



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

"SIMULACION DE UNA PLANTA DE
METIL-TERT-BUTIL-ETER"

T E S I S
PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO
P R E S E N T A :
JUAN PABLO AGUAYO VALLEJO



MEXICO, D. F.

1998

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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 esta 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.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

TESIS

COMPLETA

JURADO ASIGNADO:

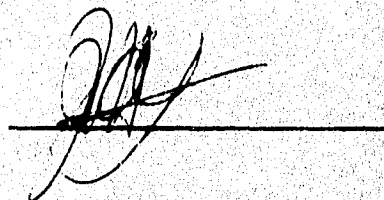
PRESIDENTE: Prof. JAVIER AUDRY SÁNCHEZ
VOCAL: Prof. MARTIN G. HERNÁNDEZ LUNA
SECRETARIO: Prof. CELESTINO MONTIEL MALDONADO
1er. SUPLENTE: Prof. MARIANO PÉREZ CAMACHO
2do. SUPLENTE: Prof. ADRIAN BENITEZ PATRICIO

Sitio donde se desarrollo el tema:

Facultad de Química
Laboratorio de:
Simulación y Optimización de Procesos
Edificio "E"

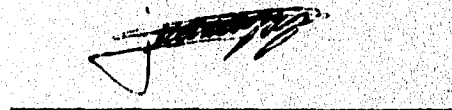
Asesor:

Doctor: Javier Audry Sánchez



Sustentante:

Juan Pablo Aguayo Vallejo



Gracias a Dios y a mis padres José y Gloria, y a todas las personas que me apoyaron, muy especialmente a Leticia.

CAPÍTULO I

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN.

El problema de la contaminación ambiental, ha tenido fuertes repercusiones en la industria química, la cual frecuentemente es gran responsable del deterioro ecológico; esto hace que muchos de los procesos industriales existentes se encuentren en etapas de modificación continua, en busca de cumplir con las cada vez mas exigentes normas ecológicas, pero manteniendo o mejorando la calidad del producto. La gasolina, que es un producto fundamental en la sociedad actual, presenta el problema de emisión de contaminantes a la atmósfera, como el monóxido de carbono, hidrocarburos en fase gas, compuestos de plomo, los cuales presentan riesgos para la salud. Fue entonces necesario modificar las características de la gasolina, buscando por lo menos, mantener la calidad de la misma; una modificación para obtener dicho producto es mezclarla con metil ter-butil éter.

El metil ter-butil éter, mejor conocido por sus siglas MTBE es un compuesto que se mezcla con la gasolina para aumentar el índice de octano, lo cual se hacía antes con compuestos como el tetraetilo de plomo y el tetrametilo de plomo, los cuales se adicionaban a la gasolina en cantidades pequeñas para elevar considerablemente el índice de octano, sin embargo estos ya no se usan porque causan un fuerte impacto ambiental. En cambio el MTBE no resulta tan riesgoso para el medio y es un muy buen elevador del índice de octano, un factor determinante en la calidad de la gasolina.

Otra ventaja del MTBE es que aumenta el contenido de oxígeno de este combustible, algo que es extremadamente deseable para la reducción en las emisiones de monóxido de carbono; además, al agregar el MTBE a la gasolina se logra reducir la evaporación de la misma, debido que el MTBE presenta una menor volatilidad relativa, reduciéndose así la contaminación por ozono producido por la reactividad de la gasolina en la atmósfera. Todo esto permite que la calidad de la gasolina cumpla con las nuevas normas ecológicas que se aplican al uso de los vehículos automotores. Por todo lo anterior, la producción de dicho compuesto ha sufrido un enorme aumento en nuestro país y a nivel mundial.

El MTBE se obtiene industrialmente a partir de la reacción química entre isobutileno y metanol en fase líquida. Esta reacción es reversible y moderadamente exotérmica. La reacción se lleva a cabo en reactores tubulares y recientemente en columnas de destilación. La desventaja de los primeros es que como la reacción está limitada por el equilibrio químico, se necesitan por lo general dos reactores de gran tamaño y después la etapa de separación, en cambio la configuración típica en los procesos con destilación reactiva consiste sólo en un reactor tubular y en la torre reactiva. Este proceso, como se verá más adelante, involucra una gran cantidad de inertes, lo cual obliga a una posterior etapa de separación para recuperar los reactivos que no se convirtieron completamente.

El presente trabajo consiste en la simulación por computadora de la planta para la producción de MTBE localizada en Tula, Hdgo., la cual es la de mayor capacidad en México y que entró en funcionamiento en el mes de febrero del presente año.

La simulación de procesos por computadora es una herramienta de gran importancia en la actualidad, ya que representa un apoyo en temas de evaluación, de estrategia operacional o para definir nuevas condiciones de operación que mejoren la calidad de productos y aumentar la carga a las unidades, e incluso para la optimización de las mismas. Actualmente se cuenta con diversos simuladores específicos para los procesos en la industria química, entre los más conocidos están el HYSIM, CHEMCAD y ASPEN PLUS.

Se utilizó para este trabajo, el simulador comercial ASPEN PLUS (TM) versiones 9.1-3 y 8.5-6. Este simulador presenta muchas ventajas ya que permite simular un gran número de equipos presentes en los procesos químicos, tiene una gran cantidad de opciones para el cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte, un banco de datos muy completo, y métodos de convergencia en la resolución de los diversos modelos matemáticos de los equipos involucrados que dan una gran flexibilidad al cambiar los datos de una simulación, entre otras.

