**
Gravedad API a 15.56 °C (°API)	**1.43**	2.60	2.33	**2.62**	5.79	2.63
Calor de combustión (MJ/kg)	0.222	0.377	**0.129**	0.32	0.63	**0.17**
Punto de congelamiento (°C)	**4.85**	10.80	10.32	**7.23**	15.54	17.85
Punto de inflamación (°C)	**3.68**	16.63	7.17	**7.67**	29.36	13.89
Tco (°C)	**3.74**	7.69	8.85	**4.61**	10.16	13.37
Viscosidad a -20 °C (cSt)	-	0.86	**0.57**	-	14.19	**8.62**

Fuente: elaboración propia

De la tabla 42 se puede concluir:

- La destilación en las temperaturas T10 y PFE, Calor de Combustión bruto y Viscosidad Cinemática a -20 °C presenta una mejor medición con las relaciones estadísticas por No. Carbonos. Este aspecto también se cumple con el uso del criterio técnico establecido para evaluar el desempeño de las relaciones (Sección 4.3.1.).
- La Gravedad API, Punto de Congelamiento, Punto de Inflamación y Temperatura de Inicio de Cristalización (Tco) presentan una mejor medición con las relaciones teóricas. Este aspecto también se cumple con el uso del criterio técnico para

evaluar el ajuste de las relaciones (Sección 4.3.1.) a excepción de la Gravedad API que muestra un mejor desempeño con la relación estadística por No. Carbonos.

Las relaciones desarrolladas por componentes son el resultado de buscar un análisis de componentes principales que afectan las propiedades fisicoquímicas y no contempla la información total de los componentes, ya que hay diferencias de muestra a muestra como resultado de la variación de la composición del petróleo de donde provienen (ver anexo 1).

4.3.2.2. Comparación con un programa de pruebas de aptitud de ASTM.

En la tabla 43 se presenta la medición de exactitud de las relaciones propiedad composición para los resultados generados de un programa de pruebas de aptitud de ASTM (Sección 3.6.2.). La comparación se realiza usando las relaciones que mejor ajuste presentaron para cada una de las propiedades evaluadas.

Tabla 43. Comparación con programa de pruebas de aptitud ASTM

Propiedad Fisicoquímica	Resultado programa ASTM Muestra M27	Resultado programa ASTM Muestra M59	RMSE	MAPE
T10 (°C)	161.54	181.59	7.57	4.34
PFE (°C)	259.88	285.32	7.23	1.82
Gravedad API a 15.56 °C (°API)	47.4	43.5	1.95	3.10
Calor de combustión bruto (MJ/kg)	46.1101	46.1395	0.232	0.49
Punto de congelamiento (°C)	-41.472	-43.743	9.41	20.16
Punto de inflamación (°C)	40.12	52.34	3.31	5.87
Viscosidad a -20 °C (cSt)	3.8575	5.2816	0.88	6.89

Fuente: elaboración propia

De la tabla 43 se puede ver que las relaciones presentan un buen desempeño al momento de estimar las propiedades objeto de medición. Comparando los errores con el criterio técnico basado en la reproducibilidad e incertidumbre del método de medición experimental, se encuentra que los resultados cumplen con este criterio a excepción de las propiedades viscosidad, gravedad API y Punto de congelamiento. Es de resaltar que estas muestras son de Estados Unidos de América y el combustible de aviación usado es Jet A (diferencia principal punto de congelamiento).

4.3.2.3. Comparación con otras relaciones propiedad composición

Cookson and Smith (1992, 1990) estudiaron la composición química de más de 100 combustibles Jet y diésel con GC, H NMR y C NMR y encontraron correlaciones de los combustibles con carbones aromáticos, carbones n-alquílicos por C NMR para Gravedad API (densidad), calor de combustión y punto de congelamiento. Los valores de RMSE (unidades manejadas en la tabla 42) reportados son 2,7 para Gravedad API, (0.012 para densidad), 0.20 para calor de combustión y 2.1 para punto de congelamiento. No se realizó relaciones para otras propiedades en el Jet A1.
Comparando con el desempeño de las relaciones propiedad composición que mejor ajuste presentan en este trabajo. De la tabla 42, se puede ver que los resultados de RMSE para la relación obtenidos por las relaciones propiedad composición de este trabajo son menores para Gravedad API y Calor de combustión a excepción del punto de congelamiento donde se encuentra lo contrario.

