



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

SIMULACION Y PROPUESTA DE MEJORAS A LA PLANTA REFORMADORA DE NAFTAS DE LA REFINERIA DE TULA, HIDALGO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE: INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A : PATRICIA PEREZ ROMO



MEXICO, D. F.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

1994



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado:

Presidente: Prof. Martín Hernández Luna

Vocal: Prof. Enrique Bazúa Rueda

Secretario: Prof. Celestino Montiel Maldonado

1er. Suplente: Prof. Manuel Vázquez Islas

2do. Suplente: Prof. Rafael Isassi Orozco

Sitio donde se desarrollo el tema:

Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Química, UNAM.

Asesor:



Ing. Celestino Montiel Maldonado

Sustentante:

Patricia Pérez Romo
Patricia Pérez Romo

DEDICATORIA:

A mis padres:

Con mi infinito reconocimiento por su cariño y orientación.

Al Ing. Celestino Montiel:

Con mi eterno agradecimiento por su generoso apoyo profesional y por la desinteresada amistad que me ha brindado.

Al Dr. Martín Hernández:

Por la confianza y asesoría otorgadas.

INDICE

INTRODUCCIÓN

1. GENERALIDADES

1.1 Ingeniería de procesos	6
1.2 Diseño de procesos	7
1.3 Simulación de procesos químicos	12

2. SIMULADORES DE PROCESOS

2.1 Generalidades sobre los sistemas de simulación	18
2.2 Enfoque de los sistemas de simulación	26
2.3 Métodos de convergencia	35
2.4 Simuladores de procesos ASPEN-PLUS	38

3. REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTAS

3.1 Antecedentes	49
3.2 Reacciones químicas de reformación	51
3.3 Velocidades de reacción	56
3.4 Termodinámica	58
3.5 Cinética	59
3.6 Catalizadores	60
3.7 Condiciones de operación	61

3.8	Diseño del reactor	63
3.9	Procesos de reformación	67
3.10	Descripción del proceso	77
4. SIMULACIÓN DE LA REFORMADORA DE NAFTAS		
4.1	Pasos a seguir en una simulación de procesos	83
4.2	Resultados de la simulación	91
4.3	Aplicaciones de los métodos de convergencia	110
5. FUNDAMENTOS TERMODINÁMICOS		
5.1	Antecedentes	118
5.2	Método de exergia	120
5.3	Trabajo perdido	123
6. ANÁLISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES		
6.1	Análisis de resultados	127
6.2	Conclusiones	132
7. APÉNDICE		135
8. BIBLIOGRAFIA		153

INTRODUCCIÓN

La meta principal en la Ingeniería Química es buscar la eficiencia en el diseño y operación de procesos, por tanto, el desarrollo de este trabajo no sólo tiene como finalidad reproducir los resultados obtenidos de la operación de la planta mediante la ayuda de un simulador de procesos, sino que el principal objetivo consiste en evaluar el trabajo perdido en la planta Reformadora de Naftas a partir del análisis de la segunda ley de la termodinámica.

Para lograr el desarrollo de este trabajo se hizo uso del simulador de procesos ASPEN-PLUS por medio del cual se logró reproducir el comportamiento de la planta mediante la aplicación de modelos adecuados bajo determinadas condiciones.

Este trabajo se encuentra dividido en seis capítulos. En el primer capítulo se presenta en forma general un resumen acerca de qué es el Diseño e Ingeniería de procesos ubicando a la Simulación de procesos dentro de dicha disciplina. En éste capítulo además se habla de manera particular sobre la importancia y estrategias generales para la simulación de procesos químicos.

El capítulo dos consta de una breve explicación acerca de los sistemas de simulación existentes y sus enfoques, haciendo una descripción minuciosa del simulador de procesos ASPEN-PLUS.

El capítulos tres se dedicó por completo a hacer una descripción lo más detallada posible acerca del proceso de Reformación Catalítica de Naftas en donde se mencionan a grandes rasgos aspectos tales como principales tipos de reacciones que ocurren en el proceso, condiciones de operación de la planta, procesos existentes, etc.

En el capítulo cuatro se exponen los resultados obtenidos de la simulación de la planta Reformadora de Naftas, mostrándose unas tablas comparativas de los resultados de la simulación contra los obtenidos en planta.

En este capítulo se hace también una revisión de los métodos de convergencia usados a lo largo de la simulación del proceso, presentando al final unas gráficas de convergencia usando los diferentes métodos.

En el capítulo cinco se hace una revisión de conceptos acerca de la segunda ley de la Termodinámica, los cuales fueron usados para evaluar el trabajo perdido del proceso.

El sexto y último capítulo se destinó a presentar el análisis de resultados y conclusiones obtenidos del trabajo presentado.

Esta investigación pretende ofrecer un estudio de la operación de dicha planta con el fin de que en posteriores trabajos se hagan evaluaciones acerca de propuestas para optimizar el proceso haciéndose un mejor uso y ahorro de energía.

El planteamiento de mejoras en el proceso repercutirá en el ámbito ecológico, puesto que al tener procesos más eficientes, la calidad de los productos obtenidos mejorará, es decir, se producirán combustibles con mejores especificaciones minimizando a la vez el uso de energéticos.

GENERALIDADES

1.1 INGENIERIA DE PROCESOS

La Ingeniería de procesos surge a partir de la segunda mitad de este siglo como resultado de los nuevos procedimientos, técnicas y de la necesidad de reordenar la cantidad de información existente fijando las pautas para el diseño de procesos.

El nacimiento de la Ingeniería de procesos como una disciplina formal dentro de la Ingeniería química va de la mano con el desarrollo de nuevas metodologías

La Ingeniería de Procesos se define como la creación y cuantificación o análisis de diagramas de flujo de proceso que formarán parte de una operación fácil, económica y segura de la planta. Dicha disciplina, por tanto, exige la contribución de la ingeniería para el desarrollo, diseño y mejoramiento de procesos.

El desarrollo de procesos está orientado a la conceptualización del diseños de procesos enfocándose hacia un estudio de factibilidad del mismo. Por tanto, el desarrollo de un proyecto no solo implica reproducir resultados mediante programas de computadora, sino que debe de ser tratado como un sistema dinámico susceptible de ser mejorado y con capacidad para ampliar sus habilidades mediante la incorporación de técnicas innovadoras.

Hoy en día el significado de ingeniería de procesos ha crecido hasta el punto de considerarse la rama encargada de planear, diseñar, operar y controlar cualquier clase de operación unitaria o proceso químico.

1.2 DISEÑO DE PROCESOS.

El propósito de la ingeniería es crear nuevos materiales. Nosotros intentamos llevar a cabo esta meta en ingeniería química vía transformaciones químicas (o biológicas) y/o separación de materiales. El diseño de procesos y plantas es una actividad creativa por medio de la cual se generan ideas para entonces trasladarlas a los equipos y procesos para producir nuevos materiales o mejorar la calidad de las ya existentes.

Debemos de tratar de generar nuevas ideas para:

- Para convertir productos de desecho en materiales reciclables.
- Para crear materiales completamente nuevos como son fibras sintéticas, alimentos, etc.
- Para encontrar nuevas rutas químicas y producir materiales ya existentes.
- Para explotar nuevas tecnologías (ingeniería genética, sistemas expertos, etc.).
- Para explotar nuevos materiales de construcción (para altas temperaturas o presiones de operación elevadas, polimeros especiales, etc.).

Como un indicador del gran éxito que la ingeniería ha tenido, es de notarse que cerca del 50% de los productos vendidos por la mayoría de las compañías dedicadas al ramo de la química, han sido desarrollados durante las dos últimas décadas.

A pesar de este excelente record de éxitos, debemos notar que muy pocas ideas nuevas ya sea para el mejoramiento de procesos existentes o para el desarrollo de nuevos procesos nos conducen a nuevas riquezas. No es de sorprenderse que pocas ideas en el campo ingenieril demuestren ser siempre fructíferas teniendo los mismos patrones para cualquier tipo de actividad creativa.

Desde que la experiencia indica que solamente un pequeño número de ideas siempre tendrán un pago, vemos entonces que la evaluación es uno de los componentes más significativos de cualquier metodología de diseño. En realidad, la síntesis de procesos, la selección de equipo y sus interconexiones, son una combinación tanto de la actividad de síntesis como de análisis.

Tal vez la principal característica que distingue a un problema de diseño de otro tipo de problemas ingenieriles es que éstos son indefinidos, esto es, solo una pequeña fracción de la información requerida para definir un problema de diseño está disponible. Por ejemplo, un químico podría descubrir una reacción química novedosa para hacer un producto existente o un catalizador nuevo para una reacción también existente, si queremos trasladar estos descubrimientos a un proceso nuevo vemos que para comenzar solo contamos con la información que el químico obtuvo, además de la información disponible de las materias primas y productos.

Para suministrar la información faltante y poder definir el problema de diseño, tenemos que hacer suposiciones acerca de qué tipo de unidades de proceso deberíamos usar, cómo las podríamos interconectar así como qué temperatura, presión y flujo requeriremos, esta es por tanto la actividad de síntesis.

Esta actividad es sumamente difícil de realizar por la gran variedad de rutas químicas y de proceso que deben de considerarse para llevar a cabo la misma meta. De aquí que los problemas de diseño son considerados como problemas abiertos.

Normalmente queremos encontrar procesos alternativos que tengan el menor costo, garantizando que sean seguros y fácilmente operables. En algunos casos podemos recurrir a las reglas heurísticas para descartar ciertos procesos alternativos, pero en muchos casos es necesario hacer comparaciones en base a costos para obtener la mejor alternativa.

A continuación se definen los tres subsistemas que conforman al diseño de procesos.

SÍNTESIS DE PROCESOS.

A partir de una necesidad existente se conciben una serie de ideas que involucran la transformación de materias primas a través de una secuencia de operaciones que tienen como finalidad obtener los productos deseados.

En esta etapa el concepto del proceso es generado y la estructura del diagrama de flujo es elegida así como los equipos involucrados y sus interconexiones, por tanto, se considera que es una etapa inventiva, ya que son propuestos tanto la estructura del diagrama como los flujos de materia y energía.

Se distinguen dos etapas, la primera consiste en elegir la ruta química de proceso, referida a las transformaciones químicas necesarias para obtener los productos deseados; y la segunda considera el desarrollo de diagramas de flujo de proceso que incluyen la secuencia de las operaciones unitarias, recirculación de materias e integración de energía.

ANÁLISIS DE PROCESOS.

Una vez que el diagrama de flujo es sintetizado, se requiere hacer un análisis de viabilidad del proceso tanto económica como técnica. En esta etapa se determinan los valores de las variables de diseño así como los modelos matemáticos y propiedades termofísicas a ser usados en cada operación del proceso. Se establece además una estrategia de diseño la cual incluye la estimación de los valores de las variables de diseño independientes así como los métodos de cálculo y criterios de convergencia.

Una vez que se cubrieron estos puntos, el siguiente paso consiste en resolver los balances de materia y energía a través de la simulación para obtener información detallada de las corrientes de proceso así como las especificaciones de diseño de los equipos y requerimientos de los servicios auxiliares.

Reunida la información anterior se prosigue a hacer un estudio económico preliminar, para así poder confrontar el aspecto técnico como el económico considerando factores de eficiencia termodinámica, eficiencia de operación, riesgo de salud, seguridad y ambiente.

OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS

Esta etapa consiste en proponer alternativas de mejoramiento tanto en la estructura como en los parámetros del proceso para establecer una operación óptima y segura, a través del establecimiento de una función objetivo.

Al ser evaluados los datos de la etapa de análisis se observa que ciertas variables de operación como presión, temperatura, etc., influyen de manera substancial en el dimensionamiento del equipo, en su operación, etc.; por lo que la estructura propuesta en la etapa de síntesis se conserva, variando así solamente los valores de los parámetros de operación y diseño obteniendo así una optimización de parámetros.

Una optimización estructural implica la alteración en número y tipo de equipos, así como sus interconexiones teniendo como objetivo fundamental mejorar el proceso u obtener un arreglo menos costoso, teniendo una influencia directa en la etapa de síntesis y por consiguiente en la etapa de análisis.

1.3 SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

El modelado y simulación de procesos ha tenido gran éxito en la Ingeniería de procesos ya que se considera como una herramienta de gran utilidad para el diseño y optimización de procesos físicos, biológicos y químicos.

El uso de los simuladores de procesos se ha hecho cada vez más común, observándose un excesivo crecimiento en las dos últimas décadas ya que con ellos se obtienen mejores resultados en tiempos mínimos.

Debido al incremento en el uso de los simuladores de proceso, se ha desarrollado una gran competencia en este campo, por lo cual se requiere que el ingeniero desarrolle las siguientes habilidades:

- Debe de familiarizarse con sistemas físicos en orden de poder simular y evaluar inteligentemente procesos reales. El proceso no puede ser visto como una caja negra.
- Ser capaz de desarrollar relaciones que describan el comportamiento del proceso.
- Tener la capacidad de elegir las herramientas adecuadas para resolver problemas reales.

Los ingenieros descubrieron que ellos han sido capaces de hacer significantes contribuciones a la sociedad a través de acertadas simulaciones de sistemas biológicos y ambientales.

La simulación de procesos químicos ha investigado comportamientos tanto en estado estable como en el dinámico.

El gran impacto que la simulación ha tenido en la industria química es debido a los beneficios aportados entre los que se mencionan los siguientes:

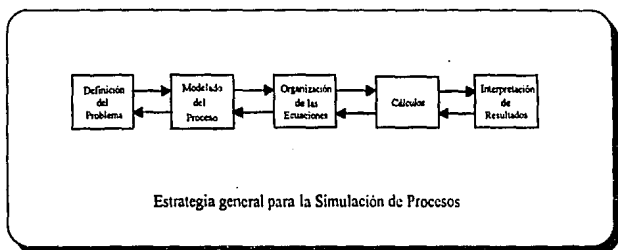
- Para propósitos de diseño, es usualmente mas barato usar técnicas de simulación incorporadas a datos de laboratorio como modelos matemáticos con los cuales se construyen diferentes tamaños en plantas pilotos.

- Representa un camino conveniente para investigar los efectos de los parámetros de sistemas y desordenes en la operación de procesos. Es usualmente fácil de desarrollar operaciones alternativas y evaluarlas mediante modelos matemáticos en lugar de usar métodos experimentales. Para verificar los resultados de la simulación algunos experimentos son ejecutados, pero solamente algunas son verdaderamente críticas.

- La simulación es un camino razonable para ejecutar extrapolaciones y escalamiento de procesos. Incorporando mecanismos fundamentales dentro de la simulación de procesos, los sistemas ejecutados pueden ser predecidos en condiciones de operación diferentes.

- Entendiendo el mecanismo y comportamiento de los procesos además de comprender los modelos matemáticos usados el ingeniero aprende mucho acerca del proceso que está simulando. En orden de obtener una simulación exitosa, el significado de los mecanismos del proceso deben de ser cuantitativamente descritos. Mediante la resolución de modelos, usualmente las relaciones entre las variables de proceso y de equipo pueden ser fácilmente observadas.

La estrategia general para la simulación de procesos complejos sigue un camino bien definido de pasos los cuales se representan en el siguiente diagrama.



Definición del problema.

Esta es una fase muy importante de la simulación, la cual es considerada de suma importancia, pero desafortunadamente hay muy pocas reglas precisas que se pueden aplicar.

La clave real para la definición del problema es un ingeniero imaginativo, por tanto, lo que se requiere es un pensamiento creativo basado sobre un buen entrenamiento de ingeniería.

El ingeniero tiene que dedicar el tiempo suficiente en este aspecto del problema. Una buena definición del problema se logra contestando preguntas tales como qué se busca, qué consecuencias importantes tiene ese estudio, por qué debería hacerse ese trabajo, etc.

Modelado del proceso.

Ahora el ingeniero está listo para escribir ecuaciones de balance apropiadas para el proceso. Experimentos en laboratorio deben ser diseñados y ejecutados para determinar mecanismos y parámetros desconocidos. En esta etapa se decide que efectos son importantes y cuales pueden ser ignorados. El orden de magnitud del análisis ayuda a hacer buenas

simplificaciones. Por tanto, es imperativo que el ingeniero esté consciente y no pase por alto las suposiciones hechas a lo largo del desarrollo matemático del modelo.

Organización de las Ecuaciones.

Una vez que las ecuaciones matemáticas han sido reunidas, tienen que ser arregladas en una estrategia de solución, esto es, se decidirá que variables van a ser resueltas en cada ecuación. Para problemas pequeños, usualmente se ejecutan estas rutinas sin problema. Sin embargo, para problemas grandes se debe tener cuidado por lo que se recomienda arreglar a las ecuaciones en un diagrama de flujo. Estos diagramas son usados con propósitos organizacionales siendo la estrategia de solución paralela a la lógica de causa y efecto. Este orden natural nos conduce a estrategias de solución estables y eficientes.

Cálculos.

Para obtener soluciones a los problemas de simulación de procesos, el ingeniero tiene disponible varios niveles de cómputo.

La complejidad y no linealidad de los problemas de simulación requieren soluciones basadas en el uso de un sistema de cómputo. Estos sistemas son particularmente usados para resolver problemas que involucran manipulaciones numéricas.

El lenguaje Fortran ha sido diseñado para ser usado primordialmente por personas dedicadas a áreas científicas, teniendo este lenguaje excelentes capacidades lógicas y programándose en él fácilmente rutinas de métodos numéricos, los cuales son necesarios en la resolución de ecuaciones algebraicas, diferenciales ordinarias y diferenciales parciales.

Interpretación de resultados.

El principal beneficio que se obtiene de simular un proceso químico, está en la interpretación inteligente de los resultados hecha por el ingeniero, en este punto, el ingeniero debe de averiguar si el modelo realmente representa al proceso o si éste necesita actualizarse y revisarse, teniendo la seguridad que los resultados son razonables.

Limitaciones de la simulación de procesos.

Existen ciertas limitaciones en la simulación de procesos, las cuales deben de ser de conocimiento del ingeniero, enlistandose a continuación las principales:

- La carencia de datos y conocimiento de los mecanismos del proceso. El éxito de la simulación de procesos depende en gran medida de la información que esté disponible al ingeniero.

- Las características de las herramientas en computación. Existen cierto tipo de ecuaciones que todavía son difíciles de resolver, estas incluyen algunas ecuaciones algebraicas no lineales así como algunas ecuaciones diferenciales parciales.

- El peligro de olvidar las suposiciones hechas durante el modelado de procesos.

Utilidad de la simulación de procesos.

La simulación computarizada está jugando un papel muy importante en la solución de procesos químicos, biológicos, energéticos y ambientales.

SIMULADORES

DE

PROCESO

2.1 GENERALIDADES SOBRE LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN

A principios de 1950 las principales compañías dedicadas a los procesos químicos tuvieron la preocupación de aplicar todos sus conocimientos para desarrollar sistemas expertos en el campo de la ingeniería de procesos.

Inicialmente estos sistemas computacionales eran operados en las corporaciones donde fueron desarrollados así como en las principales compañías ingenieriles. Más tarde el uso de estos sistemas se empezó a extender a otros sectores de la industria, siendo ahora normal el uso de softwares en cualquier compañía.

Hoy en día los softwares están disponibles para ayudar a los ingenieros de procesos en las siguientes áreas:

- Datos de propiedades físicas.
- Simulación de procesos.
- Tecnología pinch.
- Diseño de equipo.

El uso extenso de estos programas varía enormemente. En algunas industrias como en las refinerías, estos programas forman una parte esencial de las herramientas del ingeniero; mientras que en otros sectores como en la industria minera y procesamiento de alimentos su uso es restringido.

Información de propiedades físicas.

Es importante conocer datos acerca de las propiedades físicas de las sustancias porque esta información establece qué puede ser alcanzado en el proceso por ejemplo, si una mezcla particular puede ser separada por medio de una destilación.

Estos datos pueden ser también críticos en la determinación de un diseño particular de un equipo, por ejemplo la elección del compresor apropiado varía dependiendo de las propiedades del gas que se le alimenta.

Desafortunadamente la información acerca de las propiedades físicas representan no solo una área fundamentalmente importante sino también una parte complicada y difícil.

Los procesos químicos involucran mezclas complejas no ideales (como por ejemplo el crudo) las cuales operan en un amplio rango de presión y temperatura. Esto implica que un ingeniero de procesos no puede mejorar simplemente los datos de interés de una tabla.

Enormes esfuerzos de investigación han resultado en el desarrollo de métodos para predecir las propiedades de varios tipos de mezclas; estos métodos, junto con bancos de datos asociados de parámetros básicos acerca de componentes individuales han sido compilados dentro de un sistema de datos de propiedades físicas.

La gran mayoría de bases de datos de propiedades físicas han sido creadas debido al uso que tienen en los programas de simulación. Estos programas hacen muy pesada la demanda en datos termodinámicos (tales como equilibrio vapor/líquido y entalpías) y también en propiedades de transporte (como densidad, viscosidad, y conductividad).

Los simuladores de proceso típicamente gastan más del 80% de tiempo requerido en la simulación de un equipo en el cálculo de propiedades físicas. Dichos simuladores ofrecen muchas ventajas para el cálculo de propiedades termodinámicas, ayudando significativamente a los ingenieros de procesos.

Simulación de procesos.

El propósito de la simulación de un proceso es permitir al ingeniero modelar el comportamiento en estado estable de la planta o parte de ella, bajo condiciones definidas llevando a cabo así el balance de materia y energía para el proceso. Para ello se requiere resolver un gran número de ecuaciones no lineales que representan a los equipos así como el comportamiento de los componentes químicos.

Los resultados básicos consisten de tablas que contienen la composición y propiedades de todas las corrientes de proceso, más una pequeña cantidad de información acerca de la operación de cada unidad o equipo de proceso.

El surgimiento de los simuladores de procesos se debió a la temprana aplicación de las computadoras para solucionar problemas en ingeniería química. Los primeros programas modelaban equipos individuales; por los años 60 muchas compañías habían construido programas capaces de resolver los enormes sistemas de ecuaciones resultantes de la simulación del comportamiento de los equipos. Fue evidente que si estos programas se incorporaban dentro de sistemas que pudieran resolver la gran cantidad de ecuaciones resultantes de una planta completa, entonces se podrían hacer ahorros tanto en dinero como en tiempo.

El resultado de ésta evolución se ha observado en muchos programas hechos para la simulación de procesos que emplean el enfoque modular secuencial. La filosofía básica de este enfoque es simple, las unidades de operación o equipos son representados mediante módulos, el programa ejecutivo llama a cada módulo en turno, usando los datos de las corrientes de salida de la unidad anterior como datos de entrada de la siguiente unidad, los módulos son resueltos en la misma secuencia en la que fueron suministrados según el diagrama de flujo.

Las ventajas de este enfoque son su básica simplicidad y resultados robustos, esfuerzos considerables pueden ser dedicados independientemente para cada una de las tres áreas.

Consecuentemente el programa ejecutivo puede ser desarrollado para suministrar un medio de definición de problemas y para acelerar la convergencia en los cálculos de recirculaciones. Este enfoque modular secuencial es una herramienta efectiva y confiable para simulaciones en estado estable, aunque presenta ciertas desventajas cuando se quieren hacer simulaciones dinámicas y además cuando el ingeniero desea modelar la planta en el modo de diseño ya que requiere usar bloques de control para manipular parámetros durante el cálculo, agregando así otro nivel en las iteraciones.

El ASPEN PLUS de Aspen Technology, DESIGN II de ChemShare y CHEMCAD de Chemstation emplean el enfoque modular secuencial.

Debido a éstas y otras razones el desarrollo de sistemas modulares secuenciales a sido paralelo a un enfoque alternativo basado en la solución de los sistemas de ecuaciones que representan al proceso. En este enfoque, el requerimiento para resolver cada unidad de

operación o módulo en turno es eliminado. En su lugar, todas las ecuaciones no lineales que representan cada bloque y las conexiones entre ellos son resueltos simultáneamente. Siempre que exista un balance entre el número de ecuaciones y el número de incógnitas será posible resolver el problema formulado.

Sin embargo, si se agregan métodos para resolver ecuaciones diferenciales, este enfoque se presta para simulaciones dinámicas. Este enfoque por tanto es más flexible, presenta como ventajas la habilidad de emprender diseño o estudios dinámicos, siendo además más rápido y fácil de desarrollar nuevos modelos con propósitos especiales porque no hay la necesidad de crear algoritmos asociados para resolverlos.

Por estas razones, la mayoría de los desarrollos se han enfocado en los sistemas modulares secuenciales.

Durante los últimos años con el desarrollo de nuevas técnicas y métodos matemáticos además de la disponibilidad de computadoras más poderosas el enfoque hacia las ecuaciones ha tenido un amplio desarrollo comercial.

Aplicaciones.

Simulaciones en estado estable.

Hasta la fecha la mayoría de las aplicaciones de los simuladores se encuentra en la determinación del funcionamiento de las plantas en estado estable. Originalmente los simuladores tenían un propósito de diseño, pero estos sistemas encontraron amplias aplicaciones para estudios operacionales de las plantas.

El alcance de las aplicaciones de estos sistemas se determina por el contenido de los modelos y la aplicabilidad de los sistemas de propiedades físicas.

Las capacidades de los algoritmos de destilación son de gran interés para muchos ingenieros, los cuales son el resultado de años de investigación y desarrollo. Las principales aplicaciones se encuentran en las áreas de refinación además de tener gran aplicación en la industria de los petroquímicos, químicos y criogénica.

Los modelos manejados por los simuladores se basan en principios teóricos, existe una clase de simuladores, sin embargo donde los modelos son de naturaleza predominantemente empírica. En estos casos, los modelos son derivados de la observación de el comportamiento de ciertas unidades; tales simuladores son ocupados principalmente en estudios de procesos específicos, especialmente en la industria de la refinación.

Optimización.

En los últimos 25 años los simuladores han llegado a ser más sofisticados debido a la gran demanda existente. Muchos de los sistemas modulares secuenciales ahora tienen la capacidad de ofrecer este tipo de tecnologías que todavía está en desarrollo. En adición los nuevos sistemas con enfoque hacia las ecuaciones ofrecen mayor flexibilidad y rapidez para estos propósitos. La optimización puede ser aplicada tanto a la etapa de diseño como a la de operación.

Simulación dinámica.

Aunque los simuladores en estado estable han sido ampliamente desarrollados, sin embargo se pueden obtener grandes beneficios de las simulaciones dinámicas. Sus aplicaciones son extensas e incluyen:

- Análisis de arranque y paro.
- Estudios de riesgos y seguridad.
- Diseño de sistemas de alivio.
- Análisis de sistemas de control y
- Entrenamiento de operadores obteniéndose como beneficio:
 - Mejores diseños, plantas seguras
 - Mejoramiento en la operación y control.