Se reporta una comparación entre los datos de diseño y los obtenidos con dicho programa. También se reporta un análisis de sensibilidad de parámetros, es decir, una evaluación de las respuestas de la planta al cambiársele condiciones de diseño. Además se indican factores que fueron importantes en la simulación de este proceso en especial, que fue desarrollado por el Instituto Francés del Petróleo (IFP).

CAPÍTULO II

CAPÍTULO II

GENERALIDADES.

IMPORTANCIA DEL MTBE.

La gasolina es uno de los derivados del petróleo crudo más importante, y tiene por lo general un gran porcentaje de moléculas no ramificadas, lo que provoca que el combustible se consuma dentro del motor con ruidos (golpeteo), pérdida de potencia y finalmente daños a la máquina. Para medir las propiedades de golpeteo de la gasolina se seleccionaron dos hidrocarburos puros como patrones de comparación. Uno de ellos es el iso-octano (2,2,4-trimetilpentano), el cual se quema de manera muy uniforme en máquinas de combustión interna (sin golpeteo), de acuerdo a esta escala el iso-octano tiene un octanaje de 100; el otro compuesto patrón, es el heptano, que produce un gran golpeteo y tiene entonces un octanaje de 0 (cero). Para obtener los patrones de octanaje entre 0 y 100 se utilizan mezclas de iso-octano y heptano. Por ejemplo, una gasolina que tenga las mismas características en una máquina que una mezcla de 70 % iso-octano y 30 % heptano, se clasificará como una gasolina de 70 octanos. Nótese que no se determina si la gasolina contiene en realidad cualquier heptano e iso-octano.

Al agregarse el MTBE en las gasolinas aumenta el octanaje de forma considerable, dando lugar a un producto de buena calidad para los motores, siendo además favorable a la reducción de las emisiones de CO. Mas aún, el MTBE tiene una reactividad en la atmósfera considerablemente menor que muchos de los compuestos que generalmente forman las gasolinas, y por lo tanto disminuye la formación de ozono atmosférico. El etanol, otro aditivo para la gasolina, presenta una reactividad en condiciones atmosféricas ligeramente mayor que la del MTBE, y como también es un compuesto oxigenado, ayudaría a reducir las emisiones de CO, sin embargo, se prefiere el MTBE por sus características de mezclado como resultado de su moderada polaridad, la cual es menor que la del etanol.

Otro efecto que ayuda a disminuir la formación de ozono atmosférico es que al mezclarse las gasolinas con el MTBE, la volatilidad se reduce, por lo que las emisiones de hidrocarburos por evaporación se ven disminuidas.

PRODUCCIÓN E IMPORTACIÓN.

La producción de este compuesto ha tenido un marcado crecimiento debido a su importancia, en 1993 era alrededor de 17×10^6 ton/año en todo el mundo, que significaba casi el doble de la capacidad instalada en 1990.

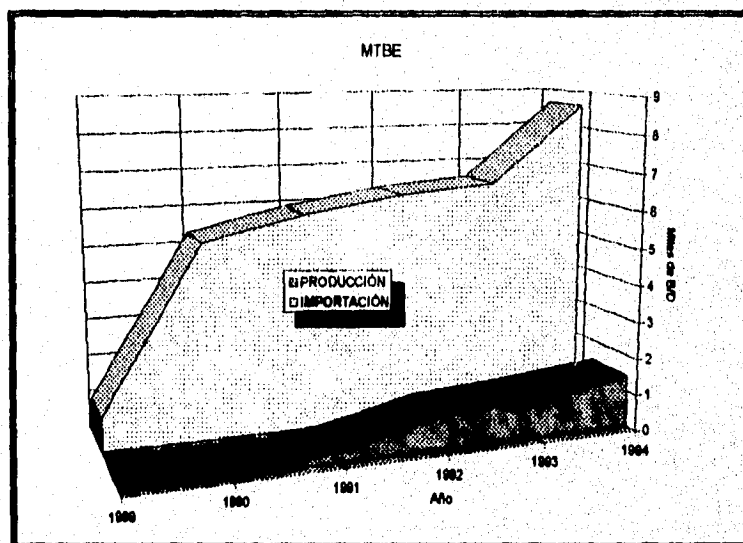
En 1989 México empezó a importar MTBE, como se muestra en la tabla 2.1, también se ve que, apenas en 1991 se inició la elaboración de este producto en nuestro país.

Tabla 2.1

Producción e importación de MTBE

Año	Producción [mil B/D]	Importación [mil B/D]	Importación 10 ⁻⁶ DÓLARES
1989	0.00	0.90	12.6
1990	0.00	5.31	90.1
1991	0.35	5.92	86.6
1992	0.96	6.32	111.3
1993	1.14	6.52	94.7
1994	1.42	8.62	122.5

En febrero de 1996 se puso en funcionamiento la planta en Tula Hdgo. que es la que se simuló en este trabajo. Ésta tiene una capacidad de 90 000 ton/año y es en la actualidad la que más produce.



Producción e importación de MTBE en México

Figura 2.1

Aún cuando la capacidad instalada en México se ha incrementado, no es suficiente para satisfacer los requerimientos internos, por lo que se sigue importando en gran proporción.

El consumo de MTBE depende de la cantidad de gasolina que produzca el país, y ésta se ha incrementado de 1989 a 1994 en un 19 %, siendo notorio además, que la cantidad exportada cada año es considerablemente mayor.