Liu et al. (2007), presentaron varias correlaciones propiedad composición para combustibles Jet, incorporando la influencia de contenido de compuestos isoparafínicos y rangos de ebullición. La técnica GC-MS fue usada para determinar la composición. Para el desarrollo de las relaciones propiedad composición usan modelos de regresión lineal múltiple (relación 1 en función de la composición, relación 2 en función de la composición y algunos puntos de la curva de destilación) y redes neuronales (multiple-layer feedforward neural network, “MLFNN”).
La medición de la exactitud de las relaciones se hace con base en el error MAPE para densidad y punto de inflamación y el error absoluto promedio (MAD) para punto de congelamiento y calor de combustión.

- Errores de MAPE en punto de inflamación: 1.59 (MLFNN), 3.93 (relación 1) y 2.83 (relación 2).
- Errores de MAD en punto de congelamiento: 2.4 (MLFNN), 2.7 (relación 1) y 2.6 (relación 2).
- Errores de MAD en calor de combustión: 2.3 (MLFNN), 3.2 (relación 1) y 2.6 (relación 2).

En comparación con los resultados de este trabajo, de la tabla 42 se puede observar que las relaciones desarrolladas en este trabajo presentan un valor mayor de MAPE. Estimando los errores MAD para punto de congelamiento se encuentra un valor ligeramente más alto (3.81), mientras que para el calor de combustión se encuentra un MAD (0.08) inferior.

Cooper et al. (2011), usaron “FTIR” específicamente espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) para crear modelos PLS usando la información de las propiedades medidas de los combustibles y los espectros generados. Las propiedades evaluadas fueron punto de inflamación, densidad, viscosidad, punto de congelamiento y destilación, pero los resultados mostraron buenas correlaciones para la densidad y las temperaturas de 10%, 20% y 50% para la destilación sin estimar errores de pronóstico. La medición de exactitud de las relaciones está

basada en la comparación de la desviación estándar de los resultados de las propiedades fisicoquímicas con la reproducibilidad del método de ensayo utilizado. Los valores de desviación estándar son inferiores que el valor de Reproducibilidad. Este aspecto técnico también se ha utilizado para evaluar el desempeño de las relaciones en la sección 4.3.1. obteniendo resultados similares.

Las relaciones propiedad composición ofrecidos por la mayoría de los autores están basadas en el desarrollo de modelos estadísticos para mejorar la predicción de los resultados, sin tener un estudio teórico detallado de los efectos que puede llegar a tener cada componente en la propiedad fisicoquímica evaluada.

Las relaciones propiedad composición teóricas desarrolladas en este estudio están basadas en función de las propiedades de los componentes puros. Las bases de datos existentes de propiedades de algunos componentes puros no son datos experimentales, en muchos casos son el resultado del uso de una relación para estimar la propiedad. Este aspecto disminuye la exactitud de los modelos planteados, sumado a las suposiciones de asumir coeficientes de actividad unitarios (condiciones ideales). La base de datos de este estudio se podrá utilizar para el desarrollo de proyectos futuros en la estimación de relaciones propiedad composición con modelos PLS, quimiométricos y de redes neuronales, que permitan obtener específicamente para Colombia herramientas de predicción de propiedades fisicoquímicas del combustible de aviación jet A1 de mejor precisión para el control de calidad y evaluación de la conformidad.

5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVA DE FUTURO

- La composición del combustible Jet A1 en la base de muestras recolectada a nivel nacional en Colombia se puede clasificar en 5 familias principales de hidrocarburos: compuestos parafínicos con un valor promedio de 67.85 % masa (desviación estándar de 5.49 % masa), seguido de los compuestos nafténicos con 15.12 % masa (desviación estándar de 3.19 % masa), compuestos aromáticos con 11.86 % masa (desviación estándar de 2.30 % masa), compuestos naftalenos con 3.90 % masa (desviación estándar de 1.15 % masa) y finalmente compuestos indanos y tetralinas con 1.27 % masa (desviación estándar de 0.60 % masa).