Tecnología Pinch.

De los programas recientemente desarrollados en Ingeniería de Procesos que ha tenido gran impacto es el referente al mejoramiento de la eficiencia térmica de los procesos, conocido como tecnología pinch, el cual tiene como objetivo minimizar el gasto de energía a base de optimizar el intercambio de energía entre las corrientes de procesos.

Diseño de equipo.

Tiene gran aplicabilidad en los simuladores de procesos para determinar como deberían de ser configurados los proceso y cómo deberían operar estos, los procesos necesitan del detalles de los equipos para verificar los esquemas más que de detalles de modelado.

El simulador por sí mismo es prometedor para emprender modelados rigurosos de torres de destilación. Para estos detalles, se requieren cálculos adicionales para que las dimensiones finales puedan ser determinadas. Las unidades más comunes de equipos de proceso sin embargo son los intercambiadores de calor. Para estos, una gran catidad de análisis rigurosos de las operaciones son requeridos.

Para el diseño de otros equipos, la profundidad de análisis para la ingeniería de procesos es más limitada, ésta necesidad es normalmente encontrada por bibliotecas de pequeños programas desarrolladas por las compañías. Una excepción a esta regla es el caso de los reactores, donde muchas firmas de ingeniería han desarrollado complejos programas especiales.

2.2 ENFOQUE DE LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN

La orientación de un sistema de simulación se refiere a la forma de manejar y resolver los sistemas de ecuaciones que conforman a un proceso, ya que el número y tipo de ecuaciones son básicamente las mismas en cualquier orientación.

Debido a que las dimensiones de estos sistemas de ecuaciones pueden variar desde unos cientos hasta más de cien mil las técnicas convencionales de solución ya no son aplicables a estos sistemas. Es por esto que se ha impulsado el desarrollo de técnicas de solución de matrices dispersas, mediante las cuales, se pueden solucionar estos sistemas de ecuaciones.

Las diferentes orientaciones surgen de las diversas formas de explotar la estructura de los sistemas para resolver los problemas de simulación y diseño de procesos.

Existen principalmente dos orientaciones, las cuales a su vez se subdividen dos enfoques cada uno:

- Orientación modular:
 - * Modular secuencial
 - * Modular simultáneo
- Orientación basada en las ecuaciones:
 - * Con rompimiento
 - * Con linealización simultánea

ORIENTACIÓN MODULAR.

Por medio de la unión de un conjunto de módulos que describan individualmente una operación unitaria se puede representar un proceso químico.

Este proceso puede describirse por medio de una serie de ecuaciones no lineales cuyos cálculos son comprendidos tanto a nivel de diagrama del flujo como a nivel de cada módulo.

A partir de los valores conocidos de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los equipos pueden resolverse las ecuaciones de cada módulo con el objeto de calcular los valores de las variables de las corrientes de salida de éstos, mientras que a nivel de diagrama de flujo las ecuaciones que describen la conexión entre cada módulo así como las especificaciones de diseño deben ser resueltas.

Este modelo es visualizado fácilmente debido a su gran similitud con el diagrama de flujo de proceso.

Para resolver las ecuaciones de cada módulo se pueden utilizar más de un algoritmo, además de que cada módulo puede generar sus propios valores iniciales.

Los módulos se pueden incorporar con facilidad al sistema ya que cada uno representa una operación unitaria.

Este enfoque tiene la desventaja que, debido a los múltiples ciclos que presenta así como al tamaño de las matrices de proceso la convergencia es sumamente lenta, además de presentar ciertos problemas con el flujo de información.

Orientación Modular Secuencial.

El enfoque modular consta de un conjunto de ecuaciones y constantes para cada unidad de proceso dentro de subrutinas separadas, calculando valores para las corrientes de salida.

La parte secuencial del enfoque lleva a cabo cálculos de módulo a módulo comenzando con la corriente de alimentación hasta obtener los productos, siendo necesario identificar

previamente los ciclos de recirculación del proceso para poder asignar valores a las corrientes de corte para que a partir de procedimientos iterativos se llegue a la convergencia de las corrientes de recirculación con las demás corrientes del módulo unitario.

Se dice que es secuencial porque los módulos son resueltos en la misma secuencia en la que aparecen el diagrama de flujo, lo que implica una fuerte dependencia con la topología.

Las ecuaciones de conexión entre los módulos son manejados en forma implícita, el programa ejecutivo transfiere los valores de salida de un módulo unitario a otro como si fueran valores de entrada de acuerdo al diagrama. Las especificaciones que afecten directamente a las variables de las corrientes de salida como son las de diseño no se pueden introducir directamente al sistema ya que se requiere del uso de ciclos de control, en tanto que las especificaciones simples si son fácilmente incorporadas a dichos sistemas.

Un problema de diseño se resuelve de manera iterativa haciendo converger las variables de proceso hasta que se satisfagan las especificaciones de diseño a base de ciclos iterativos de control, lo que implica que una especificación de diseño es tratada como una recirculación adicional.

La incorporación de módulos nuevos o más complejos se lleva a cabo fácilmente sin necesidad de cambiar la estrategia de solución del proceso. Sin embargo, cuando un sistema cuenta con una gran cantidad de módulos además de corrientes de conexión y de corte, el sistema se vuelve ineficiente debido a la presencia de ciclos múltiples.

Un simulador modular secuencial llega a la convergencia de sus ciclos a través de suposiciones en los valores de las corrientes de recirculación (corrientes de corte), iterando a

base de métodos de convergencia adecuados hasta que los valores supuestos sean iguales a los calculados, dentro de una cierta tolerancia. Cada iteración implica el cálculos secuencial de cada uno de los módulos involucrados en el ciclo.

Cuando existen múltiples corrientes de corte, cada una se hace converger en forma separada.

Existe una estructura jerárquica para la resolución de ciclos anidados la cual tiene una seria repercusión en la eficiencia numérica del sistema. Los ciclos mediante los cuales se logra la convergencia de las especificaciones de diseño (ciclos de control) se localizan en la parte más externa, dentro de éstos, se encuentran los ciclos necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de corte, a su vez dentro de ellos se localizan los ciclos propios de cada operación unitaria y por último se encuentran los ciclos que estiman las propiedades termofísicas.

A pesar de no ser tan eficientes en sistemas que contienen múltiples corrientes de recirculación, este enfoque es el que más se utiliza en procesos comerciales.

Un programa con estructura secuencial modular cuenta con los siguientes componentes estructurales:

- Un almacén de propiedades físicas y termodinámicas de componentes puros y sus mezclas.

- Un sistema de trabajo que maneja bases de datos derivados de los datos obtenidos del almacenamiento así como de los datos de entrada del problema.

- Un módulo individual de base de datos derivado de la base de datos de trabajo.

- Módulos o subrutinas para unidades de proceso individuales, procedimientos de cálculo incluyendo entradas y salidas para cada módulo, así como variables iterativas internas, si las hay.

- La topología del diagrama a ser usado por el sistema ejecutivo para ordenar la secuencia de cálculo. Esto es usualmente definido por una matriz de proceso, la cual especifica módulos unitarios estándares para usarse a lo largo de una simulación de un proceso particular con números de identificación, positivos para las corrientes de entrada y negativas para las corrientes de salida.

- Rutinas para cálculos de recirculación y análisis de convergencia

- Otras rutinas matemáticas.

Enfoque modular simultáneo.

La estructura modular es conservada pero las ecuaciones de las corrientes de conexión y las especificaciones de diseño se hacen converger simultáneamente.

La principal diferencia es que para cada unidad un módulo adicional es escrito, el cual relaciona cada valor de salida mediante una combinación lineal de todos los valores de entrada.

En este enfoque se manejan dos diferentes modelos, el riguroso se refieren a los modelos que describen las operaciones unitarias los cuales son usados para determinar los parámetros de los modelos simples.

Los modelos simples pueden ser de dos tipos, los lineales cuyos coeficientes pueden ser determinados mediante la perturbación numérica de los modelos rigurosos, y los no lineales usualmente representados por modelos aproximados de ingeniería.

Estos modelos simples requieren una cantidad mucho menor de recursos computacionales. Para llegar a la solución genera un sistema de ecuaciones de simulación de menor extensión en contenidos de variables internas así como de correlaciones para propiedades termofísicas.

La convergencia de las variables de proceso se lleva a cabo resolviendo los modelos simples para obtener así valores de las variables de las corrientes de salida aproximados dentro de un límite de tolerancia, cuando no se alcanza esta tolerancia, se pueden modificar los valores de los parámetros de los modelos simples o mediante la obtención de valores más precisos en los modelos rigurosos.

Con este enfoque se elimina un ciclo iterativo, debido a que las especificaciones de diseño pueden manejarse directamente a nivel de proceso. Usa además modelos simplificados para realizar un análisis preliminar procediendo así a verificar el modelo simple en base a los modelos rigurosos.

Es requerido en este enfoque procedimientos con excelentes propiedades de convergencia.

Un problema adicional que presenta se asocia al cálculo del jacobiano aproximado ya que éste requiere de un número mayor de recursos computacionales y tiempo.

ORIENTACIÓN HACIA LAS ECUACIONES.

Esta orientación se basa en el modelado de un proceso químico mediante la unión de todas las ecuaciones tanto de las operaciones unitarias, corrientes de conexión, así como de las especificaciones de diseño que lo describen. Dichas ecuaciones son resueltas simultáneamente como un gran sistema de ecuaciones no lineales, requiriéndose entonces procedimientos que generen y representen las ecuaciones que describen el proceso completo.

En general, la simulación de un proceso en estado estable requiere la solución de ecuaciones simultáneas no lineales expresadas en la siguiente forma:

$$f(x, u) = 0$$

en donde x es un vector de n variables de estado dependientes que incluyen todos los parámetros de equipo y las variables de las corrientes de entrada para cada operación unitaria y u representa a un vector de variables de decisión independientes que involucran a todas las variables internas así como a las corrientes de salida.

Un problema de simulación y diseño en un simulador orientado hacia las ecuaciones se puede formular como un problema de optimización.

Esta orientación presenta mayor flexibilidad en cuanto a que especificaciones diferentes generan diferentes sistemas de ecuaciones no lineales que son potencialmente más susceptibles de ser eficientemente resueltos evitando los ciclos iterativos anidados. A causa de la inexistencia de módulos, la información se maneja únicamente a nivel de proceso en forma de ecuaciones y variables, es por esto que no se presentan problemas de flujo de información entre unidades.

Debido a la rigidez de esta orientación en cuanto a la anticipada elección de los sistemas de ecuaciones a ser resueltas es común la aparición de inconsistencias termodinámicas, lo cual nos puede llevar a obtener resultados físicamente inexistentes o imposibles de ser solucionados. Requiere además valores iniciales razonables para operar eficientemente, los cuales solo pueden ser obtenidos a través de un recorrido secuencial del proceso. Al existir un error en la operación, no se pueden extraer resultados parciales siendo complicado diagnosticar la falla.

Enfoque basado en las ecuaciones con rompimiento.

En este enfoque se necesitan suponer valores iniciales para un determinado número de variables con el fin de poder calcular las variables restantes a través de la solución de las ecuaciones, mediante procedimientos de sustituciones sucesivas. Las variables supuestas deben estar en forma explícita, de lo contrario, los residuales de las ecuaciones que contienen las

variables supuestas pueden ser usados para aplicar algún otro procedimiento de evaluación de raíces.

La mejor estrategia de solución en este enfoque consiste en elegir modelos eficientes que permitan a las variables supuestas converger rápidamente, indicando que variables tienen valores supuestos y cuales son variables de diseño, con que ecuación se resuelven cuales variables así como en que secuencia.

Otra estrategia consiste en proponer el menor número de variables supuestas a fin de reducir el tamaño del subsistema, lo cual nos conduce a tener un mínimo número de variables que requieran iteración.

La ventaja que ofrece este enfoque es que un sistema de tipo ecuación-variable suficientemente grande puede ser reducido a un sistema menor del tipo ecuación-supuesta-variable supuesta la cual es más sencilla de resolverse simultáneamente.

Debido a que todavía no se ha formulado una estrategia de solución confiable, este enfoque no ha sido utilizado ampliamente puesto que presenta problemas de eficiencia, a pesar de poder abordar problemas de diseño y simulación más complejos y con mayor rapidez.

Enfoque basado en las ecuaciones con linealización simultánea.

Este enfoque implica la linealización simultánea de todas las ecuaciones y la iteración sobre todas las variables, a través de métodos del tipo Newton-Raphson, quasi-Newton o una combinación de ambos. Dicho enfoque no presenta problemas en la resolución de ciclos anidados debido a que resuelve todas las variables iterandolas simultáneamente. Además las ecuaciones se pueden resolver en cualquier orden pudiendo aplicarse técnicas de convergencia de primer orden que son altamente precisas pero lentas.

Se pueden implementar en este enfoque estructuras de recirculación muy complejas y resolviéndose adecuadamente los problema de diseño.

Dicho enfoque no se ha utilizado ampliamente debido a que el requerimiento computacional que necesita es muy alto, puesto que tiene que resolver grandes sistemas de ecuaciones que genera para solucionar los problemas de simulación y de diseño.

Además, debido a que las dimensiones de las matrices dispersa son muy grandes los métodos de solución que existen aún no son eficientes, generando en algunas ocasiones resultados correctos matemáticamente aunque físicamente inexistentes.

2.3 MÉTODOS DE CONVERGENCIA

La convergencia de un balance de materia y energía puede ser promovida por diferentes métodos. En tal promoción o aceleración, se desea encontrar un vector tal con el que podamos comenzar los cálculos para obtener otro vector con los resultados.

Tal problema puede ser formalmente referido a encontrar la solución de $x = g(x)$ donde x representa al vector de variables supuestas y g es el algoritmo de cálculo que cuando se lo aplicamos a x se produce un vector generalmente diferente de x , a menos que la solución haya sido obtenida. De aquí que el problema puede ser expresado en la siguiente forma,

$$f(x) = x - g(x) \quad (a)$$

donde f , g y x , todos son $n \times 1$ vectores. Los siguientes métodos promueven la convergencia de $f(x) = 0$.

MÉTODO DE SUSTITUCIÓN DIRECTA

Este método es considerado como uno de los más simples, el jacobiano es aproximado por medio de la matriz de identidad,

$$x^{i+1} = G(x^i)$$

Debido a su simplicidad y pocos requerimientos de almacenaje, éste es uno de los métodos más ampliamente utilizado. Sin embargo, su convergencia puede ser muy lenta, a menos que el jacobiano sea muy parecido a la matriz de identidad.

MÉTODO DE WEGSTEIN

En el método propuesto por Wegstein (1958), el jacobiano es aproximado por una matriz diagonal cuyos elementos son,

$$\frac{x_j^i - x_j^{i-1}}{f^i - f^{i-1}} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

La fórmula iterativa de esta manera se convierte en

$$x_j^{i+1} = x_j^i - \frac{x_j^i - x_j^{i-1}}{f_j^i - f_j^{i-1}} f_j^i$$

En otras palabras, el paso secante es tomado para cada variable separadamente. De esta manera, el método ignora la interacción entre variables, los cambios hechos en cada componente de x no toman dentro de esta cuenta hecha en los otros componentes.

Esto puede resultar algunas veces dentro de oscilaciones en los procedimientos iterativos o causar divergencias en lugar de convergencias.

MÉTODOS QUASI-NEWTON

La fórmula de iteración in este caso es

$$x^{i+1} = x^i - H^i f^i$$

donde H^i es la matriz aproximada a la inversa del jacobiano, la cual es actualizada en cada iteración como sigue:

$$H^{i+1} = H^i - (H^i y^i - q^i) \frac{p^i}{p^i y^i}$$

donde

$$q^i = x^{i+1} - x^i$$

$$p^i = f^{i+1} - f^i$$

El vector p^i es escogido arbitrariamente, la velocidad de convergencia por si misma del estimado inicial de H^0 .

Broyden hizo la siguiente elección para p^i con $H^0 = J^0$

$$p^i = H^{i-1 T} q^i$$

2.4 SIMULADOR DE PROCESOS ASPEN-PLUS

Todos los simuladores de procesos estan provistos de modelos de propiedades físicas y fenómenos químicos así como de equipos de proceso. La riqueza de un simulador es el resultado de la variedad de modelos con respecto a su naturaleza y a los múltiples niveles de exactitud disponibles. Los métodos rápidos o Shortcut proveen de respuestas rápidas en tiempos muy cortos usando pocos recursos computacionales, comprometiendo la exactitud de los modelos comparada con la del proceso real.

La exactitud de un simulador de procesos depende de la exactitud de cada modelo individual así como de los algoritmos. Los modelos individuales no necesitan ser tan exactos para producir resultados idénticos a los de planta, debido a que los modelos estan siendo continuamente actualizados y mejorados.

El simulador de procesos ASPEN PLUS (Advanced System for Process Engineering) es una herramienta usada por los ingenieros para modelar cualquier tipo de procesos químicos en los cuales exista un flujo continuo de materia y energía de una unidad a otra.

Este paquete está diseñado para manejar procesos que involucran a sólidos en adición a procesos convencionales que manejan operaciones líquido-vapor.

Se pueden representar corrientes con multifase y sustancias complejas como el carbón el cual no está descrito como un componente convencional o pseudocomponente.

El sistema ejecutivo del Aspen es un tipo de preprocesador.

El traductor de entradas lee el programa creado por el usuario, generando entonces un programa principal en Fortran.

El programa ejecutivo establece la estructura de datos y genera una secuencia de cómputo para los módulos o equipos. El módulo de carga creado hasta ahora es un programa de simulación hecho a la medida del problema en estudio.

Siendo el Aspen un programa modular secuencial permite estructuras largas, un gran número de módulos para ser ejecutados e inserción de nuevas líneas en fortran requiriendo una mínima cantidad de memoria para simular.

El lenguaje de entrada del Aspen está orientado para que el usuario familiarizado con cálculos de ingeniería química lo manipule aunque no posea un conocimiento extensivo del programación de computadoras.

El traductor de entrada es manejado completamente por medio de tablas, lo que implica que toda la información requerida para declarar el proceso, tales como claves, valores por default, etc son almacenados en tablas llamadas Archivos de definición del sistema.

La información de entrada que se requiere suministrar consiste en definir a las corrientes de alimentación (flujo, composición, temperatura y presión), la secuencia y condiciones de proceso, etc., esto es, la información proporcionada en el diagrama de flujo del proceso. Los resultados obtenidos constan de una representación completa del funcionamiento de la planta.

Un simulador de procesos es un herramienta vital en el diseño de procesos, puesto que con él es posible diseñar procesos sumamente complicados en poco tiempo.

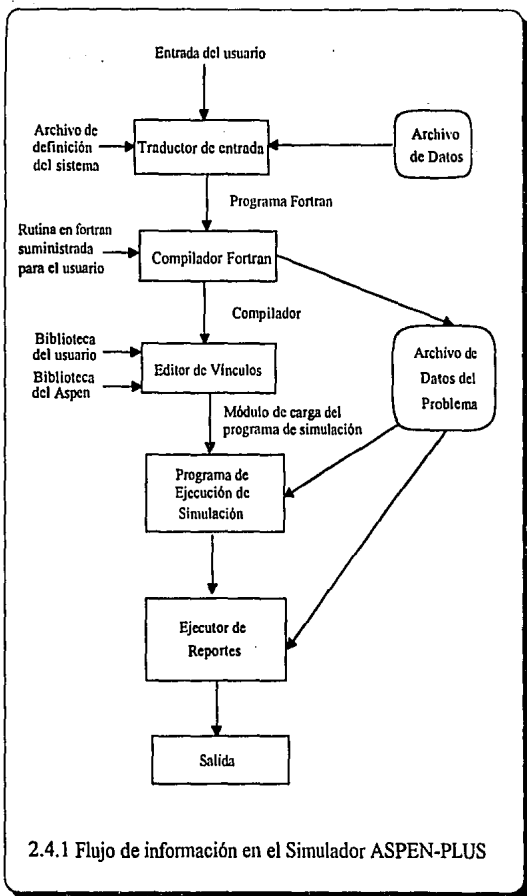
No sólo es posible diseñar procesos en este simulador, sino que se puede hacer optimizaciones a procesos existentes ya sea mejorando el rendimiento y/o reduciendo el uso de

energía a través de modificaciones en las condiciones de operación o cambios en las especificaciones de los productos de salida.

Los pasos involucrados en el modelado de procesos son los siguientes:

- Definir el diagrama de flujo de proceso a ser modelado.
- Seleccionar las unidades de medición de entrada y de salida de datos.
- Especificar los componentes químicos involucrados a lo largo de todo el proceso.
- Especificar los métodos y modelos a ser usados para el cálculo de propiedades físicas.
- Romper el proceso en unidades de operación y escoger modelos apropiados a cada bloque (definir el diagrama de flujo).
- Definir la corriente de alimentación al proceso.
- Especificar las condiciones de operación de cada bloque.
- Se pueden imponer especificaciones de diseño, análisis de sensibilidad o casos de estudio.

El diagrama 2.4.1 nos muestra cómo se lleva a cabo el flujo de información en el simulador de procesos ASPEN-PLUS.



Lenguaje de entrada.

El lenguaje de entrada del ASPEN PLUS consiste de párrafos, oraciones y datos individuales de entrada. Existen tres niveles jerárquicos para cada clave primaria, secundaria o terciaria.

Cada párrafo comienza con una clave primaria, así como cada oración comienza con una clave secundaria, las claves terciarias se usan para dar entrada a datos.

Un párrafo se define como un grupo lógico que contiene datos de entrada los cuales describen a una corriente o a un bloque de operación, todos los párrafos comienzan con una clave primaria la cual va pegada al margen izquierdo.

Una oración se compone de string comenzando con una clave secundaria. Las claves terciarias son usadas para dar entrada a sentencias de datos.

Unidades.

El Aspen Plus tiene disponibles los sistemas de medición inglés, internacional y el métrico.

Modelos de propiedades físicas.

En Aspen Plus los métodos y modelos usados para calcular las propiedades termodinámicas y de transporte están almacenadas en un módulo llamado option set. Cada opción contiene todos los métodos y modelos necesarios para una simulación. Las propiedades usadas en una simulación típica son coeficientes de fugacidad, entalpías, densidades, entropías, y energías

libres Las propiedades de transporte se calculan solamente cuando se requieren en la simulación.

Para la solución de los modelos el simulador cuenta con 4 diferentes bancos de datos, los cuales contienen diversos datos para más de 1500 compuestos químicos; en el caso de no disponer de un cierto parámetro, éste puede ser suministrado directamente.

El módulo Option Set tiene disponibles 44 opciones provistas de gran flexibilidad para manipularse en un amplio rango de condiciones de operación y tipos de mezclas.

A continuación se presenta el diagrama 2.4.2 en donde se muestran los modelos de cálculo de propiedades disponibles en el simulador ASPEN-PLUS.

2.4.2 MODELOS DE PROPIEDADES FISICAS EN ASPEN PLUS

ECUACIONES DE ESTADO

- Redlich-Kwong
- Redlich-Kwong-Soave
- Redlich-Kwong-ASPEN
- Peng-Robinson
- Cadena Dura Perturbada (polar)
- Cadena Dura Perturbada (no polar)
- Peng-Robinson (agua/hidrocarburo)
- Lee-Kesler
- BWR
- Hayden-O'Connell
- Nothnagel
- Tablas de vapor ASME, 1967

COEFICIENTES DE FUGACIDAD

- Grayson-Streed
- Chao-Seader
- Chao-Seader/Prausnitz-Shair

COEFICIENTES DE ACTIVIDAD

- Scatchard-Hildebrand extendido
- Ecuación de Wilson
- Ecuación de Van Laar
- Ecuación NRTL
- UNIQUAC
- UNIFAC
- Electrolito de Composición Global

VOLUMEN MOLAR

- Líquido saturado Cavett
- Líquido saturado Rackett
- Líquido comprimido Chueh-Prausnitz
- Liq. molar parcial Breivi-O'Connell
- Sólido polinomial
- Vol. electrolitos Debye-Huckel
- Polinomial modificado

ENTALPIA/E. LIBRE/ENTROPIA

- Líquido y vapor Yen-Alexander
- Líquido saturado Cavett
- Sólido polinomial
- Ec. de Watson modificada
- Fusión sólida polinomial
- Sublimación sólida polinomial
- Sublimación sólida generalizada
- Polinomial modificada
- Entalpia de electrolitos Criss-Cobble

PRESION DE VAPOR

- Presión líquido-vapor de Antoine
- Presión líquido-vapor de Cavett
- Presión sólido vapor de Antoine
- Polinomial modificada

RELACION DE EQUILIBRIO LIQ-VAP

- Datos de entrada
- Polinomial modificada

DENSIDAD DE SOLIDOS COMPLEJOS

- Modelo de sólidos secos IGT
- Modelo de densidad generalizada

ENTALPIA DE SOLIDOS COMPLEJOS

- Correlación de Boie
- Correlación de Dulong
- Corr. de Grummel y Davis
- Corr. del calor de combustión
- Corr. de Chang-Jirapongphan-Boston
- Correlación de Kiruv
- Ecuación cúbica de temperatura
- Modelo generalizado de entalpia

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

- Presión de vapor baja WMS
- Presión de vapor alta de Stiel-Thodos
- Líquido de Sato-Reidel
- Sólidos polinomial

TENSION SUPERFICIAL

- Hakin-Steinberg-Stiel (líquido puro)
- Hakin-Steinberg-Stiel (mezcla líquida)

VISCOSIDAD

- Chapman-Enskog-Brokaw
- Dean-Stiel
- Líquido modificado de Andrade
- Latsou-Stiel (líquido)

COEFICIENTES DE DIFUSIÓN

- Chapman-Enskog/Wilke-Lee
- Dawson-Khoury-Kobayashi
- Wilke-Chang

Modelos de operaciones unitarias.

El simulador de procesos ASPEN-PLUS cuenta con una amplia variedad de modelos generalizados para simular cualquier proceso químico, incluyendo procesos que manejen sólidos, electrolitos, sustancias complejas, etc. En cada modelo se encuentran contenidas todas las ecuaciones necesarias para resolver cada operación unitaria, además estos modelos pueden manejar cualquier número de componentes, reacciones, etapas y alimentaciones.

Mediante el uso de subrutinas, es posible definir nuestros propios modelos de operaciones unitarias.