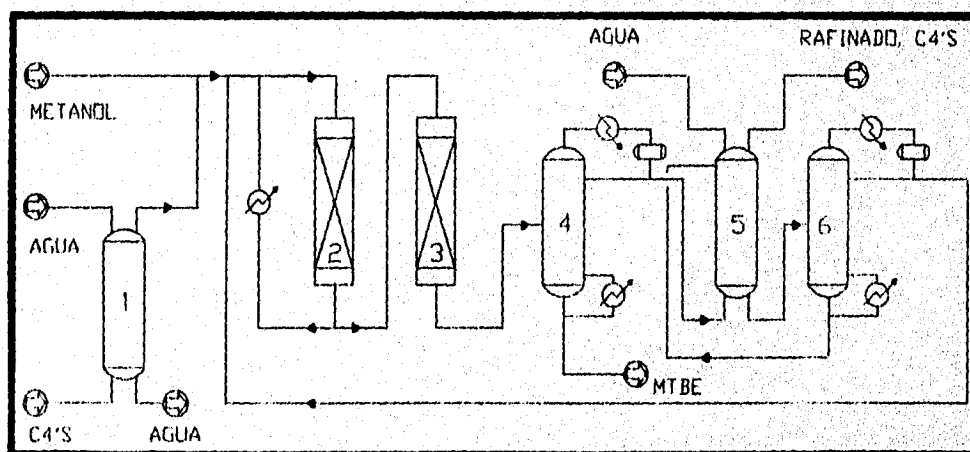
Tabla 2.2

Producción, importación y exportación de gasolinas en México

Año	Producción [mil B/D]	Importación [mil B/D]	Exportación [mil B/D]
1989	427.40	28.20	5.20
1990	464.10	30.60	9.30
1991	473.20	68.70	15.50
1992	463.90	82.60	22.40
1993	482.50	84.60	35.40
1994	509.40	66.30	41.10

La tabla 2.2 nos muestra que el consumo de este producto es muy grande, por lo que destaca la importancia de producirlo con la mejor calidad posible, tanto para el cuidado de los motores, como para disminuir los efectos contra el ambiente.

Como el auge del MTBE ha sido a nivel mundial, resulta lógico que el proceso para elaborarlo haya tenido cambios, siendo el más importante la incorporación de la torre de destilación con reacción. La forma anterior de producirlo (sin la columna con reacción) es como lo muestra la figura 2.2:



Obtención del MTBE, sin destilación reactiva

Figura 2.2

Los equipos enumerados en la figura 2.2 son los siguientes:

1. Torre de lavado de la alimentación.
2. Primer reactor adiabático de lecho fijo.
3. Segundo reactor adiabático de lecho fijo.
4. Torre de destilación para separar el producto MTBE.
5. Torre de extracción de metanol.
6. Torre de destilación agua-metanol.

El sistema de producción como en el proceso de la figura 2.2 está licenciado por Hüls AG and UOP, y en 1994, se tenían 23 unidades instaladas con este método, según la revista "Hydrocarbon Processing"; la diferencia importante que deja ver la figura 2.2 con respecto al proceso que se simuló para este trabajo (fig. 3.1), es que se tiene un segundo reactor adiabático de lecho fijo (3), y que la torre de donde sale el producto final (4) realiza una destilación común, es decir, sin reacción química. También puede notarse que aparte del segundo reactor, tiene además una torre de destilación (6); esta torre es igualmente requerida por el proceso con destilación reactiva, pero se encuentra situada en otra planta del complejo petroquímico, por lo que en este trabajo, no se reporta su simulación.

Existen varios procesos para la producción de MTBE, pero son básicamente iguales a los que muestran las figuras 2.2 y 3.1, es decir, los que no tienen la destilación reactiva, tienen dos reactores principales y la necesaria destilación posterior.

CAPÍTULO III

CAPÍTULO III

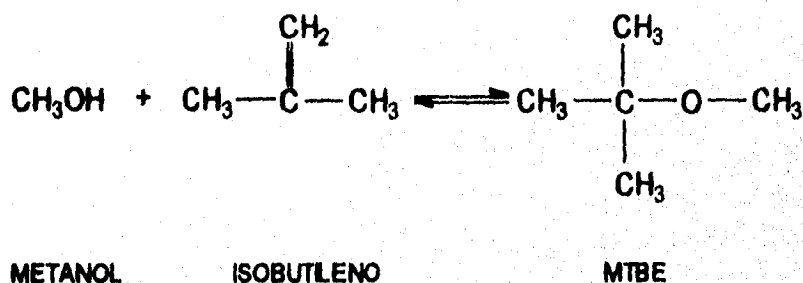
DESCRIPCIÓN DEL PROCESO.

QUÍMICA DEL PROCESO.

El MTBE es producido por la adición simple del metanol al isobutileno contenido en la corriente de C4's. El catalizador es una resina de intercambio iónico macroreticular basada en copolímero de divinilbenceno y estireno sulfurado. Las condiciones de reacción aseguran que para este catalizador, se obtengan un alto rendimiento y alta selectividad de ambos reactantes, para permitir la producción de MTBE con la calidad requerida en la corriente del fondo de la columna catalítica.

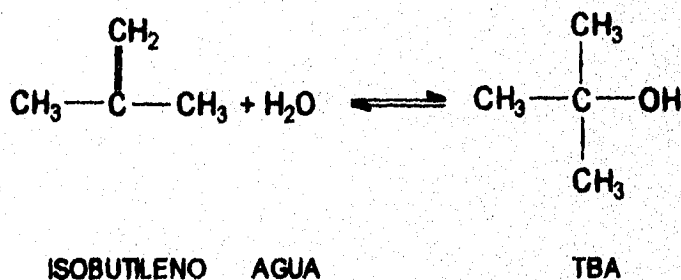
El MTBE también puede usarse como el componente básico para obtener isobutileno de alto grado de pureza.