- La composición predominante del Jet A1 en la base de muestras recolectada a nivel nacional en Colombia de acuerdo con el número de carbonos esta entre 9 y 14 carbonos (87.97 % masa promedio), con mayor tendencia a estar presente los compuestos parafínicos normales para el numero de carbonos 9 a 12 con valores promedio de (2.53, 4.07, 6.03 y 3.99) % masa y desviación estándar media (0.94, 1.31, 1.65 y 0.80) % masa. Para el número de carbono 13, la clase de hidrocarburos que se encuentra en mayor % masa promedio es la de compuestos isoparafínicos altamente ramificados (6.10 % masa promedio y 2.70 % masa de desviación estándar media) y para el numero de carbono 14, la clase de hidrocarburos que se encuentra en mayor % masa promedio es isoparafinicos monoramificados (2.94 % masa promedio y 1.11 % masa de desviación estándar media).

- La clase de hidrocarburos C1C13 (parafínicos normales de numero de carbono 13) presenta mayores efectos sobre todas las propiedades fisicoquímicas evaluadas (gravedad API, Destilación, Calor de Combustión bruto, Punto de Congelamiento, Temperatura de inicio de cristalización, Punto de Inflamación y Viscosidad cinemática a -20 °C).

- La clase de hidrocarburos C7C11 (alquilaromaticos mono ramificados de numero de carbono 11) influye en todas las propiedades estudiadas a excepción de la temperatura de inicio de cristalización, incluso como variable de más peso en varias propiedades. Aspecto similar ocurre con la clase de hidrocarburos

C3C17 (isoparafinicos (isoalcanos) altamente ramificados de No. Carbono 17.

- En la identificación de temperaturas para determinar el inicio en la formación de cristales de hidrocarburos en el combustible Jet A1, el punto de congelamiento evaluado por la norma ASTM D86 (método manual) presenta temperaturas mayores comparado con la temperatura de inicio de cristalización que es determinada mediante calorimetría diferencial de barrido.

- Los componentes principales que afectan las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1 en Colombia son:
  - Calor de combustión bruto: P3, P6, P18, A3, A6, N1
  - Destilación en el 10% de valor recobrado: P4, P6, P18, C2, A3, A7
  - Destilación en el punto final de ebullición: IT, P18, C4, C6, C10, A2, N1
  - Gravedad API a 60 °F (15,56 °C): IT, P6, P18, C4, C10, A2, A6, N1
  - Punto de congelamiento: P6, C2, C4, C5, C6, C8, A3, A4, N1
  - Punto de inflamación: P4, P6, C6, C8, A3
  - Viscosidad cinemática -20 °C: IT, P3, P6, C2, A3, N1
  - Temperatura de inicio de cristalización (Tco): P6, C4, C8, A1, A2

- Los componentes individuales que se encuentran en mayor cantidad por familia de hidrocarburos en la base de muestras recolectadas en Colombia son P14 y P17 en los compuestos parafínicos, C5 y C6 en los compuestos nafténicos, A1, A6 y A7 en los compuestos aromáticos y N2 y N3 en los compuestos naftalenos.

- El proceso de mezclado agua-Jet A1 (contacto por agitación del agua con el Jet A1) permite establecer que a cantidades superiores de 3000 ppm de agua hay un efecto notable sobre las propiedades fisicoquímicas del combustible (Destilación, Gravedad API, punto de congelamiento, punto de inflamación, temperatura de inicio de cristalización y viscosidad cinemática a -20 °C) a excepción del calor de combustión.

- Con aumentos en la cantidad de agua agregada a que va a estar presente en el proceso de mezclado agua-Jet A1, las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1 (Destilación, Gravedad API, punto de congelamiento, punto de inflamación, temperatura de inicio de cristalización y viscosidad cinemática a -20 °C) presentan una tendencia en aumento excepto en la gravedad API que su efecto es descendente.

- El punto de congelamiento y la Tco tienden aumentar las temperaturas donde se observa cristales de hidrocarburos, en la medida en que muestras de combustible Jet A1 que son sometidas a cantidades de 10000 ppm de agua pueden llegar a estar por fuera de especificaciones de calidad. Un aspecto similar se encuentra con la viscosidad evaluada a -20 °C, donde se presenta una

tendencia al aumento llegando a quedar en zona no conforme con valores superiores a 9,0 cSt.