Los modelos disponibles en ASPEN-PLUS son los siguientes:

Mezcladores, divisores y separadores:

- Mezclador general MIXER
- Divisor de flujo FSPLIT
- Divisor de componentes SEP
- Separador de dos productos SEP2

Separadores Flash:

- Flash de dos fases FLASH2
- Flash de tres fases FLASH3

Calentadores y cambiadores de calor:

- Calentador general de proceso HEATER
- Cambiador de calor HEATX

Separación Multietapa:

- Fraccionamiento riguroso RADFRAC
- Columna de fraccionamiento riguroso múltiple MULTIFRAC
- Absorción rigurosa ABSBR
- Extractor riguroso EXTRC
- Destilación, diseño DSTWU
- Destilación, simulación DISTL

Reactores:

- Reactor de selección RYIELD
- Reactor estequiométrico RSTOIC
- Reactor de tanque continuo agitado RCSTR
- Reactor de flujo tapón RPLUG
- Equilibrio químico a dos fases REQUIL
- Equilibrio de fases y químico RGIBBS

Bombas y compresores:

- Bomba PUMP
- Compresor de una etapa COMPR
- Compresor multietapa MCOMPR

Manejo de sólidos:

- Ciclón CYCLONE
- Precipitador electrostático ESP
- Filtro de tela FABFL

- Limpiador Vénturi VSCRUB
- Triturador CRUSH
- Pantalla/clasificador SCREEN
- Hidrociclón HYCYC
- Filtro de tampón rotatorio FILTER
- Filtro centrífugo CFUGE
- Lavador de sólidos SWASH
- Decantador contracorriente CCD

Manipuladores de corrientes:

- Multiplicador MULT
- Duplicador DUPL

El simulador genera automáticamente las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, relaciones de conexión y aceptando ecuaciones de velocidad de reacción así como restricciones de diseño y de control.

Todas estas herramientas hacen que el sistema de simulación utilizado por el ASPEN-PLUS aumente los beneficios, ofreciendo alternativas para cubrir las deficiencias del enfoque.

REFORMACIÓN CATALÍTICA
DE NAFTAS

3.1 ANTECEDENTES

El proceso de reformación catalítica fué usado inicialmente para reemplazar al proceso de reformación térmica. El mejoramiento de la calidad de las gasolinas fué el resultado del cracking de las parafinas de bajo número de octano para producir olefinas con alto número de octanaje.

Los primeros reformadores en los años 40 y principios de los 50 eran unidades que trabajaban a alta presión, con un deterioro rápido de catalizador; para prevenir la rápida desactivación del catalizador por el coke, el rango de presión que se manejaba en los reactores era de 400 a 700 psig, con una relación de hidrógeno/hidrocarburo de 6 a 10 moles.

En comparación con los reformadores en 1984, éstos operan a presiones entre 100 y 150 psig, con relaciones de hidrógeno/hidrocarburo de 3 a 1 y de 5 a 1, con tiempos de vida del catalizador más largos que en los primeros reformadores.

En las primeras unidades, si una refinería trataba de incrementar el rendimiento en el reformado bajando la presión o intentaba incrementar el número de octano aumentando la temperatura del reactor, el catalizador rápidamente perdía su actividad así como su selectividad; con estas experiencias era evidente que los rendimientos podían ser mejorados.

Uno de los caminos a seguir fué el mejoramiento del catalizador, así como las técnicas de regeneración.

Las técnicas de regeneración vinieron primero. El desarrollo de nuevos catalizadores fué muy lento hasta que a finales de los años 60 los catalizadores bimetálicos y multimetálicos hicieron su aparición.

Como resultado de intensos trabajos en el laboratorio y plantas piloto algunas compañías diseñaron y construyeron sus propias unidades de reformación, así como sus propios catalizadores, algunos de estos fueron ofrecidos a otras compañías a través de licencias.

El proceso de reformación catalítica es uno de los procesos básicos y de gran importancia en la refinación del petróleo, ya que tiene como finalidad aumentar en número de octano de la nafta a través del proceso de reformación y obtener mediante una destilación fraccionada gas hidrógeno, gas combustible, LPG y nafta reformada.

En este proceso se llevan a cabo reacciones de isomerización, hidrogenación, deshidrogenación y deshidrociclización las cuales tienen como objetivo mejorar la calidad de los combustibles ya que incrementan el número de octano de las gasolinas. Los catalizadores que se emplean en éste tipo de reacciones de reformación son pequeños cristales de platino o platino soportado en alúmina.

La corriente de alimentación a ser reformada tiene bajo número de octano debido a que contiene grandes cantidades de parafinas de cadena lineal y cantidades relativamente pequeñas de parafinas ramificadas, naftenos, olefinas y aromáticos. Para indicar la diferencia que existe entre un componente y otro respecto a su número de octano, mostraremos a continuación una tabla comparativa de los números de octano de algunos hidrocarburos.

Hidrocarburo	Número de octano
Parafinas:	
n-butano	113
n-pentano	62
n-hexano	19
n-heptano	0
n-octano	-19
2-metilhexano	41
2,2-dimetilpentano	89
2,2,3-trimetilbutano	113
Naftenos:	
ciclohexano	110
metilciclohexano	104
etilciclohexano	43
Aromáticos:	
benceno	99
tolueno	124
1,3-dimetilbenceno	145

3.2 REACCIONES QUÍMICAS DE REFORMACIÓN.

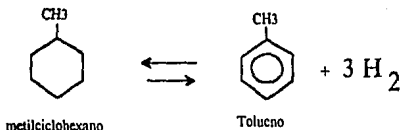
Los reformadores convierten los naftenos y parafinas lineales a parafinas ramificadas y aromáticos de alto número de octanaje. Todas éstas transformaciones se llevan a cabo a través de complejas reacciones químicas que involucran cerca de 300 especies químicas.

Reacciones de Deshidrogenación

La reacción más importante en el proceso de reformación catalítica de naftas es la de deshidrogenación porque esta produce aromáticos que tienen alto número de octano, por tanto un gran valor petroquímico; además son reacciones esencialmente cuantitativas.

Cuando un nafteno es convertido a aromático se da una disminución en el volumen la cual se compensa con un aumento considerable en el número de octano.

Estas reacciones son endotérmicas por lo que se ven favorecidas por temperaturas de reacción altas y presiones bajas, siendo además reacciones muy rápidas, las cuales son catalizadas por la función metálica del catalizador, su conversión normalmente está limitada por el equilibrio termodinámico, a continuación se pone un ejemplo de este tipo de reacción.



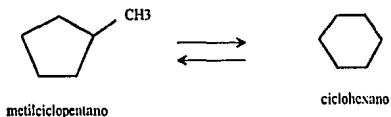
Reacciones de Isomerización.

Isomerización de naftenos.

Los naftenos pueden isomerizarse en un reactor de reformación, cuando esto pasa inmediatamente éstos experimentan una deshidrogenación convirtiéndose en aromáticos.

Aparentemente esta reacción involucra la apertura del anillo con una probable formación a parafinas y aromáticos. Esta reacción no es muy cuantitativa pero sí ligeramente exotérmica. Los

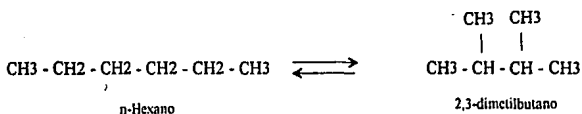
ciclopentanos termodinámicamente son favorecidos en éstas reacciones. Como ejemplo tenemos la siguiente reacción:



Isomerización de Parafinas.

En las reacciones de isomerización de parafinas se lleva a cabo un reordenamiento de la molécula con pequeños cambios en el volumen pero con un marcado incremento en el número de octano. Estas reacciones resultan de las reacciones intermedias de los iones de carbonio, son promovidas por la función ácida del catalizador. Dichas reacciones no dependen de la presión de operación.

La reactividad de las parafinas hacia la isomerización se incrementa conforme aumenta el número de átomos de carbono. Como ejemplo de esta reacción se tiene:



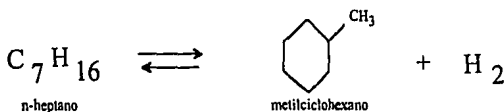
Reacciones de Deshidrociclización.

Probablemente la reacción más difícil de promover en el proceso de reformación es la deshidrociclización, puesto que consiste en un reordenamiento molecular sumamente difícil de una parafina a un nafteno, esta reacción es requerida para obtener una producción satisfactoria de reformado con un alto número de octano.

Al igual que en la isomerización de naftenos existen pasos intermedios en la conversión de parafinas a aromáticos. Las parafinas de cadenas largas se deshidrociclizan más fácilmente que las de cadenas más cortas.

Esta reacción se favorece a altas temperaturas debido a que son reacciones endotérmicas y bajas presiones, se promueve por la función ácida y metálica del catalizador y toman lugar predominantemente en el último reactor (cuando se está trabajando en una serie de reactores).

Las reacciones de deshidrociclización son importantes desde el punto de vista rendimiento-número de octano porque representan un medio de convertir hidrocarburos parafínicos con bajo número de octano en hidrocarburos nafténicos y posteriormente en aromáticos. Cuando aumenta el peso molecular se hace más fácil la ciclización; esta reacción es el paso limitante hacia las siguientes reacciones de aromatización, las cuales se llevan a cabo rápidamente.

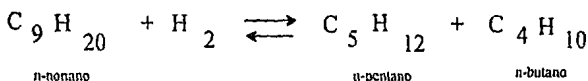


Reacciones de hidrocracking.

La ruptura del enlace carbono-carbono en operaciones de reformación es llamada hidrocracking, en estas reacciones se puede romper una molécula de parafina en dos moléculas de bajo peso molecular o puede abrirse el anillo de un nafteno.

El corte del enlace C-C inicialmente produce una olefina que es rápidamente hidrogenada; las altas temperaturas y altas presiones aceleran el proceso de hidrocracking el cual toma lugar en sitios ácidos del catalizador, sin embargo se tienen rendimientos reducidos en el reformado, debido a que esta reacción consume hidrógeno. Estas reacciones se consideran sumamente exotérmicas.

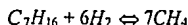
El proceso de hidrocracking produce coke o sus precursores los cuales cubren los sitios activos del catalizador inhibiendo así su actividad.



Demetilación.

Una reacción más que puede ocurrir en un reactor de reformación, algunas veces con resultados desastrosos es la Demetilación. A variadas condiciones de operación de alta temperatura y alta presión puede ocurrir esta reacción, la cual es altamente exotérmica, por lo libera grandes cantidades de energía. Un factor que puede aumentar la ocurrencia de dicha reacción es cuando se tiene un catalizador joven y bajos espacios velocidad. Esta reacción se puede inhibir si se agrega azufre o un segundo metal, como en el caso de los catalizadores bimetálicos.

El calor que libera esta reacción de demetilación se calcula que es de 154,000 Btu/lbmol de n-heptano convertido; si este calor no es removido rápidamente se puede seguir promoviendo dicha reacción la cual liberaría más calor hasta llegar al grado de derretir el catalizador y hasta las paredes del reactor. Esta reacción suele ocurrir cuando se arranca el reactor.



3.3 VELOCIDADES DE REACCIÓN

Tipo de reacción	Rapidez de reacción relativa	Efecto del incremento en la presión total	Efecto térmico
Hidrocracking	Muy baja	Incrementa la rapidez	Muy exotérmica
Deshidrociclización	Baja	Pequeño o nulo incremento en la rapidez	Endotérmica
Isomerización	Rápida	Disminuye la rapidez	Medianamente exotérmica
Deshidrogenación	Muy rápida	Disminuye la conversión	Muy endotérmica

En el cuadro anterior se muestran los parámetros de reacción típicos para las reacciones de reformación, estas reacciones dominan de diferente manera a lo largo del reactor.

Las reacciones de las parafinas son críticas en el proceso de reformación, ya que estas son convertidas a través de tres reacciones que son el cierre del anillo a naftenos de cinco y seis carbonos, isomerización a parafinas ramificadas y el hidrocracking a parafinas de bajo peso molecular.

Las reacciones de cierre del anillo o deshidrociclización incrementan el número de octanaje, ya que los naftenos producidos rápidamente reaccionan y se convierten a aromáticos, sin embargo la velocidad de reacción de la deshidrociclización es baja acercándose a la del hidrocracking de parafinas.

En general las condiciones de proceso que favorezcan la deshidrociclización sobre el hidrocracking y la apertura del anillo son deseables. Tales condiciones son bajas presiones y altas temperaturas.

La mayoría de las reacciones de reformación son reversibles, sin embargo las constantes termodinámicas juegan un papel muy importante en el desarrollo de modelos así como en el entendimiento de dichas reacciones.

Para obtener altos rendimientos de aromáticos se requieren bajas presiones y altas temperaturas. La relativa velocidad de envejecimiento del catalizador se incrementa significativamente cuando se reduce la presión.

Muchas de las reacciones que se llevan a cabo en el proceso de reformación requieren de la formación de intermediarios olefinicos en su secuencia de reacción elemental, las cuales conducen a la formación del coke y subsecuentemente a la desactivación del catalizador. Por tanto, la desactivación del catalizador es causada principalmente por el bloqueo de sitios activos del catalizador debido a la formación del coke.

Altas presiones parciales de hidrógeno suprimen la formación de diolefinas haciendo una selección entre los intermediarios olefinicos y los productos líquidos más favorable. Sin embargo a altas presiones se reduce la selectividad hacia los aromáticos en el producto líquido deseado.

3.4 TERMODINÁMICA.

Las reacciones que se llevan a cabo dentro del reformador son tanto endotérmicas como exotérmicas.

Las reacciones de hidrocracking son consideradas como las más exotérmicas, le siguen las reacciones de isomerización que son medianamente exotérmicas. La deshidrociclización así como la deshidrogenación son reacciones endotérmicas.

En general dependiendo de las condiciones de proceso, así como de las características de la alimentación y del catalizador, la operación del reactor puede ser endotérmica o exotérmica.

Casi todos los reformadores de gasolinas operan en condiciones donde el equilibrio no afecta la conversión de los principales componentes; sin embargo para ciertas condiciones, tales como concentraciones altas de hidrocarburos ligeros en la carga, afectan el equilibrio y por tanto el nivel de conversión alcanzado.

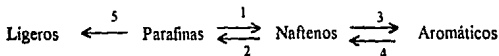
Debido a que las reacciones más importantes son las de deshidrogenación de naftenos a aromáticos las condiciones de operación típicas varían desde 455 a 510 grados centígrados y de 6.5 a 50 atmósferas de presión observándose que en este rango se alcanzaban conversiones parciales de aromáticos. Consecuentemente, para mejorar dicha conversión recientemente se está operando a mayores temperaturas y menores presiones.

3.5 CINÉTICA.

Para entender el comportamiento de los reactores, se debe entender primero la cinética de las reacciones así como los efectos que provoca el cambio de temperatura, para que de esta manera se pueda determinar qué factores se necesitan tomar en cuenta en el diseño de un reactor de reformación.

Las reacciones de deshidrogenación de naftenos y parafinas son rápidas así que llegan al equilibrio, por tanto, sus velocidades no se necesitan considerar explícitamente. Similarmente el equilibrio entre n-parafinas y las isoparafinas es muy cercano. En contraste, las velocidades de ciclización e hidrocracking son bajas y necesitan ser consideradas explícitamente. La presión parcial del hidrógeno es una variable importante ya que afecta fuertemente la conversión a aromáticos así como la velocidad de hidrocracking.

El modelo cinético obedece el siguiente esquema reaccionante:



Las ecuaciones de balance de materia siguen el siguiente modelo:

$$r = A e^{-E/RT} (Ci)^\alpha$$

en donde A = factor pre-exponencial

E = energía de activación

R = constante universal de los gases

C = concentración

T = temperatura

α = exponente

3.6 CATALIZADORES.

Las reacciones de reformación típicamente proceden a través de un número elemental de pasos, por ejemplo, las parafinas de cadena lineal son convertidas a isoparafinas, siendo primeramente convertidas a olefinas, las cuales son isomerizadas a isoolefinas y entonces convertidas a isoparafinas.

Correspondientemente el catalizador tiene dos funciones la de hidrogenación-deshidrogenación asociada a una función metálica del catalizador para la conversión de las parafinas-olefinas y la función de isomerización que se asocia con una actividad ácida del catalizador, la cual rearrregla el esqueleto de carbón a través de un mecanismo en el ión carbonio.

Recientemente se han desarrollado catalizadores que tienen cristales de un metal como Pt en un soporte ácido como la alúmina presentándose así las dos funciones en fases separadas. El metal provee la actividad de hidrogenación-deshidrogenación y el soporte ácido de la alúmina promueve la actividad de isomerizar, esta actividad es mucho mayor que la que puede presentar un óxido metálico.

El catalizador se desactiva cuando hay formación de coque afectando primariamente al soporte. El coquizado resulta de una reacción secundaria de los hidrocarburos, particularmente de las olefinas. La desactivación del catalizador es rápida cuando la presión parcial del hidrógeno es baja y cuando la temperatura es alta. La regeneración del catalizador se da cuando se quema el coque.

Los catalizadores típicos son Pt/Re en alúmina y Pt/Ir también soportado en alúmina; ambos catalizadores como ya se mencionó son bifuncionales.

El segundo metal como el renio e iridio actúa como un estabilizador suprimiendo la desactivación del catalizador, afectando a la selectividad de la reacción.

Excepto para la deshidrogenación de naftenos que solamente requiere al platino para ser catalizada, todas las otras reacciones requieren una interacción entre los sitios activos; la isomerización del anillo y de las parafinas requiere la función ácida para el rearreglamiento del esqueleto de carbón y la segunda función metálica para evitar el envejecimiento por la hidrogenación de las olefinas.

La reacción de dehidrociclización pueden proceder a través de la deshidrogenación de las parafinas en sitios metálicos, seguida por el rearreglamiento del esqueleto de carbón en sitios ácidos, sin embargo existe la evidencia que esto puede proceder directamente en sitios simples.

Las reacciones de hidrocracking pueden tomar lugar en sitios ácidos o en sitios metálicos.

3.7 CONDICIONES DE OPERACIÓN.

En procesos operados a presiones relativamente a altas entre 34 y 50 atmósferas, la elevada presión parcial del hidrógeno resulta de las altas velocidades de reacción en el hidrocracking, limita el grado de conversión de los aromáticos, baja la velocidad de desactivación del catalizador y baja la producción de hidrógeno.

En contraste, a bajas presiones de operación entre 8.5 y 20.5 atmósferas, se dan altas conversiones a aromáticos, bajas conversiones en las reacciones de hidrocracking y alta

producción de hidrógeno, sin embargo, esto puede llevar a la rápida desactivación del catalizador por la formación del coque.

Las temperaturas de reacción son escogidas de un balance de ventajas del incremento de la actividad catalítica como una función en el incremento de temperatura. Por medio de la temperatura se puede controlar la calidad del reformado, por lo que a elevadas temperaturas disminuye el rendimiento del reformado aumentando la desactivación catalítica.

Procesos a bajas presiones son operados a temperaturas más elevadas para optimizar la conversión de productos de alto número de octanaje. Como el catalizador pierde actividad durante la operación, la temperatura del reactor se incrementa gradualmente para mantener una constante en el número de octanaje en el producto reformado.

El espacio-velocidad se define como una medida de la cantidad de nafta procesada sobre una cantidad dada de catalizador por unidad de tiempo.

El espacio-velocidad influye de manera importante en el producto obtenido, esto es, el producto será de menor calidad si se manejan altos espacios-velocidad; este efecto se puede contrarrestar si se aumenta la temperatura.

El espacio-velocidad se maneja en un rango de 0.9 a 5 (volumen de líquido alimentado por volumen de catalizador por hora, siendo de 1 a 2 los valores más comunes; esta variable de operación no afecta a la aromatización y a la isomerización.

La relación hidrógeno-hidrocarburo (H_2/HC) es otra variable de suma importancia en la operación del reformador debido a cuestiones de estabilidad del catalizador.

Cuando la relación de H_2/HC sea alta la nafta se moverá más rápido a través del reactor, lo cual causará que el calor se disipe mas y a su vez se incremente la estabilidad del reactor.

requiriendo altos costos de operación; además de afectar adversamente a la aromatización, incrementando el hidrocracking y reduciendo la velocidad de desactivación. Este valor se escoge de un balance entre la cantidad de hidrocracking deseado y de la desactivación máxima deseable.

La relación mol de H_2/HC en la alimentación varía de 3 a 10 siendo la relación de 5 a 8 las más usadas.

Las mezclas que tienen concentraciones apreciables de hidrocarburos insaturados deben usualmente ser hidrotratadas antes de reformarlas para prevenir el indebido consumo de hidrógeno en el reformador y una excesiva desactivación del catalizador. Las concentraciones de impurezas en la alimentación que pueden actuar como envenenadores del catalizador deben ser rigurosamente controlados.

El azufre así como los compuestos orgánicos de nitrógeno envenena a la función ácida del catalizador y los metales como arsénico, plomo y cobre desactivan al platino.

3.8 DISEÑO DEL REACTOR.

La necesidad de controlar la temperatura de un reactor es un factor de suma importancia en el diseño de un sistema de reactores de reformación. El proceso de reformación globalmente es endotérmico, lo que implica que la temperatura del reactor decrece en la dirección del flujo. Un decremento de la temperatura corresponde a un decremento en la velocidad de reacción y para los aromáticos un decremento en la conversión.

Además, como la más endotérmica de las reacciones es la de deshidrogenación de naftenos y ocurre rápidamente, trae como consecuencia que grandes cantidades de energía deban

de ser agregadas a la reacción para mantener su temperatura, esta energía debe de ser agregada a la corriente antes de entrar al reactor.

Uno de los principales problemas que se tenía en el diseño de reactores era la manera de cómo se le podía adicionar tanta energía para que se pudieran llevar a cabo todas las reacciones.

Este problema se solucionó dividiendo la carga total del catalizador en varios reactores con interetapas de calentamiento entre cada reactor.

A continuación se muestra una tabla que contiene las condiciones de operación típicas para un sistema de tres reactores.

	Reactor		
	1	2	3
T de entrada ° C	502	502	502
T de salida ° C	433	471	496
Delta T ° C	69	31	6
Número de octanaje	65.5	79.5	90
Incremento en el número de octanaje	27	14	6
Reacciones principales	Deshidrogenación Isomerización	Deshidrogenación Isomerización Hidrocracking Deshidrociclización	Hidrocracking Deshidrociclización
LHSV, h ⁻¹ por reactor	5.5	2.4	1.7
Distribución del catalizador (%)	15	35	50

En la tabla anterior se muestra cuales son las principales reacciones que se llevan a cabo en cada reactor. Como se observa el rápido enfriamiento de la corriente de reactante como resultado de la reacción endotérmica de deshidrogenación, el tiempo de residencia y la cantidad

de catalizador en el primer reactor son considerablemente menor que en cada uno de los otros reactores.

En este reactor la energía de activación es tal, que las velocidades de reacción son muy bajas en el fondo del primer reactor, por lo que si se adiciona más catalizador en el primer reactor esto no incrementará la conversión.

El balance de energía esencialmente gobierna el diseño del primer reactor. La cantidad de catalizador en el primer reactor es aproximadamente cerca del 15% al 20% del total.

El número de octano tiene un mayor incremento en el primer reactor debido a la formación de aromáticos y a la isomerización de parafinas.

En el segundo reactor los naftenos que quedaron se isomerizan y subsecuentemente se deshidrogenan a aromáticos, estas reacciones se llevan a cabo en la parte superior del reactor por lo que ocurre un descenso de temperatura.

El tercer reactor se diseñó para optimizar la conversión involucrada en las reacciones lentas particularmente la de deshidrociclización y esta a menudo contiene la mitad del catalizador de todo el sistema. En este último reactor ocurren las reacciones de hidrocracking y las del cierre del anillo.

El cambio de temperatura en este reactor es pequeño porque en él se llevan a cabo las reacciones de hidrocracking las cuales son exotérmicas.

Un control de la cantidad de hidrocracking es deseado para incrementar el número de octanaje por el cracking de parafinas largas y la dealquilación de aromáticos con cadenas largas a los lados, aunque el hidrocracking es caro en términos del consumo de hidrógeno.

Recientes desarrollos en lo que corresponde a la estabilidad de los catalizadores de reformación han incrementado su interés en llevar a cabo el proceso a bajas presiones, para ello se requerirá utilizar 3 ó 4 reactores, todos del mismo tamaño y uno adicional el cual sirve para reemplazar a alguno de ellos cuando el catalizador esté siendo regenerado, dicho esquema permite una operación continua del proceso.

3.9 PROCESOS DE REFORMACIÓN.

Los diferentes tipos de unidades usados en los procesos de reformación cataítica están caracterizados por el predominio de la presión. Algunas unidades están diseñadas para operar a altas presiones; en tanto que otras son operadas a bajas presiones teniendo corrientes de regeneración.

Las unidades que trabajan a altas presiones permiten operaciones largas sin regeneración o con algunas corrientes de regeneración, son más baratas para construirse pero menos flexibles que las que operan a bajas presiones. Dichas unidades están limitadas por el número de octano del producto, además de dar bajas conversiones.

Los procesos que usan altas presiones de operación son:

- Platforming
- Catforming
- Houdriforming
- Solvafirming
- Proceso Sinclair-Baker

Desde que los catalizadores de platino son usados, las deposiciones son usualmente pequeñas permitiendo largos usos. Otros procesos regeneran al catalizador estando en operación, algunos de estos procesos tales como el ultraforming y el powerforming, usan catalizadores de platino.

El proceso de hidroforming usa molibdeno en alúmina como catalizador.

La operación de reformación catalítica conocida como Termofor usa como catalizador al cromo en alúmina y el proceso de hyperforming emplea molibdato de cobalto en alúmina.

Se presenta a continuación una tabla que nos muestra los procesos que utilizan catalizadores de platino así como el número aproximado de unidades instaladas:

	Nombre del proceso	Catalizador	Número aproximado de unidades
Semi-regenerador	Catforming	Pt/SiAl	16
	Platforming	Pt/Al ₂ O ₃	275
	Sinclair-Baker	Pt/Al ₂ O ₃	60
	Houdriforming	Pt/Al ₂ O ₃	16
Regenerador	Ultraforming	Pt/Al ₂ O ₃	40
	Powerforming	Pt/Al ₂ O ₃	40

Se utilizan también, otros tipos de catalizadores: MoO₃ sobre alúmina en Hydroforming, lecho fijo o fluidificado, Cr₂O₃ sobre alúmina, en lecho móvil; y Co-Mo sobre silico-alúmina en Hyperforming.