REACCIÓN PRINCIPAL:

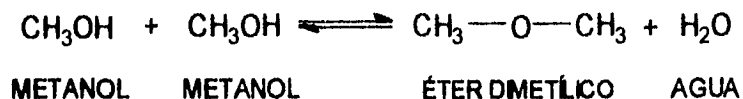


REACCIONES SECUNDARIAS:

Sin embargo ocurren también reacciones secundarias, aunque en grado despreciable; algunas de éstas son:

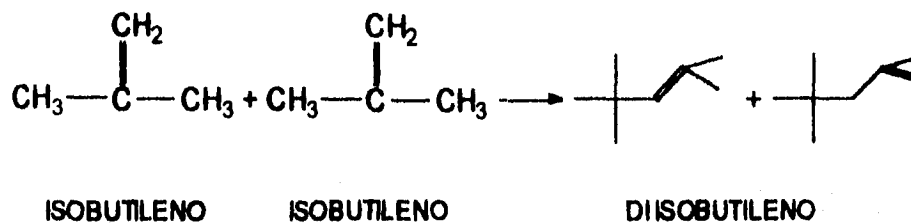


La hidratación del isobutileno para formar alcohol ter-butílico es función del contenido de agua; la cual proviene de la alimentación al reactor y de la reacción de formación del éter dimetilico.



La reacción anterior depende de la temperatura, condiciones de flujo y de la concentración del metanol. En las condiciones de reacción, como ya se mencionó, no se tiene un rendimiento apreciable para este caso (< 0.15 %).

También se forman en muy pequeñas cantidades dímeros del isobutileno, como lo describe la siguiente reacción:



La formación del MTBE es una reacción reversible exotérmica, es decir, el equilibrio químico se favorece hacia el MTBE a bajas temperaturas, pero la rapidez de reacción se favorece a temperaturas altas.

La cinética de la reacción de formación del MTBE, según Wang y Qin, tal como esta reportada por Zheng Yuxiang y Xu Xien, es:

$$R_{\text{MTBE}} = k_+ C_{\text{ISOB}} - k_- C_{\text{MTBE}}$$

Donde:

$$k_+ = 2.5152 \times 10^7 e^{\left(\frac{-6844}{T}\right)}$$

$$k_- = 8.2680 \times 10^{11} e^{\left(\frac{-11381}{T}\right)}$$

La temperatura debe estar en [K] y la rapidez de reacción en [kmol/kg cat. h]. La reacción es exotérmica, con un $\Delta H = -37.0$ kJ/mol a 25 °C.

DESCRIPCIÓN DEL PROCESO.

El proceso de producción del MTBE consiste en las siguientes secciones, las cuales pueden verse con mayor detalle en el diagrama de proceso, de la figura 3.1 (no se muestran los siguientes compuestos: alcohol ter-butílico, éter dimetilico, metil sec-butil éter, y los dimeros, ya que en todas las corrientes de proceso éstos se encuentran en cantidades no significativas):

- Purificación de la alimentación. La corriente de alimentación de C4's contiene impurezas básicas (hidróxido de sodio, monoetanol amina, monoetil y dietil amina, amoniaco, dimetil formamida, entre otras) que aún en pequeñas proporciones envenenan al catalizador; éstas deben ser removidas mediante un lavado con agua. El lavado se logra mediante una torre de platos perforados con agua de calidad para alimentación a calderas (BFW).
- Reactor principal. La mayor parte de la conversión del isobutileno (89 %) ocurre en el reactor principal. En este equipo están en oposición el equilibrio químico y la cinética de la reacción, ya que al aumentar la temperatura en la entrada al reactor se incrementaría la rapidez de reacción, pero el equilibrio se vería desplazado hacia los reactivos, y si se disminuye la misma temperatura, el efecto sería contrario, dando lugar lo último a que se incremente la cantidad de catalizador para aumentar la conversión. Se tiene entonces que la temperatura de diseño es suficientemente alta para reducir la cantidad de catalizador, que se obtenga una excelente selectividad y una elevada conversión. El reactor es de tipo tubular, de una sola sección, empacado, operado en forma adiabática y con una recirculación, para remover el exceso de calor producido por la reacción y dar condiciones de flujo apropiadas para el control de la expansión del catalizador. Es necesario poner trampas y filtros de resinas para eliminar de las corrientes de proceso las partículas de catalizador arrastradas por el efluente del reactor.
- Columna catalítica. El MTBE y los C4's son separados en una columna catalítica en la cual se recupera como producto del domo, el metanol y los restantes C4's, y como producto de fondo, el MTBE. En esta torre hay una sección con catalizador para que se lleve la conversión a valores más altos (98 %), esto gracias a que el MTBE apenas formado, se separa inmediatamente por la destilación, mientras que siguen llegando a esa zona, tanto isobutileno como metanol.

En la zona catalítica se tiene un exceso de metanol, el cual favorece la reacción de eterificación. La corriente de C4's que se obtiene por domos, se encuentra saturada de metanol, el cual se recupera para usarse de nuevo.

- Lavado del metanol. El metanol que acompaña a la corriente de C4's se recupera por una extracción con agua, en una torre de platos perforados. Tanto el agua como el metanol de esta sección se separan por destilación en otra sección del complejo petroquímico.

En la mayoría de los casos el beneficio más importante de un proceso con destilación reactiva es la reducción del capital de inversión, ya que al llevar a cabo la reacción química y la destilación en el mismo equipo, se reduce parte de la inversión al no hacer falta adquirir lo que sería el reactor, con sus respectivos aditamentos.