- El efecto ocasionado por el proceso de mezclado agua-Jet A1 hasta alcanzar visualmente una dilución presenta cambios notorios en las pruebas, ocasionados por cambios composicionales principalmente de los componentes Nafténico 2, Nafténico 3, Nafténico 5 y el Nafténico 10, que se caracterizan por ser componenentes livianos. Este efecto puede tener explicación y discusión por el tiempo efectuado para llevar a cabo el proceso (tiempo superior a 16 horas e inferior a 24 horas). Sería muy útil extender la investigación con un diseño de experimentos evaluando variables como tiempo, temperatura y velocidad de agitación y análisis estadístico y composicional por No. Carbonos.

- En un análisis estadístico propiedad (variable de salida) composición (variable de entrada) para evaluar el efecto generado por el proceso de mezclado agua-Jet A1 hasta alcanzar visualmente una dilución, los componentes con mayor efecto sobre las propiedades fisicoquímicas son los parafínicos 9, 10, 11, 15, 49 (principalmente por el compuesto parafínico 10) y el Aromático 3.

- La destilación en las temperaturas T10 y PFE, Calor de Combustión bruto y Viscosidad Cinemática a -20 °C presenta una mejor medición con las relaciones estadísticas por No. Carbonos y la Gravedad API, Punto de Congelamiento, Punto de Inflamación y Temperatura de Inicio de Cristalización (Tco) presentan una mejor medición con las relaciones teóricas.

- Con los componentes principales que afectan las propiedades fisicoquímicas del combustible Jet A1 sería muy útil ampliar la investigación en la evaluación del efecto generado en dichas propiedades por el uso de estos componentes puros como aditivos.

- Para la producción de combustibles en un país es de gran utilidad el conocimiento de la propiedad en función de la composición, ya que permite diseñar nuevos procesos para mejorar su calidad. Estudios de este tipo deberían realizarse en Colombia con toda la gama de combustibles y establecer una base de datos a nivel nacional que le sirva de herramienta a empresas productoras de un país al momento de la producción.

- El efecto ocasionado por un proceso de mezclado agua-Jet A1 hasta alcanzar visualmente una dilución, presenta cambios notorios en las pruebas a concentraciones de contacto superiores a 3000 ppm de agua, ocasionados por cambios composicionales. Este efecto puede tener explicación y discusión por el tiempo efectuado para llevar a cabo el proceso (tiempo superior a 16 horas e

inferior a 24 horas). Poder llevar este proceso a una escala mayor sería de gran utilidad para la industria de combustibles de aviación como herramienta para solucionar problemas de contaminación.

- Una forma de verificar mejores desempeños de los modelos teóricos planteados es realizar estudios eliminado suposiciones de condiciones ideales (estimación de coeficientes de actividad) y teniendo en cuenta factores como el contenido de humedad (Valor promedio 58 ppm) y contenido de azufre (valor promedio1000 ppm). La base de datos de este estudio se podrá utilizar para el desarrollo de proyectos futuros en la estimación de relaciones propiedad composición con modelos PLS, quimiométricos y de redes neuronales, que permitan obtener específicamente para Colombia herramientas de predicción de propiedades fisicoquímicas del combustible de aviación jet A1 de mejor precisión para el control de calidad y evaluación de la conformidad.