Los diferentes procesos fueron desarrollados por las siguientes compañías:

Compañía	Tipo de proceso
Atlantic Richfield	Catforming
Chevron Research	Rheniforming
Exxon Research and Engineering	Powerforming
Houdry Division of Air Products and Chemicals	Houdriforming
Sinclair Research Laboratory and Baker & Company	Sinclair-Baker reforming
Standard Oil of Indiana	Ultraforming
Standard Oil of New Jersey	Powerforming, Hydroforming, y Fluid Hydroforming
Union Oil	Hyperforming
Universal Oil Products	Platforming

Proceso de Platforming.

En el proceso de reformación catalítica conocido como platforming los activadores son pequeñas cantidades de fluoruro y/o cloruro. La alimentación es una corriente de nafta dentro de la cual un excedente de hidrógeno es también alimentado. Las reacciones que se llevan a cabo en el cracking térmico toman lugar aquí, el catalizador ayuda a causar otras reacciones tales como las de ciclización e isomerización.

La alimentación entra a un prefraccionador para remover la fracción de ligeros del domo. En esta operación el oxígeno disuelto y el agua son removidos. Del prefraccionador sale una corriente que es mezclada con el hidrógeno recirculado antes de entrar al primer horno.

Una vez que la corriente sale del horno se envía al primer reactor, el effluente de este reactor se dirige hacia el segundo horno y posteriormente entra al siguiente reactor.

Del fondo del segundo reactor sale una corriente la cual se envía a un horno para después entrar al tercer reactor, la corriente que sale del fondo de este reactor se dirige hacia el último horno para entrar después al tercer reactor. La corriente que sale del fondo de este reactor se envía a un separador, donde los productos son separados en dos corrientes.

Los reactores son cilindros a presión, que en su interior se encuentra la sustancia catalítica. Los vapores se mueven a través de cada reactor haciendo un apropiado contacto con el catalizador para aumentar la velocidad de reacción así como los productos deseados. Debido a que la mayoría de las reacciones absorben calor, los vapores que salen de cada reactor deben ser recalentados, es por esto que los hornos se encuentran entre los reactores.

La corriente que sale del fondo del separador se envía a la torre fraccionadora para separar los componentes en fracción ligera, la cual sale del domo de la columna, y el reformado que sale del fondo. El reformado pesado sale del fondo de la columna mientras que el ligero sale de una cierta parte de la torre. El reformado es el producto deseado.

El gas que sale del separador se dirige a una torre absorbidora donde se elimina al ácido sulfhídrico de la corriente de hidrógeno, para posteriormente ser recirculado.

El hidrógeno suprime la formación de coke en el catalizador. Los depósitos de coke en el catalizador inhiben la actividad catalítica. Las temperaturas de reacción van de 850 - 950° F, y las presiones varían desde 200 - 750 psig. Las condiciones de presión y temperatura están dictadas por el tipo de alimentación usada y la calidad de el proceso deseado.

La regeneración del catalizador se lleva a cabo cuando la actividad del catalizador decrece hasta cierto nivel, una vez regenerado el catalizador es usado hasta que su actividad decrece por debajo de los límites económicos, en este punto el catalizador es remplazado por uno fresco. Este proceso puede producir un reformado rico en aromáticos, el cual puede ser usado como combustible para aviones, como fuente de aromáticos para la industria petroquímica. Desde que son producidas grandes cantidades de hidrógeno en este proceso, el hidrógeno en exceso puede ser usado como una fuente para las operaciones de hidrogenación.

La regeneración del catalizador se hace cada vez que es necesario parando la operación de la planta para quemar al carbón que se depositó en el catalizador..

Sin embargo recientes innovaciones usan un proceso continuo de platforming en el cual una cama movable de catalizador es usada. La regeneración del catalizador es continua, pudiendose cambiar al catalizador sin tener que parar la operación de la planta.

El proceso de platforming continuo ha sido exitosamente introducido por la UOP. Este proceso usa reactores, intercambiadores de calor, separadores y una torre fraccionadora; la unidad de regeneración del catalizador es la parte distintiva. El catalizador viejo continuamente se está regenerando, por lo que la regeneración se lleva a cabo bajo condiciones de estado estable.

El catalizador continuamente se está transfiriendo al regenerador, una vez realizada la regeneración el catalizador regresa al reactor entrando por el domo.

Los reformadores que utilizan como catalizador al platino y operan a baja presión son similares a los operados a alta presión excepto por incluye un reactor adicional, el cual permite llevar a cabo la regeneración durante el ciclo. El reactor adicional se pone a trabajar cuando alguno de los otros reactores tiene que ser reemplazado.

Proceso de Ultraforming.

El proceso de ultraforming autorizado por la Standard Oil de California, emplea tres reactores teniendo uno adicional el cual se emplea para regeneración del catalizador.

El catalizador puede ser regenerado muchas veces sin perder selectividad. En este proceso la conversión alcanzada es muy alta, obteniéndose un producto cuyo número de octano varía de 95 - 103. Los xilenos de alta pureza pueden ser obtenidos a través del fraccionamiento.

Proceso de Houdriforming.

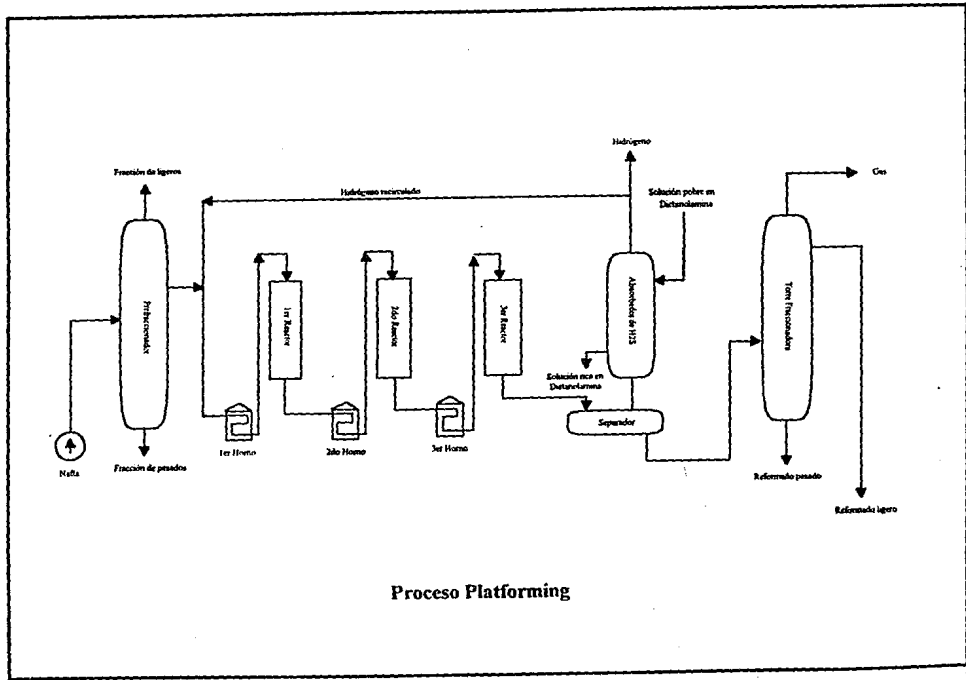
Este proceso está autorizado por Houdry Division of Air Products and Chemicals, usa dos o más reactores con calentadores entre los reactores.

La carga de nafta es mezclada con el gas de recirculación rico en H_2 , este proceso usa un catalizador bimetalico de platino en alúmina. La conversión alcanzada para producir benceno,

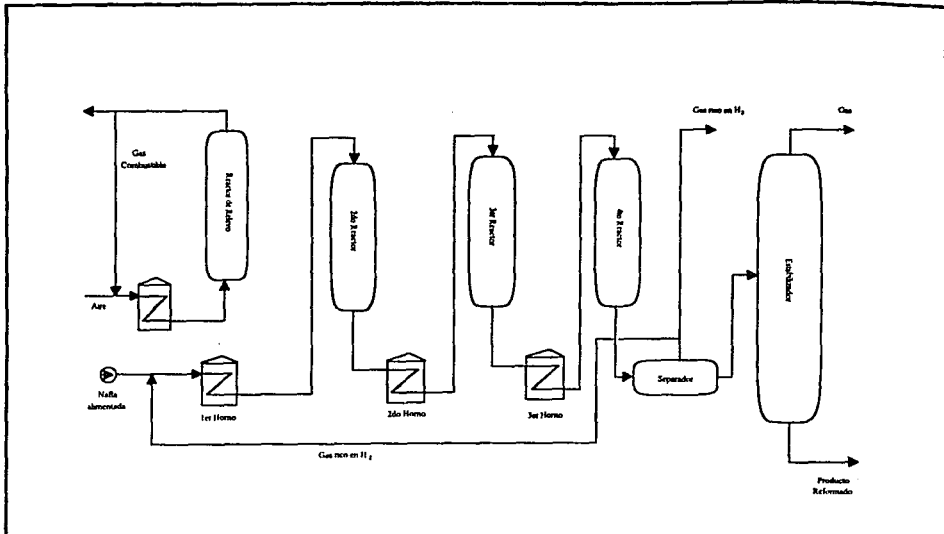
tolueno y xilenos a partir de naftenos es muy alta. En este proceso la temperatura de operación varía de 900 - 1000 ° F y el rango de presión oscila entre 150 y 400 psig.

En suma la mayoría de los procesos de reformación catalítica tienen las siguientes características en común:

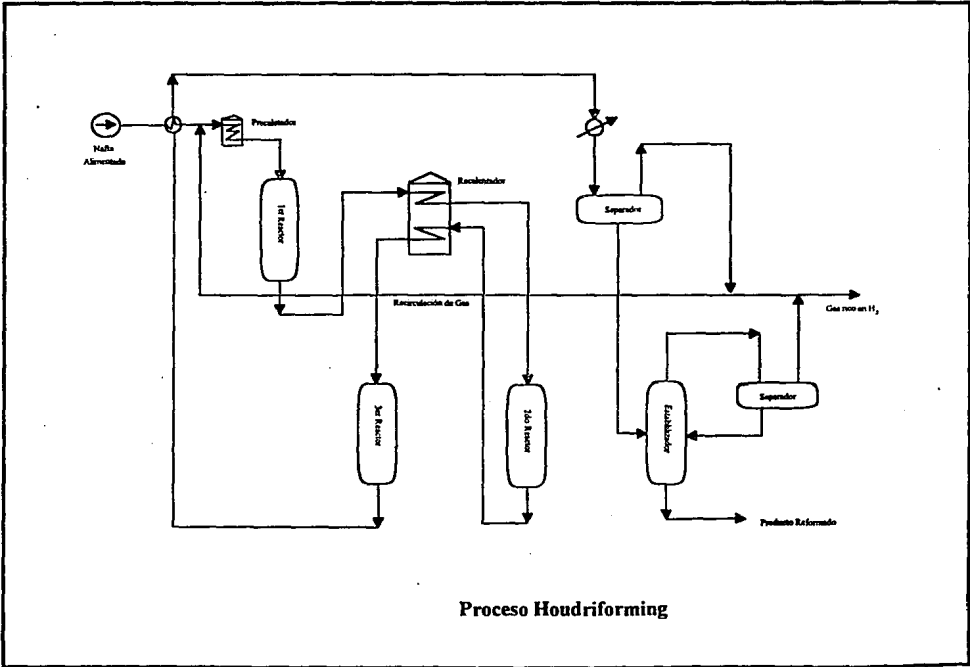
- Usan como catalizador al platino.
- Usan hornos entre los reactores.
- Existe regeneración del catalizador.
- Se alcanzan altas conversiones.
- Producción de hidrógeno.



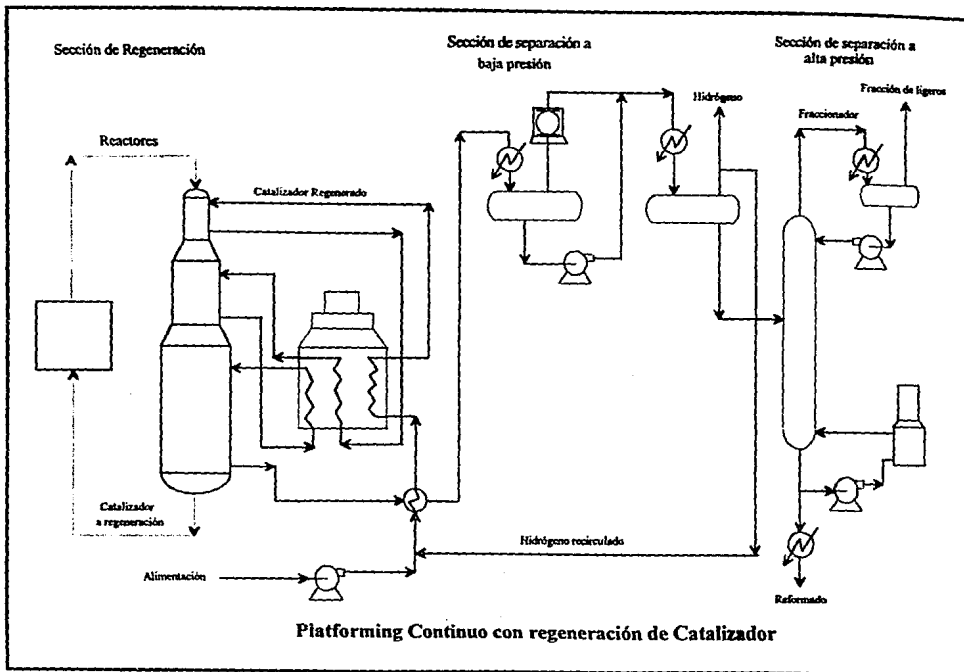
Proceso Platforming



Proceso Ultraforming



Proceso Houdriforming



3.10 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

La planta reformadora de naftas (fig. 3.10.1) se compone de tres secciones :

- Sección de carga y reacción
- Sección de compresión de hidrógeno
- Sección de estabilización

Sección de carga y reacción

Esta sección tiene como finalidad preparar la carga de alimentación al proceso, llevar a cabo las reacciones de reformación así como separar los productos en sus fases líquido-gas, para posteriormente enviarse a la sección de compresión.

La carga originaria de la unidad Hidrodesulfuradora de naftas, se mezcla con una corriente de hidrógeno de recirculación para posteriormente precalentarse en un intercambiador de calor carga-efluente enviándose después a un horno con la finalidad de calentar la corriente hasta obtener la temperatura necesaria para poder llevarse a cabo las reacciones de reformación.

Las reacciones de reformación catalítica se llevan a cabo en tres reactores en serie con calentamiento del efuente de cada reactor en el horno. Es necesario calentar el efuente de cada reactor en el horno debido a que las reacciones de reformación catalítica son globalmente endotérmicas, esto implica que una vez que la corriente de proceso pasa por cada reactor disminuye su temperatura y como las reacciones de reformación se

llevan a cabo a una determinada temperatura, la finalidad de calentar el efluente de cada reactor es aumentar la temperatura del efluente hasta llegar a las condiciones necesaria para que se lleven a cabo las reacciones en el siguiente reactor.

El efluente del último reactor se enfría en dos etapas, primero pasa por el intercambiador carga-efluente y después por un soloaire.

Compresión de hidrógeno

La mezcla gas-líquido que sale del soloaire se dirige a un tanque separador de baja presión, los gases que salen por el domo pasan a la sección de compresión y los líquidos que salen por el fondo se envían por medio de una bomba a esta misma sección para mezclarse nuevamente con los gases y así de esta manera se logra condensar una buena parte de los hidrocarburos de la corriente gaseosa, esta mezcla es enviada a un enfriador que utiliza agua como medio de enfriamiento.

Una vez que la corriente pasa por el enfriador, se envía a un tanque separador de hidrógeno, por el domo se obtiene una mezcla gaseosa que contienen principalmente hidrógeno, esta corriente se divide en tres, una parte se recircula mezclándose con la corriente de nafta de alimentación a la planta. Otra parte se dirige a la succión del compresor del gas producto. La última parte es el excedente el cual es enviado al sistema de gas combustible.

Los fondos del separador son llevados por medio de una bomba al intercambiador alimentación-fondos de la torre estabilizadora.

La corriente que se envió a la succión del compresor , una vez comprimida se dirige hacia el separador de alta presión, en el cual se separa una pequeña cantidad de hidrocarburos líquidos los cuales son mezclados con los fondos del separador de hidrógeno, para posteriormente enviarse al intercambiador de alimentación-fondos de la torre estabilizadora.

El efluente gaseoso del separador de alta presión se divide mandandose una parte hacia la unidad Desulfuradora de naftas y, la otra se envía a la segunda etapa del compresor de gas producto en donde se comprime y se manda hacia las unidades hidrodesulfuradora de destilados intermedios.

Sección de estabilización

Esta sección tiene como objetivo obtener nafta reformada mediante destilación fraccionada. La mezcla de hidrocarburos condensados provenientes del separador de hidrógeno de recirculación y del separador de alta presión son enviados como alimentación a la torre estabilizadora previamente pasando por el intercambiador alimentación-fondos en donde se precalienta esta mezcla.

El destilado vapor que salen del domo de la torre se enfría en un intercambiador de calor el cual opera con agua de enfriamiento. Posteriormente la mezcla pasa a un tanque acumulador, donde los incondensables constituidos por hidrógeno e hidrocarburos ligeros, se envían a la red de gas combustible.

El destilado líquido constituido por propano y butanos, se divide en dos corrientes, una de las cuales se envía como reflujo a la torre y el exceso se envía a tratamiento cáustico a la unidad Tratadora y Fraccionadora de Hidrocarburos.

Los fondos de la torre estabilizadora de nafta reformada se divide en dos corrientes, una se manda a un rehervidor para mantener las condiciones de temperatura en el fondo y el exceso se envía a almacenamiento pasando previamente por el intercambiador alimentación-fondos, y dos enfriadores de reformado producto.

La nafta reformada se envía a almacenamiento, el LPG se envía como carga a la Unidad Tratadora y Fraccionadora de Hidrocarburos, y combustible, cuyo destino es la red general de gas combustible de la refinería.

Requerimientos de las corrientes de alimentación y productos.

La composición de la corriente de alimentación es:

Parafinas	64%
Naftenos	19%
Aromáticos	17%

manejándose una capacidad de 30,000 BPD.

Los requerimientos de los productos obtenidos son:

Hidrógeno	1086 mm ³ /D
Gas seco	32.85 mm ³ /D
Gas licuado	2780 BPD
Gasolina Reformada	22,390 BPD

La planta opera con un catalizador Pt-Re soportado en alúmina.

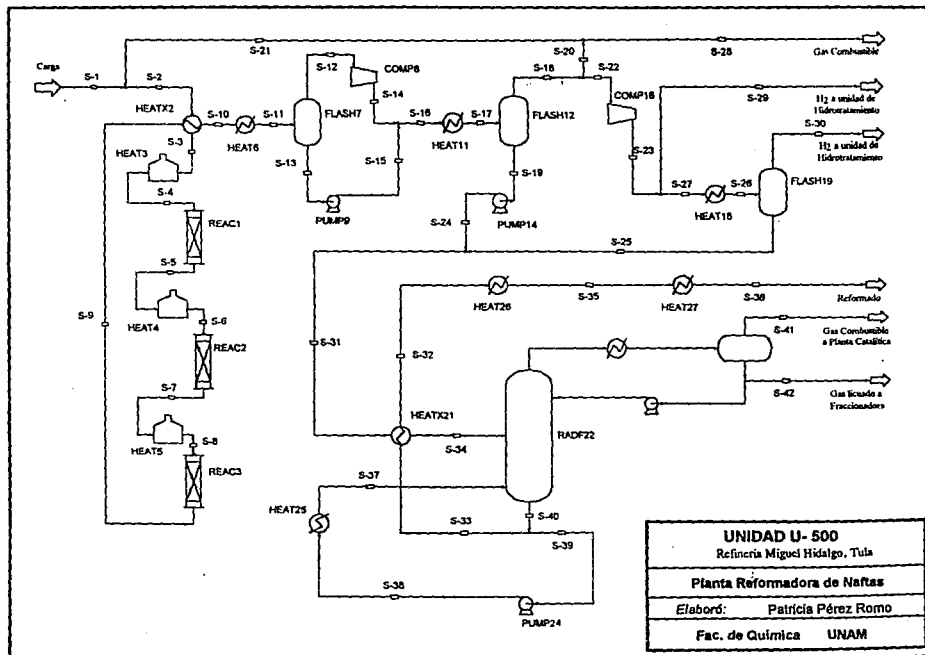


Figura 3.10.1

SIMULACIÓN DE
LA REFORMADORA DE NAFTAS

4.1 PASOS A SEGUIR EN UNA SIMULACIÓN DE PROCESOS

Para poder simular un proceso, es necesario definir una serie de etapas u ordenamiento lógico que tienen que cubrirse para lograr obtener una simulación confiable, no siendo necesario seguir la misma secuencia. Las etapas que a continuación se enuncian, son válidas para cualquier tipo de simulador de procesos.

En cada una de estas etapas se hace una breve explicación de la manera en que se definió la planta reformadora de naftas.

1. Definición del diagrama de flujo de procesos.

Como primer paso para llevar a cabo la simulación de un proceso consiste en definir los límites de éste, debido a que las plantas no siempre están aisladas sino que se encuentran interconectadas y localizadas en grandes complejos teniendo flujos de materia y/o energía con otros procesos, por lo que si se alteramos el proceso en cuestión, se alteran los demás o viceversa. Es por esto que esta etapa se considera que debe de ser la primera ya que no siempre resulta fácil definir los límites de un proceso a simularse.

Para el caso de la simulación de la planta reformadora de naftas, se consideraron como límites de simulación los límites reales puesto que las interconexiones de la reformadora de naftas con otros procesos no se consideraron de gran influencia para que se tuviera un efecto considerable.

2. Selección de unidades.

Se deben escoger las unidades en las cuales se van a definir las variables de entrada y salida del proceso en cuestión. En el caso específico del simulador de procesos aspen plus, se pueden elegir más de un sistema de unidades a utilizar durante la simulación, de hecho, se pueden utilizar diferentes unidades para cada operación unitaria.

Para el caso de la simulación de la planta reformadora de naftas se utilizaron las unidades inglesas debido a que la información de que se disponía del proceso real venía reportada en tales unidades.

3. Selección de los modelos para el calcular las propiedades termofísicas.

Esta etapa tiene como finalidad elegir un modelo de propiedades termofísicas que prediga con la mayor exactitud posible el comportamiento del proceso seleccionado. La elección de este modelo representa una parte clave dentro de la simulación de procesos, puesto que como no se dispone de una ecuación que calcule todas las propiedades de todos los compuestos a cualquier condición es necesario elegir el modelos que represente con mayor fidelidad el comportamiento de la mezcla en cuestión en el rango de operación.

El simulador de procesos Aspen Plus cuenta con la opción de poder utilizar un modelo diferente para el cálculo de propiedades para cada operación unitaria, lo cual otorga una mayor flexibilidad a la simulación. En el proceso de reformación catalítica de naftas se manejan principalmente hidrocarburos e hidrógeno. Puesto que la mezcla de hidrocarburos es de naturaleza no polar se decidió

trabajar con la ecuación de estado de Redlich-Kwong-Soave ya que ésta era la que predicía con mejor exactitud al proceso.

Debido a que en una parte de el proceso de reformación catalítica de naftas se manejan grandes cantidades de hidrógeno se decidió usar un modelo diferentes para el cálculo de propiedades que representara fielmente esta parte del proceso, encontrandose que la ecuación de estados correspondientes de Grayson-Streed era la que nos daba los mejores resultados.

Concluyendo, la primera parte del proceso que incluye la sección de carga y reacción así como la sección de compresión de hidrógeno se simularon con la ecuación de estados correspondientes de Grayson-Streed y la sección de estabilización se simuló con la ecuación de estado de Redlich-Kwong-Soave.

4. División del proceso en módulos y definición de los modelos que representen a las operaciones unitarias.

Esta etapa consistió en elegir los modelos apropiados disponibles en el simulador ASPEN PLUS que representaran las operaciones unitarias que se llevan a cabo en el proceso.

La tabla que a continuación se presenta nos muestra los modelos que se eligieron para simular cada operación unitaria.

Operación Unitaria	Módulo empleado
Intercambiadores de calor	Heater
Intercambiadores de calor (dos corrientes de procesos)	Heatx
Bomba	Pump
Compresor	Compr
Separador Flash	Flash2
Mezclador	Mixer
Divisor	Fsplit
Horno	Heat
Reactor	Rplug
Torre fraccionadora	Radfrac

5. Definición de las corrientes de entrada y sus compuestos químicos.

El objetivo de esta etapa es definir la composición de la(s) corriente(s) de entrada así como sus condiciones de presión y temperatura.

Esta etapa si no es la más importante es básica puesto que para realizar exitosamente una simulación es necesario tener la composición y condiciones de alimentación a la planta ya que de esta información dependen otras etapas, como por ejemplo de acuerdo a los componentes químicos involucrados se eligen las propiedades termofísicas.

En el caso de la simulación de la planta Reformadora de Naftas, la información disponible acerca de la composición de entrada era escasa, puesto que únicamente aparecían como componentes de entrada el agua, ácido sulfhídrico, hidrógeno, metano, etano, propano, n-butano, isobutano, n-pentano, isopentano y el C_6^+ , el cual representa a los componentes pesados.

La presencia de un reactor dentro de una simulación requiere que los componentes de entrada estén perfectamente definidos, puesto que para simular un reactor el ASPEN-PLUS requiere conocer las reacciones que se llevan a cabo con el objetivo de poder hacer un balance atómico.

Entonces, debido a la presencia de reactores en la planta era necesario conocer todos y cada uno de los componentes presentes en la carga.

Por medio de una curva de destilación se pueden caracterizar fracciones de petróleo, para el caso de la simulación de la Reformadora de Naftas ésta opción no era viable, ya que si caracterizábamos al C_6^+ por medio de curvas de destilación íbamos a obtener como resultado una lista de pseudocomponentes con los cuales no podríamos especificar las reacciones efectuadas en el reactor de reformación.

Entonces, la composición de la corriente de entrada se ajustó tomando en cuenta los datos de análisis por componente PONA, proporcionados por el IMP, para un día de operación de la planta así como el peso molecular de la corriente de entrada.

Debido a que el número de componentes que constituyen la corriente de entrada es considerable y tomando en cuenta que para cada componente se tenían que especificar más de una reacción, se determinó reducir el número de componentes presentes en la carga.

Se decidió tomar en cuenta únicamente a los componentes cuyo porcentaje en peso fuera considerable, ajustando dicha composición con el peso molecular promedio de la mezcla.