En este caso en particular, el motivo de usar la destilación reactiva es que la reacción en el reactor tubular está limitada por el equilibrio químico, y como se mencionó anteriormente, se necesitarían otros equipos adicionales para obtener el MTBE con la calidad requerida.

También, se tiene otro beneficio importante, y es que el equilibrio químico en la columna de destilación es desplazado hacia el lado de los productos, ya que el MTBE se separa de la mezcla reaccionante conforme se va produciendo, y los reactivos se siguen alimentando a la zona catalítica; realizándose además la destilación al mismo tiempo; esto permite obtener un grado de conversión cercano al 100 %, dejando al producto listo para su uso posterior con la gasolina. Además como la reacción es exotérmica, este mismo calor de reacción que, aunque es relativamente bajo, se aprovecha para la separación de los compuestos en la destilación. Beneficios adicionales que ofrece en general la destilación reactiva son:

- La adaptabilidad del proceso a fluctuaciones fuertes en la pureza de la alimentación.
- La simplicidad en la operación del equipo, ya que generalmente se puede hacer con los controles estándares de una destilación.
- Se puede hacer uso de torres de destilación existentes para adaptar el nuevo proceso con reacción.

PROPIEDADES FÍSICAS DEL MTBE:

La mezcla de compuestos que intervienen en la simulación son tanto compuestos no polares (n-butano, isobutano, 2 trans-buteno, 2 cis-buteno, isobutileno, propano, etc.), como compuestos polares (MTBE, metanol, agua), lo cual provoca que las distintas mezclas que forman parte de todo el proceso tengan un carácter fuertemente no ideal, dificultándose el cálculo de propiedades termodinámicas, así como el equilibrio de fases y el equilibrio químico. En la siguiente tabla, se muestran algunas propiedades físicas del MTBE.

Tabla 3.1
Propiedades físicas del MTBE

Masa molecular	88.15 g/mol
Densidad a 20 °C	740.5 kg/m ³
Temperatura de ebullición a 1 atm.	55.2 °C
Presión de vapor a 30 °C	0.412 atm.
Temperatura de cristalización	-108 °C
Calor específico a 25 °C	0.51 kcal/kg °C
Calor latente de vaporización a 25 °C	81.7 kcal/kg
ΔH_f (liq) standard kcal/mol	-76.6
ΔH_f (vap) standard kcal/mol	-66.1
Capacidad calorífica del liq.	0.045 kcal/mol °C
Solubilidad:	
- MTBE en agua 100 g de sol. a 20°C	4.8 g
- Agua en MTBE 100 g de sol. a 20°C	1.5 g
Azeótropos a 1 atm. (% peso)	
- Agua: 4, MTBE: 96	62.6 °C
- Metanol: 14, MTBE: 86	51.6 °C
- C4's, MTBE	No existentes

Como se puede ver, el MTBE forma azeótropos con el metanol y con el agua, y con esta última forma dos fases líquidas con cantidades relativamente pequeñas de cualquiera de los dos compuestos; Afortunadamente en las corrientes que contienen MTBE, el agua está en proporciones muy pequeñas, por lo que no se forman las dos fases líquidas ni en el reactor principal ni en la columna reactiva.

A presión atmosférica, el MTBE tiene una temperatura de ebullición menor que la del metanol, lo que significa que a esta presión, el MTBE es más volátil; sin embargo es un producto del fondo de la columna y el metanol del domo, esto se debe a que la torre se encuentra a presiones mayores de 7 atm., condiciones en las que el metanol es un compuesto más volátil que el MTBE.

Con excepción de la torre catalítica, las corrientes con C4's se mantienen a presiones y temperaturas en las que sus compuestos se encuentran en fase líquida, la cual es inmiscible con el agua, característica que se utiliza en las torres de extracción líquido-líquido tanto para el lavado inicial de la alimentación como en la recuperación de metanol.

CAPÍTULO IV

CAPÍTULO IV

SIMULACIÓN.

METODOLOGÍA.

El programa empleado fue ASPEN PLUS (TM) versión 9.1-3. Para realizar la simulación es más conveniente hacerla por partes, es decir, primero los equipos que son más complicados, que en este caso son, la torre de destilación reactiva, el reactor tubular y por último las torres de extracción. Esto es por que el método de convergencia adecuado para cada equipo puede ser distinto, al igual que la ecuación de estado y aparte se requiere de un ajuste de parámetros particulares de cada equipo, de este modo es más fácil encontrar las fallas una vez que se ha integrado toda la planta.

Para la simulación de la torre catalítica o torre destilación reactiva, el método de convergencia usado fue el NONIDEAL. Este método es recomendado para mezclas con alto grado de no-idealidad, como es el caso, ya que como se mencionó anteriormente, se tiene una mezcla entre compuestos no polares y polares.

Para la simulación de las columna de extracción fue suficiente con el algoritmo STANDARD, que es el método por omisión; la opción para el cálculo de propiedades termodinámicas utilizada en este caso (UNIFAC-LL) fue distinta que para los demás equipos, esto por que se tiene que elegir una ecuación especial para sistemas de equilibrio liquido-liquido. En todos los demás equipos, el algoritmo fue el STANDARD. El algoritmo de convergencia utilizado para todo el proceso fue el BROYDEN, que es un método ampliamente recomendado y que ofrece ventajas en el número de iteraciones con respecto a los métodos de NEWTON, SECANTE o WEGSTEIN; sin embargo el proceso no forma ciclos complicados ni hay un gran número de equipos, por lo que se probó también el algoritmo SECANTE, sin que se notara una gran diferencia en cuanto al tiempo de convergencia ni al número de iteraciones.