BIBLIOGRAFIA

- ASTM, 2020. ASTM D1655 - 20 Standard Specification for Aviation Turbine Fuels.
- ASTM, 2019a. ASTM D240 - 19 Standard Test Method for Heat of Combustion of Liquid Hydrocarbon Fuels by Bomb Calorimeter.
- ASTM, 2019b. ASTM D86 - 19 Standard Test Method for Distillation of Petroleum Products and Liquid Fuels at Atmospheric Pressure.
- ASTM, 2019c. ASTM D287 - 12b(2019) Standard Test Method for API Gravity of Crude Petroleum and Petroleum Products (Hydrometer Method).
- ASTM, 2019d. ASTM D2386 - 19 Standard Test Method for Freezing Point of Aviation Fuels.
- ASTM, 2019e. ASTM D445 - 19a Standard Test Method for Kinematic Viscosity of Transparent and Opaque Liquids (and Calculation of Dynamic Viscosity).
- ASTM, 2017. ASTM D2425 - 17 Standard Test Method for Hydrocarbon Types in Middle Distillates by Mass Spectrometry.
- ASTM, 2016. ASTM D56 - 16a Standard Test Method for Flash Point by Tag Closed Cup Tester.
- ASTM, 1988. Physical Constants of Hydrocarbon and Non-Hydrocarbon Compounds 2nd Edition Compiled by ASTM Committee D-2 On Petroleum Products And Lubricants And The American Petroleum Institute's Refining Department Technical Data Committee, Who Worked With The Depart.
- Baena-Zambrana, S., Repetto, S.L., Lawson, C.P., Lam, J.K.W., 2013. Behaviour of water in jet fuel - A literature review. Prog. Aerosp. Sci. doi:10.1016/j.paerosci.2012.12.001
- Cookson, D.J., Iliopoulos, P., Smith, B.E., 1995. Composition-property relations for jet and diesel fuels of variable boiling range. Fuel. doi:10.1016/0016-2361(94)P4333-W
- Cookson, D.J., Latten, J.L., Shaw, I.M., Smith, B.E., 1985. Property-composition relationships for diesel and kerosene fuels. Fuel. doi:10.1016/0016-2361(85)90086-9
- Cookson, D.J., Lloyd, C.P., Smith, B.E., 1987. Investigation of the Chemical Basis of Kerosene (Jet Fuel) Specification Properties. Energy and Fuels.

doi:10.1021/ef00005a011

- Cookson, D.J., Smith, B.E., 1992. Observed and Predicted Properties of Jet and Diesel Fuels Formulated from Coal Liquefaction and Fischer-Tropsch Feedstocks. Energy and Fuels. doi:10.1021/ef00035a007
- Cookson, D.J., Smith, B.E., 1990. Calculation of Jet and Diesel Fuel Properties Using 13C NMR Spectroscopy. Energy and Fuels. doi:10.1021/ef00020a004
- Cookson, D.J., Smith, B.E., Johnston, R.R.M., 1993. Relationships between diesel fuel ignition quality indicators and composition. Fuel. doi:10.1016/0016-2361(93)90578-P
- Cooper, J.B., Larkin, C.M., Schmitigal, J., Morris, R.E., Abdelkader, M.F., 2011. Rapid analysis of jet fuel using a handheld near-infrared (NIR) analyzer. Appl. Spectrosc. doi:10.1366/10-06076
- Cramer, J.A., Hammond, M.H., Myers, K.M., Leska, I.A., Morris, R.E., 2015. Expanded Framework for the Prediction of Alternative Fuel Content and Alternative Fuel Blend Performance Properties Using Near-Infrared Spectroscopic Data. Energy and Fuels. doi:10.1021/acs.energyfuels.5b01660
- Gehron, M., Yost, R., 2008. Hydrocarbon-Type Analysis of Jet Fuel with Gas Chromatography/Mass Spectrometry, in: Novel Techniques in Fossil Fuel Mass Spectrometry. ASTM International, pp. 24-24–14. doi:10.1520/stp18672s
- Gehron, M.J., Yosi, R.A., Gehron, R.:, Yost, M.J., 1989. Hydrocarbon-Type Analysis of Jet Fuel with Gas Chromatography/Mass.
- Gómez-Carracedo, M.P., Andrade, J.M., Calviño, M., Fernández, E., Prada, D., Muniategui, S., 2003. Multivariate prediction of eight kerosene properties employing vapour-phase mid-infrared spectrometry. Fuel. doi:10.1016/S0016-2361(02)00381-2
- Gujarati, D.N., Porter, D.C., 2009. Basic Econometrics (5th ed.), Basic Econometrics.
- Hemighaus, G., Bacha, J., Barnes, F., Franklin, M., Gibbs, L., Hogue, N., Lesninni, D., Lind, J., Maybury, J., Morris, J., 2006. Aviation Fuels Technical Review. Rev. Lit. Arts Am.
- ICONTEC, 2018. NTC 1899 - 18. Petróleo y sus derivados. combustible de aviación para motores a reacción.
- Kallio, P., Pásztor, A., Akhtar, M.K., Jones, P.R., 2014. Renewable jet fuel. Curr. Opin. Biotechnol. doi:10.1016/j.copbio.2013.09.006
- Lam, J.K.W., Carpenter, M.D., Williams, C.A., Hetherington, J.I., 2014. Water solubility characteristics of current aviation jet fuels. Fuel. doi:10.1016/j.fuel.2014.04.091
- Liu, G., Wang, L., Qu, H., Shen, H., Zhang, X., Zhang, S., Mi, Z., 2007. Artificial neural network approaches on composition-property relationships of jet fuels based on GC-MS. Fuel. doi:10.1016/j.fuel.2007.02.023