La composición de la corriente de entrada quedó constituida por los componentes antes mencionados más el n-hexano, isohexano, 3-metil pentano, n- heptano, isoheptano, n-octano,

2-metil heptano, n-nonano, n-decano, benceno, tolueno, etilbenceno, m-xileno, propilbenceno, butilbenceno, ciclohexano, cicloheptano, metil-ciclohexano, etilciclohexano, propilciclohexano y butilciclohexano.

6. Especificación de las condiciones de operación.

En esta etapa se deben especificar todas las condiciones necesarias para que opere adecuadamente cada unidad de operación o módulo. El número de variables a especificarse dependen de la operación que se desea representar. Para cada operación existe un grupo de variables posibles para ser especificadas, de la elección de este conjunto de variables depende la convergencia del proceso.

Por ejemplo, para especificar un intercambiador de calor que maneja una sola corriente de proceso se pueden especificar: temperatura, presión, fracción de vapor, carga, delta de temperatura, grados de subenfriamiento o sobrecalentamiento.

Para una sola fase se debe especificar la presión y una de las siguientes variables: temperatura, delta de temperatura o carga.

Para el caso de dos o tres fases se deben de especificar dos variables permitiendo la siguientes combinaciones:

- Presión y una de las siguientes: temperatura, delta de temperatura, grados de subenfriamiento, grados de sobrecalentamiento, fracción de vapor o carga.
- Temperatura y: presión, fracción de vapor o carga.

- Cambio de temperatura y: presión, fracción de vapor o carga.

El simulador ofrece una lista de combinaciones permitidas para definir cada operación, lo cual no garantiza que el sistema llegue a la convergencia.

7. Especificación de condiciones de diseño.

En esta etapa se debe de tener precaución para no sobre-especificar el proceso, ya que existen muchos casos en los que es necesario conservar las condiciones de diseño para no alterar el funcionamiento del proceso.

8. Definición de los métodos de convergencia.

Cuando en una simulación no se especifican métodos de convergencia el simulador usa los métodos que tiene por default, generando una secuencia de convergencia.

Para la convergencia de las especificaciones de diseño cuando se trata de una sola variable el simulador opera con el método de la secante, mientras que cuando se trata de converger simultáneamente dos o más variables lo hace mediante el método de Broyden.

El simulador cuenta con una variedad de métodos de convergencia que a continuación son enlistados:

Método de Convergencia	Aplicaciones
Método de Wegstein	Convergencia de corrientes de corte
Método de sustitución directa	Convergencia de corrientes de corte
Método de la Secante	Convergencia de las especificaciones de diseño
Método de Broyden	Convergencia de corrientes de corte y/o especificaciones de diseño
Método de Newton	Convergencia de corrientes de corte y/o especificaciones de diseño
Método Complejo	Convergencia de problemas de optimización
Programación cuadrática secuencial	Convergencia de problemas de optimización y/o corrientes de corte

La acertada elección del método asegura la rápida convergencia del proceso.

Para el caso de la Reformadora de Naftas se encontró que tanto el método de Wegstein, sustitución directa y Broyden nos llevaban a la convergencia del proceso en cantidades de iteraciones diferentes.

De lo anterior se observó que con el método de Broyden se obtenía más rápido la convergencia del proceso.

9. Estudio de casos.

Esta es una opción con la que cuenta el simulador ASPEN-PLUS que mediante ella se pueden realizar estudios de sensibilidad variando parámetros claves en la operación de determinados equipos. Esta opción nos permite conocer como varia del proceso con determinados cambios en él.

4.2 RESULTADOS DE LA SIMULACION.

Esta sección tiene la finalidad de mostrar los resultados obtenidos de la simulación de la Planta Reformadora de Naftas.

En la primera parte de esta sección se muestra el diagrama de flujo de proceso del la planta así como el diagrama de bloques y los valores obtenidos de todas las corrientes involucradas.

La figura 4.2.a muestra el diagrama de flujo del proceso seguido en la simulación, mientras que en la tabla 4.2.1 se encuentran los resultados obtenidos de la simulación del proceso.

La segunda parte de esta sección se destinó a hacer una comparación entre las corrientes reportadas en el diagrama de flujo de proceso real y las obtenidas en la simulación.

En la tabla 4.2.2 se muestra la comparación de dichos resultados en los cuales se pueden apreciar diferencias significativas principalmente en flujos, esto fué debido a que se tuvieron que hacer ciertas suposiciones para definir la composición de la corriente de alimentación.

La figura 4.2.b y la 4.2.c muestran los digramas del flujo tanto del proceso real como del simulado, el objetivo de mostrar estos 2 diagramas fué el de mostrar la diferencia en la numeración de las corrientes en dichos diagramas, ya que en la tabla 4.2.2 se hace referencia a estas dos numeraciones.

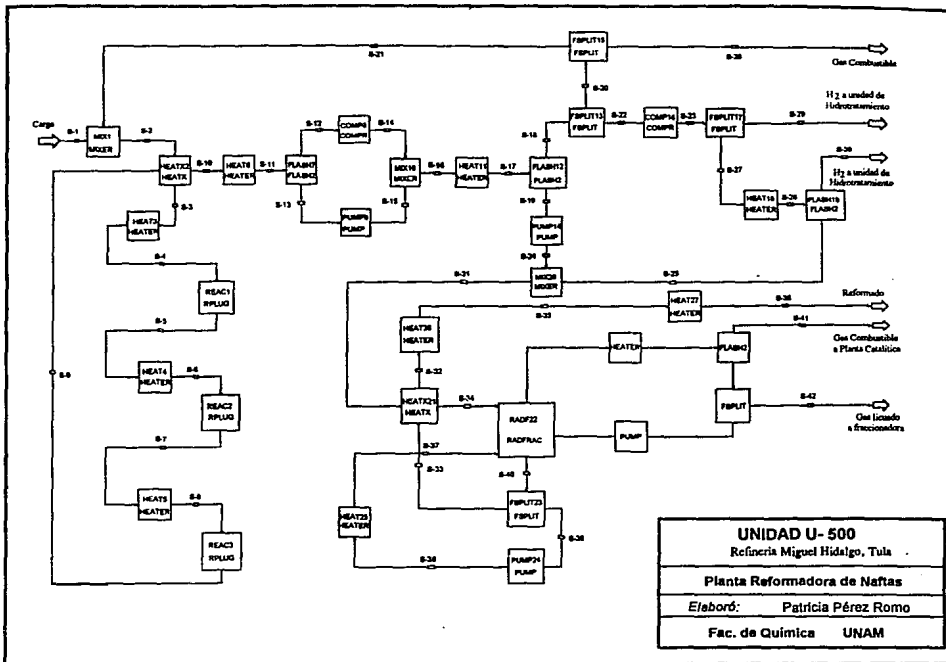


Figura 4.2.a

Tabla 4.2.1

RESULTADOS DE LA SIMULACION

CORRIENTE	S-1	S-2	S-3	S-4	S-5	S-6	S-7
DE:	---	MI	HX3	HH1	R1	H1	R2
A:	MI	HX3	HH1	R1	H1	R2	H2
FASE:	LIQUIDO	MEZCLA	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR
COMPONENTES: LBMOL/HR							
H2O	0	1.7306E-04	1.7306E-04	1.7306E-04	1.7306E-04	1.7306E-04	1.7306E-04
H2S	0	7.7916E-04	7.7916E-04	7.7916E-04	7.7916E-04	7.7916E-04	7.7916E-04
H2	0	1.4168E+04	1.4168E+04	1.4168E+04	1.5396E+04	1.5396E+04	1.5947E+04
CH4	0	1035.5521	1035.5521	1035.5521	1035.5521	1035.5521	1418.1295
C2H6	0	1070.0891	1070.0891	1070.0891	1070.0891	1070.0891	1510.6481
C3H8	0	731.0697	731.0697	731.0697	731.0697	731.0697	1113.4986
C4H10-1	0	374.8453	374.8453	374.8453	374.8453	374.8453	690.0338
C4H10-2	0	32.3135	32.3135	32.3135	32.3135	32.3135	37.2561
C5H12-1	0	180.3748	180.3748	180.3748	180.3748	180.3748	525.718
C5H12-2	0	13.0302	13.0302	13.0302	13.0302	13.0302	20.342
C6+	2837.5	2878.1391	2878.1391	2878.1391	2878.2641	2878.2641	2313.6895
FLUJO TOTAL :							
LBMOL/HR	2837.5	2.0484E+04	2.0484E+04	2.0484E+04	2.1711E+04	2.1711E+04	2.3576E+04
LB/HR	3.2843E+05	4.8065E+05	4.8065E+05	4.8065E+05	4.8066E+05	4.8066E+05	4.8066E+05
CUFT/HR	7980.5402	5.9560E+05	1.5776E+06	1.9111E+06	1.6547E+06	2.0258E+06	2.1464E+06
CONDICIONES:							
TEMP F	200	151.2114	876	1010	820	1010	975
PRES PSI	314.5	195	186.5	169.5	180.5	169.5	169.5
VFRAC	0	0.8563	1	1	1	1	1
LFRAC	1	0.1436	0	0	0	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0
ENTALPIA:							
BTU/LBMOL	-5.3059	2.0495	-3912.9159	-892.6126	-3183.6192	814.3532	425.7904
BTU/LB	-803.6465	-831.2323	-166.7581	-38.0407	-143.8037	36.7842	20.8848
BTU/HR	5.3606	4.0047	-8.02E+07	5.1716	0.0879	1.7681E+07	1.0039E+07
ENTROPIA:							
BTU/LBMOL-	-184.8542	-36.6542	-19.4199	-17.0755	-17.6081	-14.5721	-12.5754
BTU/LB-R	-1.5963	-1.5621	-0.8276	-0.7277	-0.7953	-0.6582	-0.6168
DENSIDAD:							
LBMOL/CUFT	0.3554	3.4392E-02	1.2984E-02	1.0718E-02	1.3121E-02	1.0717E-02	1.0984E-02
LB/CUFT	41.1543	0.8069	0.3046	0.2515	0.2904	0.2372	0.2239
AVG MW	115.7963	23.4646	23.4646	23.4646	22.1386	22.1386	20.3874

Tabla 4.2.1 (cont.)

RESULTADOS DE LA SIMULACION

CORRIENTE	S-8	S-9	S-10	S-11	S-12	S-13	S-14
DE:	H2	R3	HX3	B1	B2	B2	B3
A:	R3	HX3	B1	B2	B3	B4	B5
FASE:	VAPOR	VAPOR	MEZCLA	MIXED	VAPOR	LIQUIDO	VAPOR
COMPONENTES: LBMOL/HR							
H2O	1.7306E-04	1.7306E-04	1.7306E-04	1.7306E-04	1.1858E-04	5.4478E-05	1.1858E-04
H2S	7.7916E-04	7.7916E-04	7.7916E-04	7.7916E-04	7.5172E-04	2.7435E-05	7.5172E-04
H2	1.5947E+04	1.9333E+04	1.9333E+04	1.9333E+04	1.9319E+04	14.3195	1.9319E+04
CH4	1418.1295	1420.0512	1420.0512	1420.0512	1415.0583	4.9929	1415.0583
C2H6	1510.6481	1511.2098	1511.2098	1511.2098	1482.7634	28.4464	1482.7634
C3H8	1113.4986	1116.5144	1116.5144	1116.5144	1052.7147	63.7997	1052.7147
C4H10-1	690.0338	690.6293	690.6293	690.6293	581.8985	108.7308	581.8985
C4H10-2	37.2561	37.2561	37.2561	37.2561	32.9489	4.3072	32.9489
CSH12-1	525.718	527.8577	527.8577	527.8577	341.282	186.5757	341.282
CSH12-2	20.342	20.342	20.342	20.342	14.3168	6.0252	14.3168
C6+	2313.6895	2309.9103	2309.9103	2309.9103	222.9805	2086.7569	222.9805
FLUJO TOTAL :							
LBMOL/HR	2.3576E+04	2.6967E+04	2.6967E+04	2.6967E+04	2.4463E+04	2504.1208	2.4463E+04
LB/HR	4.8066E+05	4.8068E+05	4.8068E+05	4.8068E+05	2.3535E+05	2.4533E+05	2.3535E+05
CUFT/HR	2.3077E+06	2.6291E+06	1.2324E+06	1.0390E+06	1.0436E+06	4972.6479	7.9621E+05
CONDICIONES:							
TEMP F	1010	1004	248.6251	120	120	120	165
PRES PSI	161.5	161.5	146.5	146.5	145.2	145.2	205.2
VFRAC	1	1	0.9768	0.9069	1	0	1
LFRAC	0	0	2.3118E-02	9.3058E-02	0	1	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0
ENTALPIA:							
BTU/LBMOL	1128.4101	4728.8967	-7114.3436	-9668.0568	-8030.5948	-2.5640E+04	-7632.5237
BTU/LB	55.3481	265.3003	-399.1285	-542.3967	-834.7356	-261.7095	-793.3584
BTU/HR	2.6604E+07	1.2752E+08	-1.9185E+08	-2.6072E+08	-1.9645E+08	-6.4206E+07	-1.8671E+08
ENTROPIA:							
BTU/LBMOL-R	-11.9953	-7.1105	-18.4161	-22.1901	-13.2253	-109.5527	-13.2481
BTU/LB-R	-0.5883	-0.3989	-1.0331	-1.2449	-1.3747	-1.1182	-1.377
DENSIDAD:							
LBMOL/CUFT	1.0216E-02	1.0257E-02	2.1881E-02	2.5954E-02	2.3442E-02	0.5035	3.0724E-02
LB/CUFT	0.2082	0.1828	0.39	0.4626	0.2255	49.3365	0.2955
AVG MW	20.3874	17.8246	17.8246	17.8246	9.6205	97.9717	9.6205

Tabla 4.2.1 (cont.)

RESULTADOS DE LA SIMULACION

CORRIENTE	S-15	S-16	S-17	S-18	S-19	S-20	S-21
DE:	B4	B5	B6	B7	B7	B8	B10
A:	B5	B6	B7	B8	B9	B10	B11
FASE:	LIQUIDO	MEZCLA	MEZCLA	VAPOR	LIQUIDO	VAPOR	VAPOR
COMPONENTES: LBMOL/HR							
H2O	5.4478E-05	1.7306E-04	1.7306E-04	8.6534E-05	8.6526E-05	7.8896E-05	1.7306E-04
H2S	2.7435E-05	7.7916E-04	7.7916E-04	7.2793E-04	5.1221E-05	6.6368E-04	7.7916E-04
H2	14.3195	1.9333E+04	1.9333E+04	1.9310E+04	22.9073	1.7606E+04	1.4168E+04
CH4	4.9929	1420.0512	1420.0512	1411.3056	8.7455	1286.7345	1035.5521
C2H6	28.4464	1511.2098	1511.2098	1458.4227	52.787	1329.6928	1070.0891
C3H8	63.7997	1116.5144	1116.5144	996.3032	120.2112	908.3629	731.0697
C4H10-1	108.7308	690.6293	690.6293	496.1586	194.4707	452.3644	364.0642
C4H10-2	4.3072	37.2561	37.2561	29.3474	7.9086	26.757	21.5324
C5H12-1	186.5757	527.8577	527.8577	238.6773	289.1804	217.6101	175.1261
C5H12-2	6.0252	20.342	20.342	10.6055	9.7365	9.6694	7.7815
C6+	2086.7569	2309.9103	2309.9103	100.5212	2209.2006	91.6486	73.7554
FLUJO TOTAL :							
LBMOL/HR	2504.1208	2.6967E+04	2.6967E+04	2.4052E+04	2915.2292	2.1929E+04	1.7648E+04
LB/HR	2.4533E+05	4.8068E+05	4.8068E+05	2.0745E+05	2.7323E+05	1.8913E+05	1.5221E+05
CUFT/HR	4969.1547	7.8581E+05	7.1879E+05	7.2056E+05	5576.4256	6.6026E+05	5.3404E+05
CONDICIONES:							
TEMP F	120.4532	146.6531	100	100	100	99.9779	99.9526
PRES PSI	239.5	203.5	201.5	199.5	199.5	198.5	197.5
VFRAC	0	0.9102	0.8916	1	0	1	1
LFAC	1	8.9755E-02	0.1083	0	1	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0
ENTALPIA:							
BTU/LBMOL	-2.5597E+04	-9300.6652	-1.0073E+04	-7682.5614	-2.9772E+04	-7682.5913	-7682.8835
BTU/LB	-261.2673	-521.7853	-565.1036	-890.7377	-317.6476	-890.7411	-890.7548
BTU/HR	-6.4098E+07	5.4919	-2.7163E+08	-1.8478E+08	-8.6792E+07	-1.6847E+08	-1.3558E+08
ENTROPIA:							
BTU/LBMOL-R	-109.5377	-22.1639	-23.4707	-13.0259	-109.4428	-13.016	-13.0064
BTU/LB-R	-1.118	-1.2434	-1.3167	-1.5102	-1.1676	-1.5091	-1.5079
DENSIDAD:							
LBMOL/CUFT	0.5039	3.4318E-02	3.7517E-02	3.3379E-02	0.5227	3.3213E-02	3.3045E-02
LB/CUFT	49.3712	0.6117	0.6687	0.2878	48.998	0.2864	0.285
AVG MW	97.9717	17.8246	17.8246	8.6249	93.7263	8.6249	8.6251

Tabla 4.2.1 (cont.)

RESULTADOS DE LA SIMULACION

CORRIENTE	S-22	S-23	S-24	S-25	S-26	S-27	S-28
DE:	B8	B11	B9	B14	B13	B12	B10
A:	B11	B12	B15	B15	B14	B13	---
FASE:	VAPOR	VAPOR	LIQUIDO	LIQUIDO	MEZCLA	VAPOR	VAPOR
COMPONENTES: LBMOL/HR							
H2O	7.6381E-06	7.6381E-06	8.6526E-05	2.0468E-07	6.2554E-06	6.2554E-06	1.5403E-05
H2S	6.4252E-05	6.4252E-05	5.1221E-05	1.4316E-07	5.26213E-05	5.2621E-05	1.2957E-04
H2	1704.4511	1704.4511	22.9073	7.6932E-02	1395.9114	1395.9114	3437.2588
CH4	124.571	124.571	8.7455	2.7497E-02	102.0212	102.0212	251.2146
C2H6	128.7299	128.7299	52.787	0.155	105.4272	105.4272	259.6015
C3H8	87.9402	87.9402	120.2112	0.3391	72.0213	72.0213	177.3435
C4H10-1	43.7942	43.7942	194.4707	0.524	35.8665	35.8665	88.317
C4H10-2	2.5904	2.5904	7.9086	2.1788E-02	2.1214	2.1214	5.2238
C5H12-1	21.0672	21.0672	289.1804	0.7336	17.2536	17.2536	42.4849
C5H12-2	0.9361	0.9361	9.7365	2.5218E-02	0.7666	0.7666	1.8878
C6+	8.6664	8.6664	2209.2006	2.1171	7.0976	7.0976	17.7986
FLUJO TOTAL :							
LBMOL/HR	2122.97	2122.97	2915.2292	4.3836	1738.67	1738.67	4081.2593
LB/HR	1.8310E+04	1.8310E+04	2.7323E+05	350.1075	1.4996E+04	1.4996E+04	3.6926E+04
CUFT/HR	6.3921E+04	6.6822E+04	5571.5666	7.5654	2.5612E+04	3.0230E+04	1.2955E+05
CONDICIONES:							
TEMP F	99.9779	200	100.5924	100	100	199.9879	99.9526
PRES PSI	198.5	407.5	322.5	401.5	403.5	406.5	197.5
VFRAC	1	1	0	0	0.9974	1	1
LFRAC	0	0	1	1	2.5487E-03	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0
ENTALPIA:							
BTU/LBMOL	-7682.5913	-6826.7909	-2.9718E+04	-3.8543E+04	-7744.0831	-6826.7909	-7682.649
BTU/LB	-890.7411	-791.5172	-317.0669	-482.5908	-897.8707	-791.5172	-890.7478
BTU/HR	-1.6310E+07	-1.4493E+07	-8.6633E+07	-1.6896E+05	-1.3464E+07	-1.1870E+07	-3.2891E+07
ENTROPIA:							
BTU/LBMOL-R	-13.016	-13.0334	-109.4234	-103.3749	-14.5242	-13.0285	-13.0061
BTU/LB-R	-1.5091	-1.5111	-1.1674	-1.2943	-1.6839	-1.5105	-1.5079
DENSIDAD:							
LBMOL/CUFT	3.3213E-02	5.7656E-02	0.5232	0.5794	6.7885E-02	5.7515E-02	3.3046E-02
LB/CUFT	0.2864	0.4972	49.0407	46.2773	0.5855	0.496	0.285
AVG MW	8.6249	8.6249	93.7263	79.8663	8.6249	8.6249	8.6249

Tabla 4.2.1 (cont.)

RESULTADOS DE LA SIMULACION

CORRIENTE	S-29	S-30	S-31	S-32	S-33	S-34	S-35
DE:	B12	B14	B15	B16	B18	B16	B26
A:	---	---	B16	B26	B16	B17	B27
FASE:	VAPOR	VAPOR	LIQUIDO	LIQUIDO	MEZCLA	LIQUIDO	LIQUIDO
COMPONENTES: LBMOL/HR							
H2O	1.3826E-06	6.0507E-06	8.6731E-05	7.2724E-05	7.27E-05	8.6731E-05	7.2724E-05
H2S	1.1631E-05	5.2478E-05	5.1364E-05	4.2150E-12	4.22E-12	5.1364E-05	4.2150E-12
H2	308.5397	1395.8344	22.9843	2.4051E-17	2.41E-17	22.9843	2.4051E-17
CH4	22.5498	101.9937	8.773	8.5472E-14	8.55E-14	8.773	8.5472E-14
C2H6	23.3026	105.2721	52.9421	7.5617E-08	7.56E-08	52.9421	7.5617E-08
C3H8	15.9189	71.6821	120.5504	9.6632E-04	9.66E-04	120.5504	9.6632E-04
C4H10-1	7.9276	35.3425	194.9947	47.1105	47.1105	194.9947	47.1105
C4H10-2	0.4689	2.0997	7.9304	6.6765E-02	6.68E-02	7.9304	6.6765E-02
CSH12-1	3.8135	16.5199	289.914	289.9117	289.9117	289.914	289.9117
CSH12-2	0.1694	0.7414	9.7617	9.761	9.761	9.7617	9.761
C6+	1.5068	4.6492	2211.681	2211.681	2211.681	2211.681	2211.681
FLUJO TOTAL :							
LBMOL/HR	384.3	1734.2863	2919.6128	2558.6128	2558.6128	2919.6128	2558.6128
LB/HR	3314.5653	1.4646E+04	2.7358E+05	2.5744E+05	2.5744E+05	2.7358E+05	2.5744E+05
CUFT/HR	6681.7251	2.5733E+04	5581.7814	5795.4206	7850.4314	6623.7635	5197.849
CONDICIONES:							
TEMP F	199.9879	100	100.8162	292.6623	483.4613	320.2446	130
PRES PSI	406.5	401.5	285.5	270	270	283.5	249.5
VFRAC	1	1	0	0	4.2453E-03	0	0
LFRAC	0	0	1	1	0.9957	1	1
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0
ENTALPIA:							
BTU/LBMOL	-6826.7909	-7665.6562	-2.9731E+04	-1.7466E+04	-5689.4999	-1.9411E+04	1.4534
BTU/LB	-791.5172	-907.7294	-317.2798	-173.5893	-56.5469	-207.1456	-253.104
BTU/HR	-2.6235E+06	-1.3294E+07	-8.6803E+07	-4.4688E+07	-1.4557E+07	-5.6672E+07	0.4842
ENTROPIA:							
BTU/LBMOL-R	-13.0285	-14.2888	-109.3905	-100.1799	-86.3033	-93.9714	-112.1006
BTU/LB-R	-1.5105	-1.692	-1.1673	-0.9956	-0.8577	-1.0028	-1.1141
DENSIDAD:							
LBMOL/CUFT	5.7515E-02	6.7395E-02	0.523	0.4414	0.3259	0.4407	0.4922
LB/CUFT	0.496	0.5691	49.0137	44.4206	32.7926	41.3033	49.5274
AVG MW	8.6249	8.4448	93.7055	100.6154	100.6154	93.7055	100.6154

Tabla 4.2.1 (cont.)