La ecuación de estado que se utilizó para la columna con destilación reactiva y para todo el proceso (excepto en las columnas de extracción y sus respectivos decantadores) es la SOAVE-REDLICH-KWONG Predictiva (PSRK), que de entre las opciones que ofrece ASPEN, es con la que se obtuvieron los mejores resultados, las otras ecuaciones (Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson, Wilson-RK, Van-Laar, Uniquac, Unifac, Redlich-Kwong-Aspen, etc.) daban resultados lejanos a los de diseño o provocaban un bloqueo en el sistema de la computadora. La ecuación PSRK es una modificación a la ecuación común de Soave-Redlich-Kwong, que es la siguiente:

$$P = \frac{RT}{V_m - b_m} - \frac{a_m}{V_m(V_m + b_m)}$$

Donde:

$$a_m = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$$b_m = \sum_i x_i b_i$$

$$a_i = \alpha_i 0.42747 \frac{R^2 T_{ci}^2}{P_{ci}}$$

$$\alpha_i = \left(1 + m_i \left[1 - T_n^{1/2}\right]\right)^2$$

$$m_i = 0.48 + 1.57 \omega_i - 0.176 \omega_i^2$$

$$b_i = 0.08664 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$$

La modificación que introduce el modelo PSRK radica en el cálculo de a_m , el cual se lleva a cabo de la siguiente forma:

$$\frac{a_m}{b_m} = \sum_i x_i \frac{a_i}{b_i} - \frac{1}{\Lambda'} A_m^E$$

$$\Lambda' = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left[\frac{\frac{V_m}{b_m} + \lambda_1}{\frac{V_m}{b_m} + \lambda_2} \right]$$

Para las ecuaciones SRK se tiene que:

$$\lambda_1 = 1$$

$$\lambda_2 = 0$$

Si ASPEN tiene en su banco de datos los parámetros binarios requeridos, el término A_m^E (energía de Helmholtz en exceso) se calcula con las ecuaciones de mezclas líquidas como la ecuación de Wilson o la de Uniquac, en caso contrario, utiliza la ecuación UNIFAC, que no necesita datos experimentales, ya que hace uso de la teoría de contribución de grupos, de ahí el carácter predictivo de la ecuación PSRK.

Para las columnas de extracción y sus tanques decantadores, se utilizó la ecuación UNIFAC-LL (donde LL significa que es especial para sistemas líquido-líquido) que es en sí misma, la ecuación original UNIFAC pero con valores para los grupos funcionales calculados a partir de datos de equilibrio líquido-líquido y no de equilibrio líquido-vapor.

MODELO, SIMULACIÓN Y COMPARACIÓN CON RESULTADOS.

Se presenta a continuación, una comparación entre los datos reportados por el simulador y los de diseño, así como aspectos importantes referentes a la simulación de cada equipo en particular.

Aparecen algunas figuras que representan las secciones en donde se aplican los balances de materia y energía de los equipos seleccionados y las ecuaciones correspondientes, la nomenclatura para esto es la siguiente:

L : Flujo de líquido [moles/tiempo]
V : Flujo de vapor [moles/tiempo]
F : Flujo de alimentación [moles/tiempo]
 x : Fracción molar en fase líquida
 y : Fracción molar en fase vapor
 z : Fracción molar en la alimentación
H : Entalpía molar [energía/moles]
P : Presión [atmósferas]
T : Temperatura
Q : Carga térmica [energía/tiempo]
K : Relación de equilibrio de fases
 r : Rapidez de reacción [moles/(tiempo)(masa catalizador)]
 v : Coeficiente estequiométrico
W : Masa de catalizador
 Z_R : Variable de posición longitudinal en el reactor principal [distancia]
 L_R : Longitud de la sección empacada en el reactor principal [distancia]
 C_p : Capacidad calorífica a presión constante [energía/(mol)(temperatura)]
X : Conversión

Subíndices:

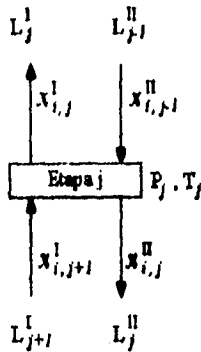
i : Índice del número de componente
 j : Índice del número de etapa
L : Referente a la fase líquida
V : Referente a la fase vapor
F : Referente a la corriente de alimentación
R : Referente a la reacción

Superíndices:

I : Fase líquida I
II : Segunda fase líquida

TORRES DE EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO:

El balance de materia aplicado a la siguiente sección, que representa un plato de una torre de extracción líquido-líquido, bajo las consideraciones de que las etapas alcanzan el equilibrio de fases, operación en forma isotérmica y adiabática, queda de la siguiente manera



Balance de materia total:

$$L_{j-1}^I + L_{j+1}^{II} = L_j^I + L_j^{II}$$

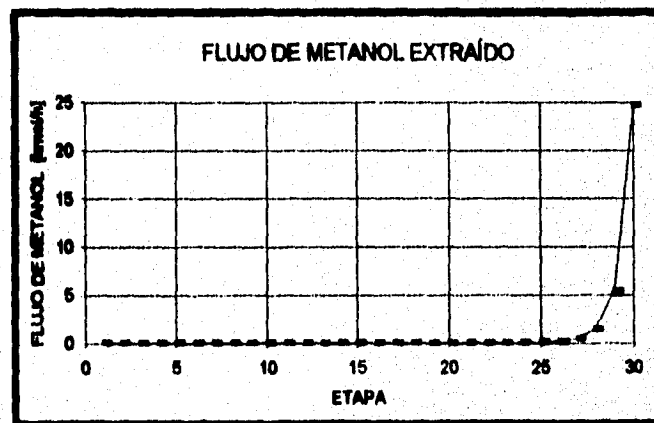
Balance de materia por componente:

$$L_{j-1}^I x_{i,j-1}^I + L_{j+1}^{II} x_{i,j+1}^{II} = L_j^I x_{i,j}^I + L_j^{II} x_{i,j}^{II}$$