- Ministry of Defence, 2019. Def Stan 91-91. Turbine Fuel, Kerosene Type, Jet A-1; NATO Code: F-35; Joint Service Designation: AVTUR.
- Montgomery, D., 2004. Diseño y análisis de experimentos. Limusa Wiley.
- Murray, B.J., Broadley, S.L., Morris, G.J., 2011. Supercooling of water droplets in jet aviation fuel. Fuel. doi:10.1016/j.fuel.2010.08.018
- Pearson, K., Käfer, T., Kraaij, G., Wörner, A., 2015. Experimental study of the partial catalytic dehydrogenation of selected kerosene components with PteSn/γ-Al2O3. Int. J. Hydrogen Energy. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.11.060
- Rencher, A.C., William, F.C., 2012. Methods of multivariate analysis: Third edition, Methods of Multivariate Analysis: Third Edition. doi:10.1002/9781118391686
- Shen, J., Astrath, N.G.C., Pedreira, P.R.B., Guimarães, F.B., Gieleciak, R., Wen, Q., Michaelian, K.H., Fairbridge, C., Malacarne, L.C., Rohling, J.H., Baesso, M.L., 2016. Correlations among thermophysical properties, ignition quality, volatility, chemical composition, and kinematic viscosity of petroleum distillates. Fuel. doi:10.1016/j.fuel.2015.08.029
- Shi, X., Li, H., Song, Z., Zhang, X., Liu, G., 2017. Quantitative composition-property relationship of aviation hydrocarbon fuel based on comprehensive two-dimensional gas chromatography with mass spectrometry and flame ionization detector. Fuel. doi:10.1016/j.fuel.2017.03.073
- UNE, 2001. UNE-EN ISO 12937:2001 Productos petrolíferos.
- van der Westhuizen, R., Ajam, M., De Coning, P., Beens, J., de Villiers, A., Sandra, P., 2011. Comprehensive two-dimensional gas chromatography for the analysis of synthetic and crude-derived jet fuels. J. Chromatogr. A. doi:10.1016/j.chroma.2011.05.009
- Vozka, P., Kilaz, G., 2019. How to obtain a detailed chemical composition for middle distillates via GC × GC-FID without the need of GC × GC-TOF/MS. Fuel. doi:10.1016/j.fuel.2019.03.009
- Yang, H., Briker, Y., Szynkarczuk, R., Ring, Z., 2004. Prediction of density and cetane number of diesel fuel from GC-FIMS and PIONA hydrocarbon composition by neural network, in: ACS Division of Fuel Chemistry, Preprints.
- Yang, H., Ring, Z., Briker, Y., McLean, N., Friesen, W., Fairbridge, C., 2002. Neural network prediction of cetane number and density of diesel fuel from its chemical composition determined by LC and GC-MS. Fuel. doi:10.1016/S0016-2361(01)00121-1

ANEXOS

ANEXO 1. COMPOSICIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1 POR COMPONENTES

ANEXO 2. COMPOSICIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1 POR NÚMERO DE CARBONOS.

ANEXO 3. COMPOSICIÓN DEL COMBUSTIBLE JET A1 GENERADA POR EL EFECTO CONTACTO AGUA – COMBUSTIBLE.

ANEXO 4. PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS DEL COMBUSTIBLE JET A1 GENERADA POR EL EFECTO CONTACTO AGUA - COMBUSTIBLE

Este anexos se encuentran en formato .XLS como archivos adjuntos.