RESULTADOS DE LA SIMULACION

CORRIENTE	S-36	S-37	S-38	S-39	S-40	S-41	S-42
DE:	B27	B24	B23	B18	B17	B17	B17
A:	---	B17	B24	B23	B18	---	---
FASE:	LIQUIDO	MEZCLA	LIQUIDO	MEZCLA	LIQUIDO	VAPOR	LIQUIDO
COMPONENTES: LBMOL/HR							
H2O	7.2724E-05	1.6485E-04	1.6485E-04	1.6485E-04	2.3758E-04	5.0564E-07	1.3669E-05
H2S	4.2150E-12	9.5548E-12	9.5548E-12	9.5548E-12	1.3770E-11	1.1105E-05	4.0259E-05
H2	2.4051E-17	5.4521E-17	5.4521E-17	5.4521E-17	7.8572E-17	20.2771	2.7071
CH4	8.5472E-14	1.9375E-13	1.9375E-13	1.9375E-13	2.7923E-13	5.6868	3.0862
C2H6	7.5617E-08	1.7141E-07	1.7141E-07	1.7141E-07	2.4703E-07	15.359	37.583
C3H8	9.6632E-04	2.1905E-03	2.1905E-03	2.1905E-03	3.1568E-03	14.5389	106.0104
C4H10-1	47.1105	106.7925	106.7925	106.7925	153.903	6.6302	141.254
C4H10-2	6.6765E-02	0.1513	0.1513	0.1513	0.2181	0.466	7.3976
C5H12-1	289.9117	657.1874	657.1874	657.1874	947.0992	3.7307E-05	2.2735E-03
C5H12-2	9.761	22.1267	22.1267	22.1267	31.8877	1.5369E-05	7.3799E-04
C6+	2211.681	5013.7388	5013.7388	5013.7388	7225.5001	0	0
FLUJO TOTAL :							
LBMOL/HR	2538.6128	5800	5800	5800	8358.6128	62.9584	298.0416
LB/HR	2.5744E+05	5.8357E+05	5.8357E+05	5.8357E+05	8.4101E+05	1647.5563	1.4500E+04
CUFT/HR	5120.5613	1.4321E+05	1.7209E+04	1.7796E+04	2.4825E+04	1234.8126	430.113
CONDICIONES:							
TEMP F	100	532.4254	484.1028	483.4613	483.924	85.7421	85.7421
PRES PSI	241.5	272.5	280	270	271.5	266.5	266.5
VFRAC	0	0.8933	0	4.2453E-03	0	1	0
LFRAC	1	0.1067	1	0.9957	1	0	1
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0
ENTALPIA:							
BTU/LBMOL	1.3232	5132.7403	-5683.0325	-5689.4999	-5689.4992	-2.8495E+04	-5.5343E+04
BTU/LB	-266.0404	51.0134	-56.4826	-56.5469	-56.5469	-1088.9016	-1137.5408
BTU/HR	0.1512	2.9770E+07	3.7038	3.7001	-4.7556E+07	-1.7940E+06	-1.6495E+07
ENTROPIA:							
BTU/LBMOL-R	-114.3605	-75.1498	-86.3023	-86.3033	-86.3042	-39.5408	-86.8883
BTU/LB-R	-1.1366	-0.7469	-0.8577	-0.8577	-0.8577	-1.5109	-1.7859
DENSIDAD:							
LBMOL/CUFT	0.4996	4.0501E-02	0.337	0.3259	0.3367	5.0986E-02	0.6929
LB/CUFT	50.2749	4.075	33.9109	32.7926	33.8767	1.3342	33.7127
AVG MW	100.6154	100.6154	100.6154	100.6154	100.6154	26.1689	48.6518

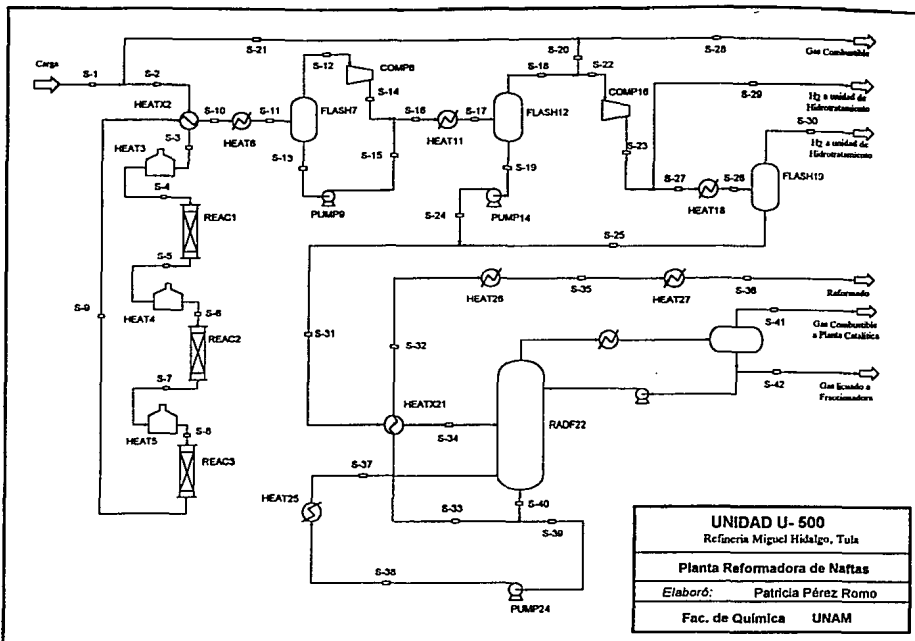


Figura 4.2.c

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2

CORRIENTE:	Simulación S-1	Real C-1	Error %	Simulación S-3	Real C-2	Error %
DE :	---			HX3		
A:	M1			HH1		
FASE:	LIQUIDO			VAPOR		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	0	0		0.00017306	0.28	
H2S	0	0		7.7916E-04	0.03	
H2	0	0		14168	14187.88	0.140119595
CH4	0	0		1035.5521	1073.01	3.490918072
C2H6	0	0		1070.0891	1014.86	5.442041267
C3H8	0	0		731.0697	692.73	5.534580573
C4H10-1	0	0		374.8453	168.15	
C4H10-2	0	0		32.3135	205.29	
C5H12-1	0	0		180.3748	94.81	
C5H12-2	0	0		13.0302	50.8	
C6+	2837.5	2837.57	0.002466899	2878.1391	2997.3	3.975608047
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	2837.5	2837.57	0.002466899	2.0484E+04	20485.14	0.00556501
CONDICIONES:						
TEMP F	200	200	0	876	876	0
PRES PSI	314.5	314.5	0	186.5	186.5	0
AVG MW	115.7963	115.8	0.003195164	23.4646	23.5	0.150638298

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

CORRIENTE:	Simulación	Real	Error	Simulación	Real	Error
DE :	S-9	C-3	%	S-12	C-4	%
A:	R3			B2		
FASE:	HX3			B3		
	VAPOR			VAPOR		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	1.7306E-04	0.37		1.1858E-04	0.34	
H2S	7.7916E-04	0.04		7.5172E-04	0.04	
H2	1.9333E+04	17773.29	8.775584036	1.9319E+04	17767.29	8.733520982
CH4	1420.0512	1354.14	4.867384465	1415.0583	1348.6	4.927947501
C2H6	1511.2098	1317.44	14.70805502	1482.7634	1291.78	14.78451439
C3H8	1116.5144	980.56	13.86497512	1052.7147	920.46	14.36832671
C4H10-1	690.6293	274.64		581.8985	238.55	
C4H10-2	37.2561	365.03		32.9489	303.8	
C5H12-1	527.8577	237.41		341.282	162.01	
C5H12-2	20.342	145.87		14.3168	92.34	
C6+	2309.9103	2638.97	12.46924747	222.9805	375.85	40.67300785
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	26967	25092.76	7.469246109	2.4463E+04	22500.52	8.72193176
CONDICIONES:						
TEMP F	1004	1004	0	120	120	0
PRES PSI	161.5	161.5	0	145.2	142.5	0
AVG MW	17.8246	19.2	7.163541667	9.6205	9.7	0.819587629

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

CORRIENTE:	Simulación S-15	Real C-5	Error %	Simulación S-17	Real C-6	Error %
DE :	B4			B6		
A:	B5			B7		
FASE:	LIQUIDO			MIXED		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	5.4478E-05	0.03		1.7306E-04	0.37	
H2S	2.7435E-05	0		7.7916E-04	0.04	
H2	14.3195	11		1.9333E+04	17778.29	8.744991785
CH4	4.9929	6.08		1420.0512	1354.14	4.867384465
C2H6	28.4464	25.66		1511.2098	1317.44	14.70805502
C3H8	63.7997	60.1		1116.5144	980.56	13.86497512
C4H10-1	108.7308	36.09		690.6293	274.64	
C4H10-2	4.3072	61.23		37.2561	365.03	
C5H12-1	186.5757	75.4		527.8577	237.41	
C5H12-2	6.0252	53.53		20.342	145.87	
C6+	2086.7569	2263.12	7.792918626	2309.9103	2638.97	12.46924747
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	2504.1208	2592.24	3.39934574	2.6967E+04	25092.76	0
CONDICIONES:						
TEMP F	120.4532	120	0.377666667	100	100	0
PRES PSI	239.5	239.5	0	201.5	201.5	0
AVG MW	97.9717	101.3	3.285587364	17.8246	19.2	7.163541667

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

CORRIENTE:	Simulación S-28	Real C-7	Error %	Simulación S-18	Real C-8	Error %
DE :	B10			B7		
A:	----			B8		
FASE:	VAPOR			VAPOR		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	1.5403E-05	0.04		8.6534E-05	0.35	
H2S	1.2957E-04	0.01		7.2793E-04	0.04	
H2	3437.2588	2863.63		1.9310E+04	17760.8	8.722580064
CH4	251.2146	141.79		1411.3056	1343.19	5.071181292
C2H6	259.6015	134.19		1458.4227	1270.43	14.7975646
C3H8	177.3435	91.54		996.3032	867.18	14.8900113
C4H10-1	88.317	22.35		496.1586	210.49	
C4H10-2	5.2238	27.25		29.3474	256.99	
C5H12-1	42.4849	12.41		238.6773	118.69	
C5H12-2	1.8878	6.65		10.6055	63.59	
C6+	17.7986	21.3		100.5212	199.96	
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	4081.2593	3321.16	18.62413643	2.4052E+04	22091.71	8.873419034
CONDICIONES:						
TEMP F	99.9526	100	0.047422478	100	100	0
PRES PSI	197.5	197.5	0	199.5	199.5	0
AVG MW	8.6249	8.6	0.289534884	8.6249	8.6	0.289534884

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

CORRIENTE:	Simulación S-21	Real C-9	Error %	Simulación S-29	Real C-10	Error %
DE :	B10			B12		
A:	M1			---		
FASE:	VAPOR			VAPOR		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	1.7306E-04	0.29		1.3826E-06	0	
H2S	7.7916E-04	0.03		1.1631E-05	0	
H2	1.4168E+04	14187.88	0.140119595	308.5397	308.98	0.142501133
CH4	1035.5521	1073.01	3.490918072	22.5498	23.37	3.509627728
C2H6	1070.0891	1014.86	5.442041267	23.3026	22.1	5.441628959
C3H8	731.0697	692.73	5.534580573	15.9189	15.1	5.423178808
C4H10-1	364.0642	168.15		7.9276	3.65	
C4H10-2	21.5324	205.29		0.4689	4.46	
C5H12-1	175.1261	94.81		3.8135	2.08	
C5H12-2	7.7815	50.8		0.1694	1.1	
C6+	73.7554	159.73		1.5068	3.46	
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	1.7648E+04	17647.58	0.00237993	384.3	384.3	0
CONDICIONES:						
TEMP F	99.9526	100	0.0474	199.9879	200	0.00605
PRES PSI	197.5	197.5	0	406.5	406.5	0
AVG MW	8.6251	8.6	0.291860465	8.6249	8.6	0.289534884

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

CORRIENTE:	Simulación	Real	Error	Simulación	Real	Error
DE :	S-30	C-11	%	S-24	C-12	%
A:	B14			B9		
FASE:	----			B15		
	VAPOR			LIQUIDO		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	6.0507E-06	0.02		8.6526E-05	0.02	
H2S	5.2478E-05	0		5.1221E-05	0	
H2	1395.8344	1397.22	0.099168349	22.9073	17.49	
CH4	101.9937	104.79	2.668479817	8.7455	10.95	
C2H6	105.2721	99.06	6.27104785	52.787	47.01	
C3H8	71.6821	67.66	5.94457582	120.2112	113.38	
C4H10-1	35.3425	16.3		194.4707	64.15	
C4H10-2	2.0997	19.95		7.9086	108.04	
C5H12-1	16.5199	9.37		289.1804	118.72	
C5H12-2	0.7414	5.03		9.7365	82.28	
C6+	4.6492	15.44		2209.2006	2439.01	9.422240991
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	1734.2863	1734.84	0.031916488	2915.2292	3001.05	2.859692441
CONDICIONES:						
TEMP F	100	100	0	100.5924	100	0.5924
PRES PSI	401.5	401.5	0	322.5	322.5	0
AVG MW	8.4448	8.5	0.649411765	93.7263	96.7	3.075180972

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

CORRIENTE:	Simulación S-36	Real C-13	Error %	Simulación S-38	Real C-14	Error %
DE :	827			B23		
A:	----			B24		
FASE:	LIQUIDO			LIQUIDO		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	7.2724E-05			1.6485E-04		
H2S	4.2150E-12			9.5548E-12		
H2	2.4051E-17			5.4521E-17		
CH4	8.5472E-14			1.9375E-13		
C2H6	7.5617E-08			1.7141E-07		
C3H8	9.6632E-04			2.1905E-03		
C4H10-1	47.1105			106.7925		
C4H10-2	6.6765E-02			0.1513		
C5H12-1	289.9117	118.72		657.1874	262.4	
C5H12-2	9.761	82.28		22.1267	181.86	
C6+	2211.681	2439.01	9.320543991	5013.7388	5390.84	6.995221524
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	2558.6128	2640.01	3.083215594	5800	5835.1	0.601532107
CONDICIONES:						
TEMP F	100	100	0	484.1028	486	0.39037037
PRES PSI	241.5	241.5	0	280	280	0
AVG MW	100.6154	103.6	2.880888031	100.6154	103.6	2.880888031

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

	Simulación	Real	Error	Simulación	Real	Error
CORRIENTE:	S-41	C-15	%	S-42	C-16	%
DE :	B17			B17		
A:	----			----		
FASE:	VAPOR			LIQUIDO		
COMPONENTES: LBMOL/HR						
H2O	5.0564E-07	0.02		1.3669E-05	0	0
H2S	1.1105E-05	0		4.0259E-05	0	0
H2	20.2771	15.92	27.36871859	2.7071	1.57	72.42675159
CH4	5.6868	6.92	17.82080925	3.0862	4.03	23.41935484
C2H6	15.359	13.88	10.6556196	37.583	33.13	13.44099004
C3H8	14.5389	15.47	6.01874596	106.0104	97.91	8.273312226
C4H10-1	6.6302	4.71	40.76857749	141.254	59.44	87.64131898
C4H10-2	0.466	6.05		7.3976	101.99	92.74673988
C5H12-1	3.7307E-05	0	0	2.2735E-03	0	0
C5H12-2	1.5369E-05	0	0	7.3799E-04	0	0
C6+	0	0	0	0	0	0
FLUJO TOTAL :						
LBMOL/HR	62.9584	62.97	0.018421471	298.0416	298.07	0.009527963
CONDICIONES:						
TEMP F	85.7421	77	11.35337662	85.7421	100	14.2579
PRES PSI	266.5	266.5	0	266.5	266.5	0
AVG MW	26.1689	29.7	11.88922559	48.6518	49.5	1.713535354

COMPARACION DE RESULTADOS

tabla 4.2.2 (cont.)

	Simulación	Real	Error
CORRIENTE:	S-27	C-17	%
DE :	B12		
A:	B13		
FASE:	VAPOR		
COMPONENTES: LBMOL/HR			
H2O	6.2554E-06	0.02	
H2S	5.2621E-05	0	
H2	1395.9114	1400.31	0.31411616
CH4	102.0212	105.02	2.855456104
C2H6	105.4272	99.28	6.191780822
C3H8	72.0213	67.81	6.210440938
C4H10-1	35.8665	16.34	
C4H10-2	2.1214	19.99	
C5H12-1	17.2536	9.39	
C5H12-2	0.7666	5.04	
C6+	7.0976	15.47	
FLUJO TOTAL :			
LBMOL/HR	1738.67	1738.67	0
CONDICIONES:			
TEMP F	199.9879	200	0.00605
PRES PSI	406.5	406.5	0
AVG MW	8.6249	8.6	0.289534884

4.3 APLICACIONES DE LOS MÉTODOS DE CONVERGENCIA.

Los procesos que involucran ciclos de recirculación, especificaciones de diseño o problemas de optimización deben de ser resueltos iterativamente para lo cual debemos de determinar los métodos de convergencia, corrientes de corte y secuencia de cálculo.

Esta sección pretende hacer una breve descripción de los métodos de convergencia disponibles en ASPEN-PLUS.

Método de Wegstein.

Este método tiene como principal característica que casi siempre converge rápidamente, es además el método usado por default en la convergencia de los bloques. El método de Wegstein puede ser aplicado a cualquier número de corrientes simultáneamente pudiendo además controlar los límites del método así como la frecuencia de aceleración.

Método de Sustitución Directa.

El método de sustitución directa converge lentamente pero de manera segura. Es usado para los casos raros en los cuales otros métodos resultan inestables.

Método de la Secante.

El método de la secante tiene como característica una opción que automáticamente se activa para reducir los intervalos si la función es discontinua. Este método se usa para converger una sola especificación de diseño.

Método de Broyden.

El método de Broyden puede usarse para converger corrientes de corte, dos o más especificaciones de diseño ó corrientes de corte y especificaciones de diseño simultáneamente.

Este método se recomienda usarse cuando se tienen múltiples corrientes de corte y/o especificaciones de diseño, cuando las variables son altamente independientes o cuando los loops de recirculación y especificaciones de diseño están fuertemente interrelacionadas.

Método de Newton.

Es una implementación del método modificado de Newton para ecuaciones simultáneas no lineales. Las derivadas son calculadas solamente cuando la velocidad de convergencia no es satisfactoria. Se recomienda dicho método cuando los loops de recirculación y/o las especificaciones de diseño están fuertemente interrelacionadas siendo el método de Broyden incapaz de converger. Desde que las derivadas numéricas son calculadas frecuentemente, se recomienda usar éste método para corrientes de corte solamente cuando el número de componentes es muy pequeño o cuando la convergencia no puede ser alcanzada por otros métodos.

Método Complejo.

Este método se usa cuando se tienen problemas de optimización con confinamiento de las variables manipuladas y opcionalmente, desigualdad de restricciones, es un método de búsqueda directa, no requiriendo evaluar numéricamente las derivadas. Puede ser usado en problemas simples sin loops de recirculación o igualdad de restricciones (especificaciones de diseño)

Método SQP.

El método de programación cuadrática secuencial puede ser usado para converger simultáneamente problemas de optimización con igualdad o desigualdad de restricciones y/o

corrientes de corte. El algoritmo generalmente sigue un camino imposible (se hacen converger simultáneamente las restricciones y corrientes de corte el problema de optimización), pero puede ser ajustado para seguir un camino factible (convirgiendo las corrientes de corte) en cada iteración de la optimización.

En el proceso de reformación catalítica de naftas se observó la existencia de cuatro ciclos de recirculación los cuales se muestran en el diagrama 4.3.1..

La Reformadora de Naftas se simuló utilizando los diferentes métodos de convergencia en los ciclos presentes. En las figuras 4.3.2, 4.3.3 y 4.3.4 se muestra una gráfica de la promoción a la convergencia utilizando el método de sustitución directa, Wegstein y Broyden respectivamente.

En estas gráficas se puede apreciar que el método de Broyden fué el que proporcionó mejores resultados teniendo además una convergencia más rápida.

Con el método de Wegstein también se logró llegar a la convergencia, aunque con un mayor número de iteraciones.

En tanto que con el método de sustitución directa, se observa que hay un estancamiento antes de obtenerse la convergencia del ciclo.

Con el método de Newton no se logró alcanzar la convergencia, es por esto que no se muestra la gráfica de este método.

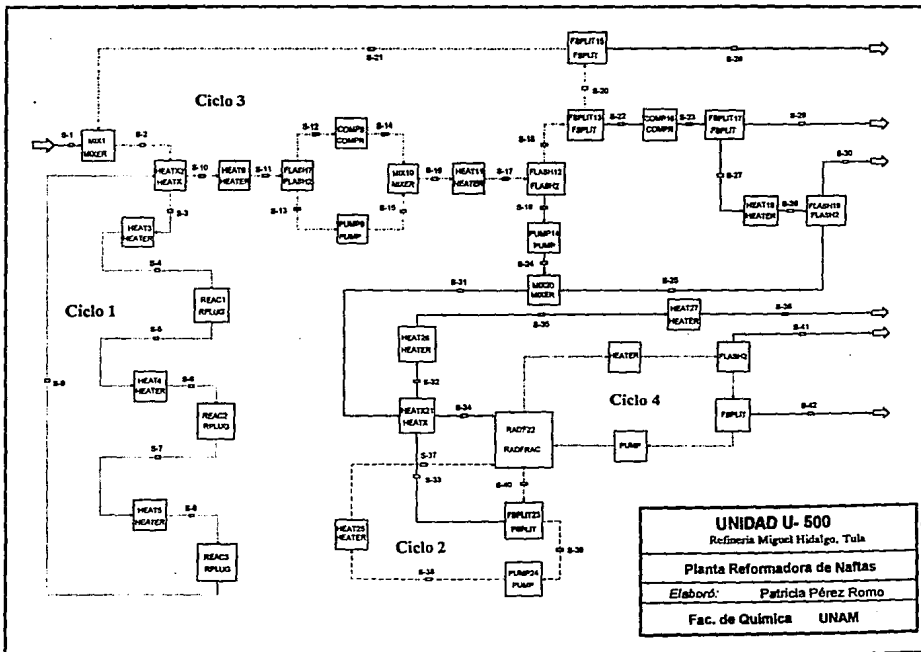


Figura 4.3.1

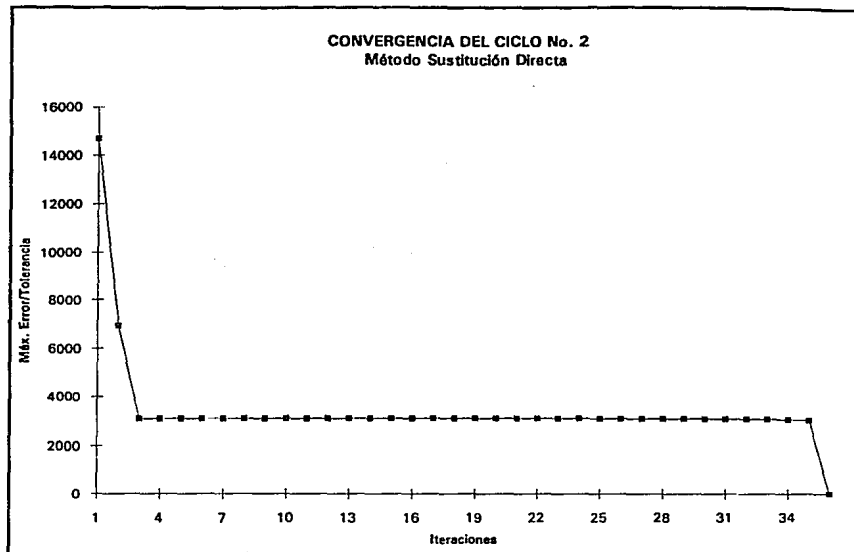


Figura 4.3.2

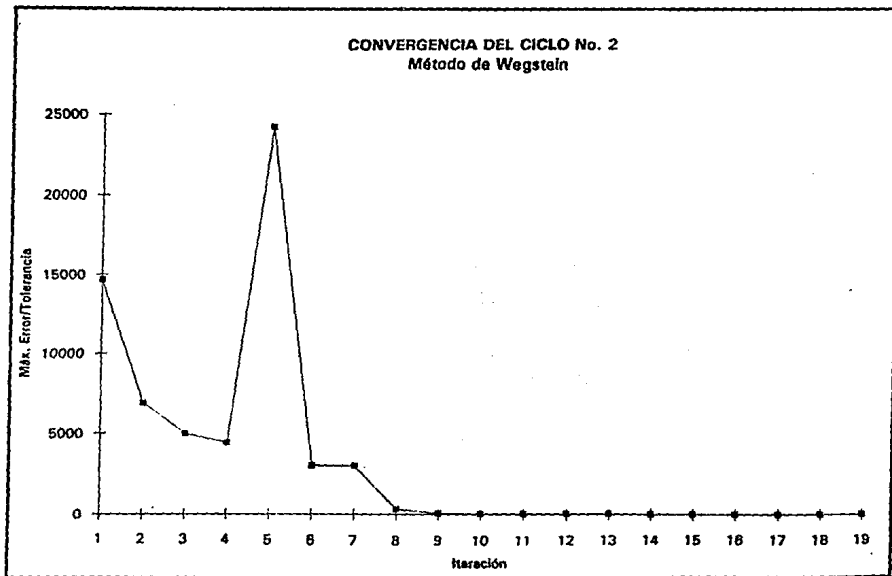


Figura 4.3.3

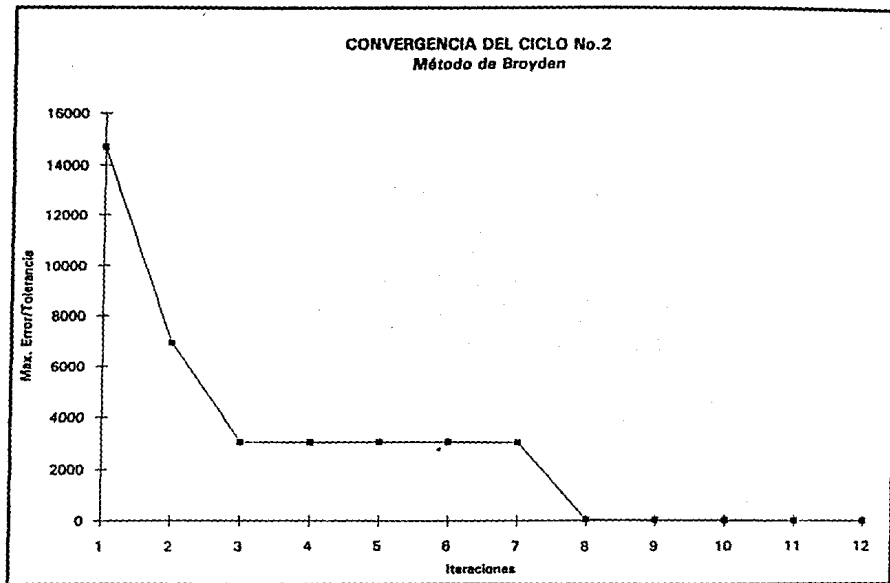


Figura 4.3.4

FUNDAMENTOS
TERMODINÁMICOS

5.1 ANTECEDENTES

El concepto de exergía fué desarrollado en la Unión Soviética y Europa Oriental, especialmente en Alemania y Polonia. En la actualidad su uso se ha extendido notablemente además en Francia, Estados Unidos y Japón.

La primera referencia del uso del término Exergía se debe a Rant en 1956. Anteriormente el concepto de exergía se usaba como sinónimo de Capacidad de Trabajo ó Trabajo Disponible; desde entonces el término se utiliza para proveer un desarrollo integrado de los principios de la segunda ley de la termodinámica, aplicada a sistemas industriales reales.

En la década de los sesenta, fueron establecidos los fundamentos del método de exergía gracias a los trabajos de diferentes investigadores que aparecieron tanto en libros, artículos y reportes técnicos.

En 1960, Bosnjakov presentó el análisis de exergía de una planta de potencia, usando el diagrama entalpía-entropía para reportar sus resultados.

En 1961, Trepp examinó la pérdida de exergía en máquinas de refrigeración a baja temperatura en un documento presentado en una conferencia de ingeniería criogénica. Trepp utilizó las pérdidas de exergía para desarrollar el diseño óptimo de un ciclo de refrigeración.

En 1962, Baehr presentó sus resultados analíticos comparando diagramas de flujo de exergía con diagramas de energía calculados por medio de un balance entálpico convencional.

En 1963, Brodyanskii escribió dos trabajos sobre sistemas de licuefacción de aire en los que analizó el sistema Linde, mostrando la localización, el tipo y la magnitud de las pérdidas de exergía del sistema.