Equilibrio de fases:

$$K_i^{L-L} = \frac{x_i^I}{x_i^{II}}$$

El proceso cuenta con dos torres de extracción, la primera (01-E-101) es para lavado de la alimentación y la segunda (01-E-103) para extraer el metanol que no reaccionó en la torre catalítica. Las condiciones de operación de ambas, están en la figura 3.1. La función de la primer torre es para eliminar impurezas que están en cantidades muy pequeñas en la alimentación de C4's, por lo que las corrientes que salen del equipo no tienen cambio apreciable de composición y flujo, motivo por el cual no se presenta el perfil de concentraciones. La segunda torre tiene como función extraer el metanol que no reacciona y que posteriormente se envía a recuperado para utilizarlo nuevamente en el proceso. En la figura 4.1 se muestra el perfil de flujos de metanol intercambiado en la segunda torre, que es el único compuesto que se intercambia de manera apreciable entre las dos corrientes líquidas.



Flujo de metanol entre las dos fases líquidas

Figura 4.1

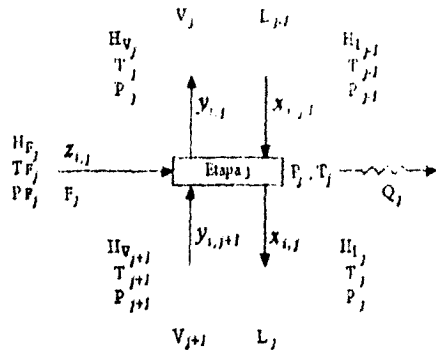
Los valores de las fracciones mol y flujos totales de la torre 01-E-103 están indicados en la tabla 4.1.

Tabla 4.1

Datos de la torre 01-E-103, obtenidos por simulación

ETAPA	FRACC. MOL DE MET. EN FASE LIQ. 1	FRACC. MOL DE MET. EN FASE LIQ. 2	FLUJO TOTAL DE LIQ. 1 [kmol/h]	FLUJO TOTAL DE LIQ. 2 [kmol/h]	METANOL EXTRAÍDO [kmol/h]
1	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.5	0.099971
2	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
3	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
4	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
5	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
6	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
7	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
8	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
9	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
10	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
11	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
12	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
13	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
14	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099944
15	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099946
16	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099946
17	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099946
18	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099949
19	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.099962
20	5.73E-04	6.83E-05	244.5	586.9	0.100003
21	5.74E-04	6.84E-05	244.5	586.9	0.100152
22	5.77E-04	6.88E-05	244.5	586.9	0.100673
23	5.87E-04	7.00E-05	244.5	586.9	0.102488
24	6.24E-04	7.44E-05	244.5	586.9	0.108841
25	7.51E-04	8.95E-05	244.6	586.9	0.131165
26	1.20E-03	1.43E-04	244.7	586.9	0.209307
27	2.77E-03	3.29E-04	245.1	587.0	0.485194
28	8.35E-03	9.84E-04	246.7	587.5	1.481907
29	2.91E-02	3.33E-03	252.5	589.0	5.377753
30	1.18E-01	1.22E-02	270.7	594.8	24.69814

COLUMNA DE DESTILACIÓN CATALÍTICA:



Los balances de materia y energía y la ecuación de equilibrio de fases para el caso de la columna catalítica (01-E-102) son los siguientes, sin considerar corrientes laterales, ya que éstas no se presentan en el equipo.

Balance de materia por componente:

$$F_j z_{i,j} + L_{j+1} x_{i,j+1} - L_j x_{i,j} + V_{j+1} y_{i,j+1} - V_j y_{i,j} - v_i r_j W_j = 0$$

Balance de energía:

$$F_j H_{F_j} + L_{j+1} H_{L_{j+1}} - L_j H_{L_j} + V_{j+1} H_{V_{j+1}} - V_j H_{V_j} = 0$$

Equilibrio de fases:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i}$$

Estas ecuaciones son aplicables tanto a platos que tienen catalizador, donde se realiza la reacción química, como a los que no tienen, y por tanto en donde no se realiza ninguna conversión; para esto último solo es necesario igualar a cero el término de la masa de catalizador ($W = 0$). No se incluye en el balance de energía el término del calor de reacción, por que las entalpías de las mezclas se calibran con el estado de referencia de elementos.

La torre tiene 58 platos, seis de los cuales tienen catalizador (del 14 al 19 enumerados de arriba hacia abajo), un condensador total y un rehervidor parcial. Tiene 4 entradas de alimentación, una de la alimentación principal en el plato 37 y tres entradas de alimentación de metanol en los platos 14, 16 y 18. Del primer plato hasta el 36, la columna tiene un diámetro de 2.1 m y del 37 hasta el 58 de 2.6 m.

Las condiciones de diseño de la torre son:

Presión domo:	8.1 kgf/cm ²
Presión 1er plato:	8.6 kgf/cm ²
Presión rehervidor:	9.6 kgf/cm ²
Reflujo molar:	0.8879
Flujo por domos:	613.08 kmol/h

La tabla 4.2 muestra la comparación de los parámetros obtenidos con la simulación y los reportados por diseño.