En 1964, Tribus y sus colaboradores en el Dartmouth College usaron el método de exergía para el diseño térmoeconómico de sistema de agua salina.

Los trabajos más recientes en este campo han sido desarrollados por ingenieros soviéticos, norteamericanos, chinos, japoneses, franceses y canadienses, y han sido enfocados principalmente a sistemas de refrigeración y sistemas de combustión.

La exergía es una función de estado termodinámica que mide el trabajo disponible en un fluido o masa, al llevarla de su estado a un estado de equilibrio con alguna condición de referencia mediante un proceso reversible. Esta condición se conoce como estado muerto y generalmente, es el medio ambiente que rodea al sistema. En esta condición el sistema ya no es capaz de producir más trabajo útil.

La exergía es, entonces, el trabajo máximo que un proceso es capaz de producir con respecto al ambiente.

La ecuación general de balance de exergía involucra cuatro contribuciones principales a la energía disponible, que son: exergía asociada con trabajo, exergía asociada con un intercambio de calor, exergía asociada con un flujo másico y exergía asociada con una transformación física o química. La suma de estas cuatro contribuciones iguala al término de producción entrópica, que se genera por las diferentes irreversibilidades de los procesos.

Desde el punto de vista termodinámico, un determinado proceso puede considerarse como un sistema abierto, el cual puede recibir o liberar, por unidad de tiempo, diferentes cantidades de masa, trabajo mecánico y calor a diferentes niveles de temperatura; pudiendo intercambiar calor con el exterior.

Aplicando balances de entalpía y entropía a este sistema, se obtiene la ecuación general de balance de energía, en un proceso en estado estable:

$$W + Q = \sum h_s m_s - \sum h_e m_e$$

W = potencia

h_s = entalpía de salida

Q = flujo de calor

m_e = flujo másico de entrada

h_e = entalpía de entrada

m_s = flujo másico de salida

5.2 METODO DE EXERGÍA

Tradicionalmente, los estudios de conservación y ahorro de energía se efectúan únicamente en base al balance de calor o balance entálpico convencional soportado por la primera ley de la termodinámica. Sin embargo, la termodinámica contempla más principios, de manera que esta metodología es incompleta.

El método convencional desprecia la variación en la calidad de la energía a todo lo largo del sistema y consecuentemente las pérdidas e ineficiencias no pueden evaluarse de manera realista.

Usando solamente el balance de energía no pueden lograrse medidas efectivas de conservación de energía ni pueden obtenerse mejoras en el funcionamiento y la eficiencia de un sistema.

El método de exergía es una manera sistemática de aplicar los principios de la primera y la segunda leyes de la termodinámica al diseño y evaluación de procesos y equipos industriales.

Constituye además el procedimiento adecuado para realizar estudios económicos de sistemas energéticos, que elimina la falta de precisión de las evaluaciones basadas únicamente en el balance energético convencional de la primera ley.

El objetivo final del método de exergía es lograr que todo sistema energético sea económico y eficiente, y su aplicación va desde el diseño de sistemas nuevos hasta la evaluación y modificación de sistemas existentes.

El método de exergía para el análisis de sistemas energéticos, es una manera sistemática de aplicar la primera y la segunda leyes de la termodinámica a sus procesos y equipos industriales. Sus fundamentos están envueltos en los principios de la producción entrópica y de la segunda ley de la termodinámica.

El método de exergía tiene varias ventajas sobre el método convencional de diseño y análisis de sistemas energéticos. En primer lugar, proporciona una medición más precisa de las ineficiencias reales en el sistema y la verdadera localización de las mismas.

El método determina además la eficiencia real de sistemas abiertos y de sistemas complejos de ciclo combinado, en los que el balance entálpico convencional sólo considera el número de unidades de energía transferida, joules, por ejemplo, ignorando la calidad de la energía involucrada.

La aplicación del método a un sistema, está determinada por la necesidad de mejorar la eficiencia en el uso de la energía. Estas mejoras deben ser aceptables económicamente y además, deben producir ganancias en la conservación de energía. Los sistemas existentes en operación deben analizarse con el método de exergía para evaluar las áreas del proceso en las que pueden

hacerse mejoras efectivas en la eficiencia energética, para ahorrar energía y reducir los costos globales de operación del sistema.

El diseño de sistemas energéticos futuros deberán enfatizar la eficiencia y la conservación de energía en mayor medida que en el pasado debiendo ser por esto, más complejos debido a la integración de varios sub-sistemas para maximizar el uso de los recursos energéticos disponibles.

El diseño de sistemas energéticos debe basarse en el aspecto económico, debiendo evaluarse más rigurosamente, considerando los costos de ciclo de vida para el combustible, factores importantes en el análisis.

La conservación de los recursos energéticos puede lograrse incrementando la eficiencia en la que se utilizan los recursos disponibles. Para incrementar la eficiencia de un proceso existente, es necesario generalmente, modificar una pieza de un equipo o cambiar el procedimiento de operación, lo cual requiere de una determinada inversión.

Entonces, es importante determinar los puntos dentro del sistema en donde se obtiene el máximo beneficio utilizando los recursos económicos disponibles. Para lograr esto, es necesario determinar las características de operación del fluido de trabajo en diferentes sectores del sistema. Las pérdidas involucradas en cada proceso, pueden entonces evaluarse, así como su relación con la eficiencia global del sistema. A partir de este conocimiento pueden tomarse las decisiones prácticas que mejorarán la eficiencia del sistema.

5.3 TRABAJO PERDIDO

La energía que se vuelve inaprovechable para producir trabajo como resultado de las irreversibilidades de un proceso recibe el nombre de trabajo perdido, definiéndose como la diferencia entre el trabajo real (equivalente) y el trabajo ideal para determinado proceso, entonces,

$$W_{\text{perdido}} = W_{\text{equivalente}} - W_{\text{ideal}}$$

sabiendo que,

$$W_{\text{equivalente}} = W + Q(1 - T_0 / T)$$

$$W_{\text{ideal}} = \Delta H - T_0 \Delta S$$

$$S_{\text{generada}} = \Delta S - (Q / T)$$

por tanto,

$$W_{\text{perdido}} = T_0 S_{\text{generada}}$$

El factor $(1 - T_0 / T)$ en el término de calor Q se debe a que el calor no tiene la misma *calidad* energética que el trabajo. Este factor pone en igualdad, desde el punto de vista de calidad, al calor y al trabajo.

La última ecuación asocia directamente a la generación de entropía, debida a las irreversibilidades termodinámicas del proceso, con el trabajo perdido. Por tanto, la eficiencia en el uso de la energía depende de las irreversibilidades termodinámicas, las cuales deben disminuirse para mejorar la economía energética del proceso.

En la tabla 5.3.1 se calcula el trabajo perdido en los diferentes equipos de que consta el proceso.

Trabajo Perdido en el Proceso Actual

Tabla 5.3.1

Equipo	Corrientes de entrada	Corrientes de salida	Cambio de Entalpia (BTU/hr)	Cambio de Entropia (BTU/hr-R)	Calor (BTU/hr)	Trabajo (BTU/hr)	Trabajo Equivalente (BTU/hr)	Trabajo Eq. minimo (BTU/hr)	Entropia Generada (BTU/hr-R)	Trabajo Perdido (BTU/hr)	% del Total
Mescladores											
MDX1	S1,S21	S2	-1.62E+01	3.37E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-1.78E+06	3.37E+03	1.78E+06	3.43
MDX10	S14,S15	S16	-4.78E+01	6.47E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-3.63E+05	6.47E+02	3.63E+05	0.70
MDX20	S24,S25	S31	-2.83E+02	6.93E+01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-3.69E+04	6.93E+01	3.66E+04	0.07
Divisores											
FSPLIT13	S18	S20,S22	1.49E+08	2.20E-11	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	3.30E-09	2.20E-11	1.16E-08	0.00
FSPLIT15	S20	S21,S28	-4.14E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-4.14E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00
FSPLIT17	S23	S27,S29	1.40E-09	4.81E-12	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-1.14E-09	4.81E-12	2.54E-09	0.00
FSPLIT23	S40	S33,S39	2.41E+02	2.70E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	9.86E+01	2.70E-01	1.42E+02	0.00
Intercambiadores de calor (con servicios)											
HEAT3	S3	S4	6.19E+07	4.80E+04	6.19E+07	0.00E+00	3.77E+07	3.65E+07	2.19E+03	1.16E+06	2.24
HEAT4	S5	S6	8.68E+07	6.59E+04	8.68E+07	0.00E+00	5.29E+07	5.20E+07	1.62E+03	8.55E+05	1.65
HEAT5	S7	S8	1.66E+07	1.37E+04	1.66E+07	0.00E+00	1.01E+07	9.34E+06	1.41E+03	7.42E+05	1.43
HEAT6	S10	S11	-6.89E+07	-1.06E+05	-6.89E+07	0.00E+00	-4.18E+06	-1.31E+07	1.37E+04	6.90E+06	13.31
HEAT11	S16	S17	-2.08E+07	-3.52E+04	-2.08E+07	0.00E+00	-1.26E+06	-2.22E+06	1.80E+03	9.53E+05	1.84
HEAT18	S27	S26	-1.59E+06	-2.59E+03	-1.59E+06	0.00E+00	-9.67E+04	-2.26E+05	2.45E+02	1.30E+05	0.25
HEAT26	S32	S35	-2.05E+07	-3.05E+04	-2.05E+07	0.00E+00	-1.24E+06	-4.37E+06	4.79E+03	2.53E+06	4.88
HEAT37	S35	S36	-3.33E+06	-5.78E+03	-3.33E+06	0.00E+00	-2.02E+05	-2.77E+05	1.43E+02	7.54E+04	0.15
HEAT25	S38	S37	6.27E+07	6.47E+04	6.27E+07	0.00E+00	2.94E+07	2.86E+07	1.47E+03	7.78E+05	1.50
Intercambiadores de calor de proceso											
HEATX2	S2,S9	S3,S10	2.18E+04	2.18E+04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-1.15E+07	2.18E+04	1.15E+07	22.23
HEATX21	S31,S33	S32,S34	1.14E+01	9.51E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	-5.02E+06	9.51E+03	5.02E+06	9.69
Bombas											
PUMP9	S13	S15	1.08E+05	3.75E+01	0.00E+00	1.08E+05	1.08E+05	8.87E+04	3.75E+01	1.98E+04	0.04
PUMP14	S19	S24	1.59E+05	5.68E+01	0.00E+00	1.59E+05	1.59E+05	1.29E+05	5.68E+01	3.00E+04	0.06
PUMP24	S39	S38	3.19E+04	5.08E+00	0.00E+00	3.19E+04	3.19E+04	2.92E+04	5.08E+00	2.68E+03	0.01
Compresores											
COMP8	S12	S14	-9.74E+06	5.58E+02	0.00E+00	9.74E+06	9.74E+06	-1.00E+07	5.58E+02	2.95E+05	0.57
COMP16	S22	S23	-1.82E+06	1.59E+01	0.00E+00	1.82E+06	1.82E+06	-1.83E+06	1.59E+01	8.41E+03	0.02
Tanques Flash											
FLASH7	S11	S12,S13	6.11E+04	5.39E+02	6.11E+04	0.00E+00	0.00E+00	-2.23E+05	5.39E+02	2.84E+05	0.55
FLASH12	S17	S18,S19	6.21E+04	5.89E+02	6.21E+04	0.00E+00	0.00E+00	-2.49E+05	5.89E+02	3.11E+05	0.60
FLASH19	S26	S30,S25	1.00E+03	1.88E+01	1.00E+03	0.00E+00	0.00E+00	-8.91E+03	1.88E+01	9.91E+03	0.02
Torres de Destilación											
RADFR22	S34,S37	S40,S41,S24	-2.07E+07	-1.12E+04	-3.89E+07	0.00E+00	-1.50E+07	-1.48E+07	3.42E+04	1.80E+07	34.79
Total =										5.18E+07	

Figura 5.3.1

**ANÁLISIS DE RESULTADOS
Y CONCLUSIONES**

6.1 ANÁLISIS DE RESULTADOS

Al comparar los resultados obtenidos de la simulación de la Reformadora de Nafta con los datos reportados en planta, se observaron diferencias apreciables, principalmente en composición, en tanto que en temperatura, presión y peso molecular fueron muy bajos.

Esta disparidad de resultados se debieron a la serie de suposiciones que se tuvieron que hacer para poder llevar a cabo la simulación de la planta.

En primer lugar, la corriente de entrada a la planta no estaba especificada en cuanto a composición se refiere, puesto que todos los componentes contenidos en ella fueron agrupados en una fracción denominada C_6^* , la cual tenía que ser definida para poder llevar a cabo la simulación.

La suposición de los componentes de entrada se hizo en base a un análisis desglosado por componente PONA proporcionado por el IMP, en donde, de acuerdo a los porcentajes en peso de entrada de cada parafina, aromático y nafteno se eligieron una serie de componentes los cuales representarían dicha fracción.

La decisión de tomar en cuenta sólo a los componentes con mayor porcentaje en peso se debió a la necesidad de reducir el número de reacciones a plantear, ya que para cada componente se debían de establecer más de una reacción, por tal motivo, si los hubiéramos tomado en cuenta a todos el número de reacciones hubiera sido excesivo.

La composición de la corriente de entrada se ajustó entonces con el peso molecular promedio especificado para la corriente de alimentación.

Todas estas suposiciones fueron necesarias ya que para poder simular a los reactores de reformación se requerían especificar las reacciones que se llevaban a cabo para que así, el ASPEN-PLUS pudiera efectuar el balance atómico correspondiente.

En segundo lugar, la falta de contar con un modelo apropiado capaz de simular un reactor catalítico fué determinante en la obtención de tales resultados.

Como puede observarse en la tabla 4.2.2 los errores más notables se obtuvieron en composición, en tanto que los obtenidos en temperatura, presión y peso molecular promedio fueron relativamente pequeños.

Haciendo un análisis exhaustivo de los resultados observamos que la corriente de entrada a la planta S-1 presenta errores muy bajos, en tanto que la corriente S-21 muestra errores grandes, estas diferencias se deben principalmente a que se trata de una corriente que es producto de las reacciones de reformación, ésta al mezclarse con la de alimentación para formar la corriente S-3 de entrada a la zona de reacción genera las diferencias en el resto de las corrientes.

Lo errores reflejados en la corriente S-21 tuvieron como origen la falta de control en las reacciones que se llevaron a cabo en los reactores, además de que no se especificaron todas las reacciones ni todos los componentes presentes en la carga como ya se mencionó.

La corriente S-9 producto de las reacciones de reformación mostró diferencias apreciables en composición, estos errores se debieron a que hubo una desintegración y reformación excesiva, lo cual generó demasiados ligeros en la corriente de salida del último

reactor, el exceso de hidrógeno en esta corriente demuestra que hubo además una excesiva reformación.

Todos estos errores se ven reflejados a lo largo del proceso, puesto que en casi todas las corrientes existe un exceso de hidrógeno e hidrocarburos ligeros.

El desglosado de la fracción C_6^+ no se muestra debido a que no se pueden comparar las fracciones obtenidas con las de planta.

Los errores más grandes se encontraron en las corrientes S-41 y S-42, esto fué debido a que como el flujo total de la corriente es pequeño en comparación con el resto y al estar constituidas en su mayoría por componentes ligeros, es de esperarse que el error se vea reflejado seriamente en dichas corrientes.

Con respecto a los errores en condiciones de operación, se observa que fueron muy bajos si se comparan con los errores obtenidos en composición.

Es importante notar que, a pesar de no haber considerado a todos los componentes y como consecuencia no haber planteado todas las reacciones posibles, además de no contar con un modelo adecuado para simular los reactores de reformación se logró alcanzar una congruencia en resultados, esto es, no se pudieron reproducir las fracciones como tales pero si se logró obtener un menor error si tomamos en cuenta a los componentes por número de carbonos contenidos y no las fracciones como tales.

Con respecto a el cálculo del trabajo perdido según se muestra en la tabla 5.3.1 observamos que las mayores pérdidas se dan en la torre fraccionadora RADF22, en los intercambiador de calor HEATX2, HEATX21 y en el HEAT6.

Es importante señalar que las bombas, compresores, tanques flash e intercambiadores de calor que requieren agua o vapor la cantidad de trabajo perdido es pequeña en comparación con los intercambiadores de calor de proceso que tienen pérdidas considerables.

Por tanto, son en estos últimos equipos en donde se sugiere empezar el análisis para proponer mejoras a la planta.

De acuerdo con los resultados obtenidos se sugiere empezar a cambiar de plato la corriente que alimenta a la torre fraccionadora.

Otra modificación importante sería observar que impacto tiene el modificar las condiciones de operación de la zona de compresión para poder eliminar el primer tanque flash.

En la tabla 6.1 se hace una evaluación económica de los servicios auxiliares requeridos por la planta con el fin de mostrar otro criterio para hacer mejoras en la planta.

6.2 CONCLUSIONES

El trabajo realizado muestra la simulación de la planta Reformadora de Naftas, en donde se aprecian diferencias considerables al comparar los resultados obtenidos con los reportados en planta.

Estas diferencias son debidas básicamente a que se desconocía la composición de la corriente de entrada y a que no se contaba con un modelo capaz de representar la operación del reactor catalítico.

Debido a estas deficiencias en información fué necesario definir una mezcla de trabajo que respresentara lo mejor posible a la corriente de entrada; definir una mezcla de varios compuestos bajo estas condiciones es algo muy difícil de realizar y si tomamos en cuenta que dicha corriente iba a ser alimentada a un reactor catalítico, la tarea se vuelve más complicada, ya que había que definir también la composición de la corriente de salida, a través de un estricto control en las reacciones.

Lo anterior nos muestra la importancia de conocer de manera detallada la composición de entrada a la planta, y en especial cuando se tienen reactores, ya que aunque se conozca el funcionamiento y operación de ésta, la composición de entrada sigue siendo una variable determinante en la simulación.

Para el caso de la simulación de la Reformadora de Naftas fué importante conocer la cinética de las reacciones que ocurrían en cada reactor ya que de esta forma se pudo hacer el planteamiento de un reactor de tipo cinético, cuyo modelo fué el que representó de manera más

aproximada al real, con una considerable limitante, de que este tipo de reactores no toma en cuenta la posibilidad de trabajar con catalizadores.

Es importante destacar que una buena simulación está en función de la correcta selección de los modelos de cálculo de propiedades, de los módulos de cálculo de cada operación y de los métodos de convergencia seleccionados.

El calcular el trabajo perdido de la planta Reformadora de Naftas nos permitió darnos cuenta en qué partes del proceso existen más pérdidas, notando que la torre fraccionadora requiere un análisis minucioso de opciones de operación.

A partir de estos resultados se pueden plantear propuestas de mejoramiento para el uso eficiente de la energía.

En esta tesis no se plantearon tales propuestas puesto que al existir fallas en la representación de los reactores, que son la parte fundamental en la planta, las propuestas resultarían inexactas.

Además de que para plantear propuestas de mejoras es necesario a parte de efectuar el cálculo del trabajo perdido en la planta, se debe hacer un análisis económico de éstas, ya que puede suceder que una propuesta resulte atractiva en términos de minimización del trabajo perdido, pero al hacer la evaluación económica puede resultar que dicha propuesta resulte excesivamente cara y poco rentable.

Es por esto que el planteamiento de mejoras a la planta se considera motivo de otro trabajo de tesis.

EVALUACION DEL PROCESO

Proceso actual

Tabla 6.1

Energía eléctrica			
Equipo	Trabajo Btu/hr	Consumo (kWh)/año	Costo N\$/año
PUMP9	108000	273469.5	45122.46
PUMP14	159000	402607.8	66430.29
PUMP24	31900	80774.78	13327.84
Total	298900	756852.1	124880.6

Agua de enf.			
Equipo	Calor Btu/hr	Consumo m3/año	Costo N\$/año
HEAT6	68900000	10886797	1123517
HEAT11	20800000	3286580	339175.1
HEAT18	15900000	2512338	259273.2
HEAT26	20500000	3239177	334283.1
HEAT27	3330000	526168.8	54300.62
HEAT25	28600000	4519048	466365.7
Total	1.58E+08	24970108	2576915

Combustóleo			
Equipo	Calor Btu/hr	Consumo Kg/año	Costo N\$/año
HEAT3	61900000	12999903	4432967
HEAT4	86800000	18229266	6216180
HEAT5	16600000	3486242	1188809
Total	1.65E+08	34715411	11837955

GRAN TOTAL	14539751
-------------------	-----------------

APÉNDICE

;Input file created by ModelManager Rel. 3.3-3 on Tue May 11 14:09:44 1993
;Directory C:\PATTY Runid NAFTA
;
Simulate Interactive=Yes

Title "Planta Reformadora De Naftas"

In-Units Eng
Out-Units Eng

Def-Streams Convent All

Run-Control Max-Time=18000

Databanks Aspenpcd

Prop-Sources Aspenpcd

Components

H2O H2O H2O /
H2S H2S H2S /
H2 H2 H2 /
Ch4 Ch4 Ch4 /
C2H6 C2H6 C2H6 /
C3H8 C3H8 C3H8 /
C4H10-1 C4H10-1 C4H10-1 /
C4H10-2 C4H10-2 C4H10-2 /
C5H12-1 C5H12-1 C5H12-1 /
C5H12-2 C5H12-2 C5H12-2 /
C6H14-1 C6H14-1 C6H14-1 /
C6H14-2 C6H14-2 C6H14-2 /
C6H14-3 C6H14-3 C6H14-3 /
C7H16-1 C7H16-1 C7H16-1 /
C7H16-2 C7H16-2 C7H16-2 /
C8H18-1 C8H18-1 C8H18-1 /
C8H18-11 C8H18-11 C8H18-11 /
C9H20-1 C9H20-1 C9H20-1 /
C10H22-1 C10H22-1 C10H22-1 /
C6H6 C6H6 C6H6 /
C7H8 C7H8 C7H8 /
C8H10-1 C8H10-1 C8H10-1 /
C8H10-4 C8H10-4 C8H10-4 /
C9H12-1 C9H12-1 C9H12-1 /
C10H14-1 C10H14-1 C10H14-1 /

C6H12-1 C6H12-1 C6H12-1 /
C7H14-1 C7H14-1 C7H14-1/
C7H14-6 C7H14-6 C7H14-6 /
C8H16-8 C8H16-8 C8H16-8 /
C9H18-1 C9H18-1 C9H18-1 /
C10H20-1 C10H20-1 C10H20-1/

Flowsheet

Block M1 In=S-1 S-21 Out=S-2
Block Hx3 In=S-2 S-9 Out=S-3 S-10
Block Hh1 In=S-3 Out=S-4
Block R1 In=S-4 Out=S-5
Block H1 In=S-5 Out=S-6
Block R2 In=S-6 Out=S-7
Block H2 In=S-7 Out=S-8
Block R3 In=S-8 Out=S-9
Block B1 In=S-11 Out=S-11
Block B2 In=S-11 Out=S-12 S-13
Block B3 In=S-12 Out=S-14
Block B4 In=S-13 Out=S-15
Block B5 In=S-14 S-15 Out=S-16
Block B6 In=S-16 Out=S-17
Block B7 In=S-17 Out=S-18 S-19
Block B9 In=S-19 Out=S-24
Block B8 In=S-18 Out=S-22 S-20
Block B10 In=S-20 Out=S-21 S-28
Block B11 In=S-22 Out=S-23
Block B12 In=S-23 Out=S-27 S-29
Block B13 In=S-27 Out=S-26
Block B14 In=S-26 Out=S-30 S-25
Block B15 In=S-24 S-25 Out=S-31
Block B16 In=S-31 S-33 Out=S-34 S-32
Block B17 In=S-34 S-37 Out=S-41 S-42 S-40
Block B18 In=S-40 Out=S-33 S-39
Block B23 In=S-39 Out=S-38
Block B24 In=S-38 Out=S-37
Block B26 In=S-32 Out=S-35
Block B27 In=S-35 Out=S-36

Properties Sysop3 / Sysop2

Stream S-1 Temp=200 Pres=314.5

Mole-Flow H2O 0.000 /

H2S	0.000 /
C4H10-1	0.000 /
C4H10-2	0.000 /
C5H12-1	0.000 /
C5H12-2	0.000 /
C6H14-1	31.2937 /
C6H14-2	31.2937 /
C6H14-3	31.2987 /
C7H16-1	268.1106 /
C7H16-2	268.1106 /
C8H18-1	290.9497 /
C8H18-11	267.7782 /
C9H20-1	379.8943 /
C10H22-1	549.4816 /
C6H6	22.5269 /
C7H8	15.6043 /
C8H10-1	33.0528 /
C8H10-4	28.3715 /
C9H12-1	36.5992 /
C10H14-1	0.0000 /
C6H12-1	87.1005 /
C7H14-1	87.1005 /
C7H14-6	87.1005 /
C8H16-8	142.7086 /
C9H18-1	153.2061 /
C10H20-1	25.0236 /

Stream S-3 Temp=876 Pres=186.5

Mole-Flow H2O 1.2857E-03 /

H2S	1.6581E-03 /
H2	1.4168E+04 /
Ch4	1035.6466 /
C2H6	1070.0735 /
C3H8	731.2617 /
C4H10-1	374.9434 /
C4H10-2	32.3103 /
C5H12-1	180.3997 /
C5H12-2	13.0297 /
C6H14-1	31.2937 /
C6H14-2	31.3292 /
C6H14-3	31.4109 /
C7H16-1	257.3295 /

C7H16-2	257.6050	/
C8H18-1	290.9497	/
C8H18-11	262.5810	/
C9H20-1	379.8943	/
C10H22-1	543.8816	/
C6H6	28.8242	/
C7H8	45.1100	/
C8H10-1	34.2194	/
C8H10-4	34.6759	/
C9H12-1	38.2752	/
C10H14-1	0.6263	/
C6H12-1	92.1811	/
C7H14-1	87.1005	/
C7H14-6	109.1114	/
C8H16-8	143.4072	/
C9H18-1	153.2635	/
C10H20-1	25.0684	

Stream S-21 Temp=100 Pres=197.5

Mole-Flow H2O 0.28000 /

H2S	0.03000	/
H2	14187.88	/
Ch4	1073.01	/
C2H6	1014.86	/
C3H8	692.73	/
C4H10-1	168.15	/
C4H10-2	205.26	/
C5H12-1	94.8100	/
C5H12-2	50.8000	/
C6H14-1	49.13330	/
C6H14-2	50.13333	/
C6H14-3	50.13333	/
C7H16-1	1.27000	/
C7H16-2	1.27000	/
C8H18-1	0.93500	/
C8H18-11	0.93500	/
C9H20-1	0.96000	/
C10H22-1	0.08000	/
C6H6	0.58000	/
C7H8	0.33000	/
C8H10-1	0.04350	/
C8H10-4	0.04350	/
C9H12-1	0.03000	/
C6H12-1	0.0800	/
C7H14-1	0.91500	/

C7H14-6	0.91500 /
C8H16-8	0.41000 /
C9H18-1	0.41000 /
C10H20-1	0.39000

Stream S-40 Temp=486 Pres=271.5

Mole-Flow	H2O	0.0 /
H2S	0.0 /	
H2	1.4565E-17 /	
Ch4	1.0104E-13 /	
C2H6	2.7105E-07 /	
C3H8	7.7192E-03 /	
C4H10-1	579.0879 /	
C4H10-2	1.0320 /	
C5H12-1	1894.5943 /	
C5H12-2	51.7502 /	
C6H14-1	0.0 /	
C6H14-2	0.0 /	
C6H14-3	0.0 /	
C7H16-1	0.0 /	
C7H16-2	0.0 /	
C8H18-1	0.0 /	
C8H18-11	0.0 /	
C9H20-1	0.0 /	
C10H22-1	0.0 /	
C6H6	231.6950 /	
C7H8	375.5881 /	
C8H10-1	100.7865 /	
C8H10-4	1008.1282 /	
C9H12-1	947.4730 /	
C10H14-1	1055.8056 /	
C6H12-1	1.4906E-11 /	
C7H14-1	2376.7463 /	
C7H14-6	0.0 /	
C8H16-8	0.0 /	
C9H18-1	0.0 /	
C10H20-1	0.0	

Block R1 Rplug

Param Type=T-Spec Length=35 Diam=9 Pres=180.5

T-Spec 0.0 1010 / 1.0 820

Properties Sysop2

; Naftenos A Aromaticos

Stoic 1 Mixed C10H20-1 -1 / C10H14-1 1 / H2 3

Stoic 2 Mixed C9H18-1 -1 / C9H12-1 1 / H2 3

Stoic 3 Mixed C8H16-8 -1 / C8H10-4 1 / H2 3

Stoic 4 Mixed C8H16-8 -1 / C8H10-1 1 / H2 3

Stoic 5 Mixed C7H14-1 -1 / C7H8 1 / H2 3

Stoic 6 Mixed C6H12-1 -1 / C6H6 1 / H2 3

; Aromaticos A Naftenos

Stoic 7 Mixed C6H6 -1 / H2 -3 / C6H12-1 1

; Naftenos A Parafinas

Stoic 8 Mixed C10H20-1 -1 / H2 -1 / C10H22-1 1

Stoic 9 Mixed C9H18-1 -1 / H2 -1 / C9H20-1 1

Stoic 10 Mixed C8H16-8 -1 / H2 -1 / C8H18-11 1

Stoic 11 Mixed C7H14-6 -1 / H2 -1 / C7H16-2 1

Stoic 12 Mixed C7H14-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1

Stoic 13 Mixed C6H12-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1

Rate-Con 1 6.8E-2 30000

Rate-Con 2 6.8E-2 30000

Rate-Con 3 5.97E-2 30000

Rate-Con 4 5.97E-2 30000

Rate-Con 5 2.50E-2 30000

Rate-Con 6 1.11E-5 30000

Rate-Con 7 1.25E-6 -12532

Rate-Con 8 7.05E-8 45000

Rate-Con 9 1.5E-8 45000

Rate-Con 10 1.3E-8 45000

Rate-Con 11 5.5E-9 45000

Rate-Con 12 5.5E-9 45000

Rate-Con 13 4.1E-8 45000

Powlaw-Exp 1 C10H20-1 1

Powlaw-Exp 2 C9H18-1 1

Powlaw-Exp 3 C8H16-8 1

Powlaw-Exp 4 C8H16-8 1

Powlaw-Exp 5 C7H14-1 1

Powlaw-Exp 6 C6H12-1 1

Powlaw-Exp 7 C6H6 1 / H2 0.00001

Powlaw-Exp 8 C10H20-1 1 / H2 0.00001

Powlaw-Exp 9 C9H18-1 1 / H2 0.00001

Powlaw-Exp 10 C8H16-8 1 / H2 0.00001

Powlaw-Exp 11 C7H14-6 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 12 C7H14-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 13 C6H12-1 1 / H2 0.00001

Block R2 Rplug

Param Type=T-Spec Length=40 Diam=9.5 Pres=169.5
T-Spec 0.0 1010 / 1.0 975

Properties Sysop2

; Naftenos A Aromaticos

Stoic 1 Mixed C10H20-1 -1 / C10H14-1 1 / H2 3
Stoic 2 Mixed C9H18-1 -1 / C9H12-1 1 / H2 3
Stoic 3 Mixed C8H16-8 -1 / C8H10-4 1 / H2 3
Stoic 4 Mixed C7H14-6 -1 / C7H8 1 / H2 3
Stoic 5 Mixed C6H12-1 -1 / C6H6 1 / H2 3

; Hidrocracking De Parafinas

Stoic 6 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C9H20-1 1 / Ch4 1
Stoic 7 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C8H18-1 1 / C2H6 1
Stoic 8 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1 / C3H8 1
Stoic 9 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C4H10-1 1
Stoic 10 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 2
Stoic 11 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C8H18-1 1 / Ch4 1
Stoic 12 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1 / C2H6 1
Stoic 13 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C3H8 1
Stoic 14 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C4H10-1 1
Stoic 15 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1 / Ch4 1
Stoic 16 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C2H6 1
Stoic 17 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C3H8 1
Stoic 18 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 2
Stoic 19 Mixed C7H16-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / Ch4 1
Stoic 20 Mixed C7H16-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C2H6 1
Stoic 21 Mixed C7H16-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C3H8 1
Stoic 22 Mixed C6H14-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / Ch4 1
Stoic 23 Mixed C6H14-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C2H6 1
Stoic 24 Mixed C6H14-1 -1 / H2 -1 / C3H8 2
Stoic 25 Mixed C8H18-11 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C2H6 1
Stoic 26 Mixed C8H18-11 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C3H8 1
Stoic 27 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C5H12-2 1 / C2H6 1
Stoic 28 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / Ch4 1
Stoic 29 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C6H14-2 1 / Ch4 1
Stoic 30 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C5H12-2 1 / C2H6 1
Stoic 31 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C4H10-2 1 / C3H8 1
Stoic 32 Mixed C6H14-3 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C2H6 1
Stoic 33 Mixed C6H14-3 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / Ch4 1
Stoic 34 Mixed C6H14-3 -1 / H2 -1 / C5H12-2 1 / Ch4 1
Stoic 35 Mixed C6H14-2 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / Ch4 1

Stoic 36 Mixed C6H14-2 -1 / H2 -1 / C3H8 2
 Stoic 37 Mixed C6H14-2 -1 / H2 -1 / C4H10-2 1 / C2H6 1
 ;Parafinas A Naftenos
 Stoic 38 Mixed C10H22-1 -1 / C10H20-1 1 / H2 1
 Stoic 39 Mixed C9H20-1 -1 / C9H18-1 1 / H2 1
 Stoic 40 Mixed C8H18-11 -1 / C8H16-8 1 / H2 1
 Stoic 41 Mixed C8H18-1 -1 / C8H16-8 1 / H2 1
 Stoic 42 Mixed C7H16-2 -1 / C7H14-6 1 / H2 1
 Stoic 43 Mixed C7H16-1 -1 / C7H14-6 1 / H2 1
 Stoic 45 Mixed C6H14-1 -1 / C6H12-1 1 / H2 1
 ;Aromaticos A Naftenos
 Stoic 46 Mixed C6H6 -1 / H2 -3 / C6H12-1 1
 ;Naftenos A Parafinas
 Stoic 47 Mixed C10H20-1 -1 / H2 -1 / C10H22-1 1
 Stoic 48 Mixed C9H18-1 -1 / H2 -1 / C9H20-1 1
 Stoic 49 Mixed C8H16-8 -1 / H2 -1 / C8H18-1 1
 Stoic 50 Mixed C8H16-8 -1 / H2 -1 / C8H18-11 1
 Stoic 51 Mixed C7H14-6 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1
 Stoic 52 Mixed C7H14-6 -1 / H2 -1 / C7H16-2 1
 Stoic 53 Mixed C6H12-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1
 Rate-Con 1 6.8E-4 30000
 Rate-Con 2 6.8E-4 30000
 Rate-Con 3 5.97E-4 30000
 Rate-Con 4 2.50E-5 30000
 Rate-Con 5 1.11E-4 30000
 Rate-Con 6 1.36E-5 55000
 Rate-Con 7 1.75E-6 55000
 Rate-Con 8 3.02E-6 55000
 Rate-Con 9 2.47E-6 55000
 Rate-Con 10 3.4E-7 55000
 Rate-Con 11 6.5E-6 55000
 Rate-Con 12 6.0E-5 55000
 Rate-Con 13 5.7E-6 55000
 Rate-Con 14 1.5E-5 55000
 Rate-Con 15 2.6E-6 55000
 Rate-Con 16 5.5E-6 55000
 Rate-Con 17 1.19E-5 55000
 Rate-Con 18 9.72E-6 55000
 Rate-Con 19 1.44E-6 55000
 Rate-Con 20 5E-7 55000
 Rate-Con 21 8.8E-7 55000
 Rate-Con 22 1.8E-6 55000
 Rate-Con 23 5E-7 55000
 Rate-Con 24 1.5E-6 55000
 Rate-Con 25 5.5E-7 55000

Rate-Con 26 1.19E-6 55000
Rate-Con 27 5E-8 55000
Rate-Con 28 1.4E-7 55000
Rate-Con 29 1.4E-8 55000
Rate-Con 30 5E-8 55000
Rate-Con 31 8.8E-8 55000
Rate-Con 32 5E-7 55000
Rate-Con 33 1.8E-6 55000
Rate-Con 34 1.8E-7 55000
Rate-Con 35 1.8E-6 55000
Rate-Con 36 1.5E-6 55000
Rate-Con 37 5E-8 55000
Rate-Con 38 7.05E-4 45000
Rate-Con 39 5.02E-4 45000
Rate-Con 40 3.69E-4 45000
Rate-Con 41 3.69E-4 45000
Rate-Con 42 1.61E-4 45000
Rate-Con 43 1.61E-3 45000
Rate-Con 45 0.0000 45000
Rate-Con 46 1.25E-7 -12532.76
Rate-Con 47 7.05E-7 45000
Rate-Con 48 1.5E-7 45000
Rate-Con 49 1.3E-7 45000
Rate-Con 50 1.3E-7 45000
Rate-Con 51 5.5E-7 45000
Rate-Con 52 5.5E-7 45000
Rate-Con 53 4.1E-6 45000
Powlaw-Exp 1 C10H20-1 1
Powlaw-Exp 2 C9H18-1 1
Powlaw-Exp 3 C8H16-8 1
Powlaw-Exp 4 C7H14-6 1
Powlaw-Exp 5 C6H12-1 1
Powlaw-Exp 6 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 7 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 8 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 9 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 10 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 11 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 12 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 13 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 14 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 15 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 16 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 17 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 18 C8H18-1 1 / H2 0.00001

Powlaw-Exp 19 C7H16-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 20 C7H16-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 21 C7H16-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 22 C6H14-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 23 C6H14-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 24 C6H14-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 25 C8H18-11 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 26 C8H18-11 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 27 C7H16-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 28 C7H16-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 29 C7H16-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 30 C7H16-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 31 C7H16-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 32 C6H14-3 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 33 C6H14-3 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 34 C6H14-3 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 35 C6H14-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 36 C6H14-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 37 C6H14-2 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 38 C10H22-1 1
 Powlaw-Exp 39 C9H20-1 1
 Powlaw-Exp 40 C8H18-11 1
 Powlaw-Exp 41 C8H18-1 1
 Powlaw-Exp 42 C7H16-2 1
 Powlaw-Exp 43 C7H16-1 1
 Powlaw-Exp 45 C6H14-1 1
 Powlaw-Exp 46 C6H6 1 / H2 0.001
 Powlaw-Exp 47 C10H20-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 48 C9H18-1 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 49 C8H16-8 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 50 C8H16-8 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 51 C7H14-6 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 52 C7H14-6 1 / H2 0.00001
 Powlaw-Exp 53 C6H12-1 1 / H2 0.00001

Block R3 Rplug

Param Type=T-Spec Length=47 Diam=11.5 Pres=161.5

T-Spec 0.0 1010 / 1.0 1004

Properties Sysop2

; Hidrocracking De Parafinas

Stoic 1 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C9H20-1 1 / Ch4 1
 Stoic 2 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C8H18-1 1 / C2H6 1
 Stoic 3 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1 / C3H8 1
 Stoic 4 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C4H10-1 1
 Stoic 5 Mixed C10H22-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 2

Stoic 6 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C8H18-1 1 / Ch4 1
 Stoic 7 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1 / C2H6 1
 Stoic 8 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C3H8 1
 Stoic 9 Mixed C9H20-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C4H10-1 1
 Stoic 10 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C7H16-1 1 / Ch4 1
 Stoic 11 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C2H6 1
 Stoic 12 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C3H8 1
 Stoic 13 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 2
 Stoic 14 Mixed C7H16-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / Ch4 1
 Stoic 15 Mixed C7H16-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C2H6 1
 Stoic 16 Mixed C7H16-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C3H8 1
 Stoic 17 Mixed C6H14-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / Ch4 1
 Stoic 18 Mixed C6H14-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C2H6 1
 Stoic 19 Mixed C6H14-1 -1 / H2 -1 / C3H8 2
 Stoic 20 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C2H6 1
 Stoic 21 Mixed C8H18-1 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / C3H8 1
 Stoic 22 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C5H12-2 1 / C2H6 1
 Stoic 23 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / Ch4 1
 Stoic 24 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C6H14-2 1 / Ch4 1
 Stoic 25 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C5H12-2 1 / C2H6 1
 Stoic 26 Mixed C7H16-2 -1 / H2 -1 / C4H10-2 1 / C3H8 1
 Stoic 27 Mixed C6H14-3 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C2H6 1
 Stoic 28 Mixed C6H14-3 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / Ch4 1
 Stoic 29 Mixed C6H14-3 -1 / H2 -1 / C5H12-2 1 / Ch4 1
 Stoic 30 Mixed C6H14-2 -1 / H2 -1 / C5H12-1 1 / Ch4 1
 Stoic 31 Mixed C6H14-2 -1 / H2 -1 / C3H8 2
 Stoic 32 Mixed C6H14-2 -1 / H2 -1 / C4H10-2 1 / C2H6 1

; Parafinas A Naftenos

Stoic 33 Mixed C10H22-1 -1 / C10H20-1 1 / H2 1
 Stoic 34 Mixed C9H20-1 -1 / C9H18-1 1 / H2 1
 Stoic 35 Mixed C8H18-1 -1 / C8H16-8 1 / H2 1
 Stoic 36 Mixed C8H18-1 -1 / C8H16-8 1 / H2 1
 Stoic 37 Mixed C7H16-2 -1 / C7H14-6 1 / H2 1
 Stoic 38 Mixed C7H16-1 -1 / C7H14-6 1 / H2 1
 Stoic 39 Mixed C7H16-1 -1 / C7H14-1 1 / H2 1
 Stoic 40 Mixed C6H14-1 -1 / C6H12-1 1 / H2 1

; Naftenos A Aromaticos

Stoic 41 Mixed C10H20-1 -1 / C10H14-1 1 / H2 3
 Stoic 42 Mixed C9H18-1 -1 / C9H12-1 1 / H2 3
 Stoic 43 Mixed C8H16-8 -1 / C8H10-4 1 / H2 3
 Stoic 44 Mixed C7H14-6 -1 / C7H8 1 / H2 3
 Stoic 45 Mixed C6H12-1 -1 / C6H6 1 / H2 3

Rate-Con 1 1.36E-6 55000

Rate-Con 2 1.75E-6 55000

Rate-Con 3 3.02E-6 55000

Rate-Con 4 2.47E-6 55000
Rate-Con 5 3.4E-4 55000
Rate-Con 6 6.5E-6 55000
Rate-Con 7 6.0E-6 55000
Rate-Con 8 5.7E-6 55000
Rate-Con 9 1.5E-6 55000
Rate-Con 10 2.6E-6 55000
Rate-Con 11 5.5E-6 55000
Rate-Con 12 1.19E-5 55000
Rate-Con 13 9.72E-9 55000
Rate-Con 14 1.44E-5 55000
Rate-Con 15 5E-6 55000
Rate-Con 16 8.8E-6 55000
Rate-Con 17 1.8E-5 55000
Rate-Con 18 5E-6 55000
Rate-Con 19 1.5E-5 55000
Rate-Con 20 5.5E-6 55000
Rate-Con 21 1.19E-6 55000
Rate-Con 22 5E-7 55000
Rate-Con 23 1.4E-6 55000
Rate-Con 24 1.4E-6 55000
Rate-Con 25 5E-7 55000
Rate-Con 26 8.8E-7 55000
Rate-Con 27 5E-7 55000
Rate-Con 28 1.8E-6 55000
Rate-Con 29 1.8E-6 55000
Rate-Con 30 1.8E-6 55000
Rate-Con 31 1.5E-6 55000
Rate-Con 32 5E-7 55000
Rate-Con 33 7.05E-7 45000
Rate-Con 34 5.02E-7 45000
Rate-Con 35 3.69E-7 45000
Rate-Con 36 3.69E-7 45000
Rate-Con 37 1.61E-7 45000
Rate-Con 38 1.61E-7 45000
Rate-Con 39 1.61E-7 45000
Rate-Con 40 0.0000 45000
Rate-Con 41 6.8E-3 30000
Rate-Con 42 6.8E-3 30000
Rate-Con 43 5.97E-3 30000
Rate-Con 44 2.50E-3 30000
Rate-Con 45 1.11E-3 30000
Powlaw-Exp 1 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 2 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 3 C10H22-1 1 / H2 0.00001

Powlaw-Exp 4 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 5 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 6 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 7 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 8 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 9 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 10 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 11 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 12 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 13 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 14 C7H16-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 15 C7H16-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 16 C7H16-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 17 C6H14-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 18 C6H14-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 19 C6H14-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 20 C8H18-11 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 21 C8H18-11 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 22 C7H16-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 23 C7H16-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 24 C7H16-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 25 C7H16-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 26 C7H16-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 27 C6H14-3 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 28 C6H14-3 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 29 C6H14-3 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 30 C6H14-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 31 C6H14-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 32 C6H14-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 33 C10H22-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 34 C9H20-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 35 C8H18-11 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 36 C8H18-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 37 C7H16-2 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 38 C7H16-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 39 C7H16-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 40 C6H14-1 1 / H2 0.00001
Powlaw-Exp 41 C10H20-1 1
Powlaw-Exp 42 C9H18-1 1
Powlaw-Exp 43 C8H16-8 1
Powlaw-Exp 44 C7H14-6 1
Powlaw-Exp 45 C6H12-1 1

Block M1 Mixer

Param Pres=195

Properties Sysop2

Block Heatx2 Heatx

Param T-Cold=876 Pres-Cold=186.5 Pres-Hot=150

Feeds Hot=A-8 Cold=A-2

Products Hot=S-1 Cold=Aa-3

Properties Sysop2

Block Heater3 Heater

Param Temp=1010 Pres=169.5

Properties Sysop2

Block Heater4 Heater

Param Temp=1010 Pres=169.5

Properties Sysop2

Block Heater5 Heater

Param Temp=1010 Pres=161.5

Properties Sysop2

Block Heater6 Heater

Param Temp=120 Pres=146.5

Properties Sysop2

Block Flash27 Flash2

Param Temp=120 Pres=145.2

Properties Sysop2

Block Comp8 Compr

Param Type=Polytropic Pres=205.2 Temp=165

Properties Sysop2

Block Pump9 Pump

Param Pres=239.5 Eff=.8

Properties Sysop2

Block Mixer10 Mixer

Param Pres=203.5

Properties Sysop2

Block Heater11 Heater

Param Temp=100 Pres=201.5

Properties Sysop2

Block Flash212 Flash2
Param Temp=100 Pres=199.5
Properties Sysop2

Block Fsplit13 Fsplit
Mole-Flow S-11 2122.97
Properties Sysop2

Block Pump14 Pump
Param Pres=322.5 Eff=.8
Properties Sysop2

Block Fsplit15 Fsplit
Mole-Flow S-15 17647.58
Properties Sysop2

Block Comp16 Compr
Param Type=Polytropic Pres=407.5 Temp=200
Properties Sysop2

Block Fsplit17 Fsplit
Mole-Flow S-18 1738.67
Properties Sysop2

Block Heater18 Heater
Param Temp=100 Pres=403.5
Properties Sysop2

Block Flash219 Flash2
Param Temp=100 Pres=401.5
Properties Sysop2

Block Mixer20 Mixer
Param Pres=285.5

Block Heatx21 Heatx
Param Vfrac-Cold=0 Pres-Cold=283.5
Feeds Hot=30 Cold=S-23
Products Hot=35 Cold=S-24

Block Radf22 Radfrac
Param Nstage=31 Ilmeth=Wegstein

Feeds S-24 17 / 34 31 On-Stage
Products S-27 1 V / S-29 1 L / S-28 31 L

P-Spec 1 266.50 /
2 266.50 /
10 267.97 /
11 268.16 /
12 268.34 /
15 268.89 /
16 269.08 /
17 269.26 /
18 269.42 /
20 269.74 /
21 269.90 /
22 270.06 /
30 271.34 /
31 271.50

Col-Specs Qn=0 Mole-Rdv=.1744 Mole-D=361

T-Est 1 85.733 /
2 178.57 /
10 223.70 /
11 224.11 /
12 224.59 /
15 229.48 /
16 239.05 /
17 283.26 /
18 286.95 /
30 433.82 /
31 483.91

L-Est 1 4264. /
2 5484. /
10 6063. /
11 6058. /
12 6046. /
15 5641. /
16 4464. /
17 7496. /
18 7621. /
30 7500. /
31 8359.

V-Est 1 62.96 /
2 .4625. /
10 6424. /

11	6424.	/
12	6419.	/
15	6299.	/
16	6002.	/
17	4814.	/
18	4937.	/
30	4912.	/
31	4941.	

Block Fsplit23 Fsplit
Mole-Flow 31 5800

Block Pump24 Pump
Param Pres=280 Eff=.85 Nphase=1

Block Heater25 Heater
Param Vfrac=.8933 Pres=272.5

Block Heater26 Heater
Param Temp=130 Pres=249.5

Block Heater27 Heater
Param Temp=100 Pres=241.5

Tear
Tear S-40 / S-21 / S-3

Convergence Loop1 Broyden
Tear S-21 Tol=1E-4

Convergence Loop2 Broyden
Tear S-40

Convergence Loop3 Broyden
Tear S-3 Tol=1E-4

Conv-Order Loop1 Loop3 Loop2

BIBLIOGRAFÍA

Alonso, L.A. y Giral L.F. "*Propuesta de Mejoramiento del tren de recuperación de vapores de la planta catalítica de Tula*". Tesis. México, CU, 1992. 107 pp.

Bazúa Rueda Enrique. "*Bases termodinámicas para el uso eficiente de la energía*." Notas del Diplomado de ahorro y uso eficiente de la energía. México. Facultad de Química, UNAM.1992.

Evans, Lawrence B. "*Advances in Process Flowsheeting Systems*" en Mah, R.S.H., Seider, W.D. *Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design*. V.1. New York, Engineering Foundation, 1981. p.p. 425-469

Esber, I. Shaheen. "*Catalytic Processing in Petroleum Refinig*" Tulsa, Oklahoma: Penn Well Publishing Company, 1983. p.p. 149-169

Gates, Bruce C. et al. "*Chemistry of Catalytic Processes*." New York: Mc. Graw Hill, 1979. 469 pp.

Husain, Asghar. "*Chemical Process Simulation*." New Delhi: Wiley Eastern, Ltd., 1986. 376 pp.

Kenney W.F. "*Energy Conservation in the Process Industries*". Orlando: Academic Press, 1984. 329 pp.

Biegler T. L. "*Chemical Process Simulation*." Chem Eng, Progress. October, 1989. pp. 50-61.

Luyben, William M. "*Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*" 2a ed. Singapur: Mc. Graw Hill, 1989. 726 pp.

Marshall Sitting "*Catalysts and Catalytic processes*" USA: Noyes Development Corporation, 1967. p.p.45-57

Nevers Noel, Seader J.D. "*Mechanical lost work, thermodynamic lost work, and thermodynamic efficiencies of processes*" Latin American Journal of heat and mass transfer, 1984. pp. 77-105.

Ojeda Ramos Miguel. "*Métodos modulares simultáneos para la simulación de procesos químicos en estado estacionario*". Tesis. México: UNAM. ENEP Zaragoza, 1987. 562 pp.

PEMEX, Refinería Miguel Hidalgo. Superintendencia de Proceso. "*Libro de Proceso*". Julio, 1989.

PEMEX, Refinería de Tula, Suprintendencia de procesos, "*Planta Reformadora de Naftas, manual de operación*"

Ramírez W. Fred "*Computational Methods for process simulation*" USA: Butterworth Publisher, 1989. p.p. 5-10

Robertson J.L. "*The ideal Process Simulator*" Chemical Engineering Progress, Octubre, 1989. p.p. 62-66

Satterfield C.N. "*Heterogeneous Catalysis in Practice*". New York: Mc. Graw hill, 1981. 416 pp.

Seader J.D. Notas del curso "*Modeling, Simulation and Optimization of Chemical Processes*". Boston: MIT. Julio, 1992.

Smith, J.M., Van Ness, H.C. "*Introducción a la termodinámica en ingeniería química*." México: Mc. Graw Hill, 1989. 717 pp.

Westerberg A.W. et al. "*Process Flowsheeting*" Melbourne: Cambridge, 1976. 345 pp.

Winter Peter "*Computer-Aided process engineering: The evolution continues*" Chemical Engineering progress, Febrero, 1992. p.p.76-83

Wuithier Pierre "*Refino y tratamiento químico*" España: Ediciones Cepsa S.A., 1971. p.p. 781-817

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Costing Manual*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Data Regression Manual*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Electrolytes Manual*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Interactive Simulation*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Model Manager and ASPEN PLUS, Installation and Reference for the PC*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Model Manager, Getting Started and Tutorials for the PC*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Notes on Interfaces and User Models*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Solids Manual*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Stream Libraries and Insert Libraries*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Summary File Toolkit*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS User Guide*, 1991.