Tabla 4.2

Comparación de parámetros de la columna catalítica

Parámetros de la columna catalítica	Diseño	Simulación
Temperatura del domo [°C]:	55	60
Temperatura del fondo [°C]:	142	142
Carga térmica del condensador [MM kcal/h]:	-5.472	-5.196
Carga térmica del rehervidor [MM kcal/h]:	5.064	4.928

El simulador maneja cada plato como una etapa de separación pero nombrando al condensador y al rehervidor como la primera y última etapas, respectivamente; por lo que en adelante se hará referencia a 60 etapas, en vez del número de platos.

La Tabla 4.3 reporta los datos de la torre catalítica calculados por el simulador.

Tabla 4.3

Datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna

Etapa	Temperatura [°C]	Presión [kgf/cm ²]	Flujo de líquido [kmol/h]	Flujo de vapor [kmol/h]
1	60	8.10	544.3	0.0
2	65	8.60	553.9	1157.4
3	66	8.62	553.2	1167.0
4	66	8.63	552.8	1166.3
5	67	8.65	552.3	1165.8
6	67	8.67	551.6	1165.3
7	67	8.69	550.7	1164.7
8	67	8.70	549.6	1163.8
9	68	8.72	548.1	1162.7
10	68	8.74	546.3	1161.2
11	68	8.76	543.9	1159.3
12	69	8.77	541.0	1157.0
13	70	8.79	537.2	1154.0
14	70	8.81	532.4	1150.3
15	71	8.82	543.2	1145.5

Tabla 4.3, continuación

Datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna

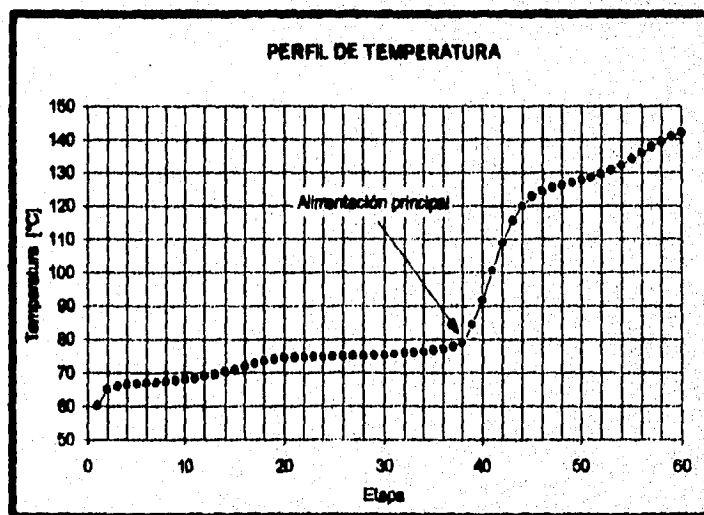
Etapa	Temperatura [°C]	Presión [kgf/cm ²]	Flujo de líquido [kmol/h]	Flujo de vapor [kmol/h]
16	72	8.84	535.6	1146.5
17	73	8.86	527.9	1140.5
18	73	8.88	520.4	1134.1
19	74	8.89	513.3	1127.8
20	75	8.91	498.5	1121.9
21	75	8.93	497.4	1111.4
22	75	8.94	496.9	1110.3
23	75	8.96	496.6	1109.8
24	75	8.98	496.4	1109.5
25	75	9.00	496.3	1109.4
26	75	9.01	496.2	1109.3
27	75	9.03	496.0	1109.1
28	75	9.05	495.8	1108.9
29	75	9.07	495.4	1108.7
30	75	9.08	494.8	1108.3
31	76	9.10	494.1	1107.8
32	76	9.12	493.0	1107.0
33	76	9.13	491.5	1105.9
34	76	9.15	489.4	1104.4
35	77	9.17	486.6	1102.3
36	77	9.19	482.9	1099.5
37	78	9.20	478.2	1095.8
38	79	9.22	1119.8	1010.9
39	84	9.24	1094.2	989.8
40	92	9.26	1073.7	964.2
41	100	9.27	1069.9	943.7
42	109	9.29	1083.5	940.0
43	116	9.31	1104.3	953.5
44	120	9.32	1122.9	974.4
45	123	9.34	1135.7	992.9

Tabla 4.3, continuación

Datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna

Etapa	Temperatura [°C]	Presión [kgf/cm ²]	Flujo de líquido [kmol/h]	Flujo de vapor [kmol/h]
46	124	9.36	1143.4	1005.7
47	126	9.38	1147.6	1013.4
48	126	9.39	1149.6	1017.7
49	127	9.41	1150.3	1019.7
50	128	9.43	1150.0	1020.3
51	129	9.44	1148.9	1020.0
52	130	9.46	1147.4	1019.0
53	131	9.48	1145.7	1017.5
54	132	9.50	1144.2	1015.7
55	134	9.51	1143.5	1014.2
56	136	9.53	1144.2	1013.6
57	138	9.55	1146.3	1014.2
58	139	9.57	1149.4	1016.3
59	141	9.58	1153.1	1019.5
60	142	9.60	129.9	1023.1

La figura 4.2 muestra el perfil de temperaturas obtenido por la simulación:



Perfil de temperatura de la torre catalítica

Figura 4.2

Los perfiles de fracciones molares se muestran a continuación, en las tablas 4.4 y 4.5 y en las figuras 4.3 y 4.4.

Tabla 4.4

Fraciones molares de los compuestos en la fase líquida en la torre catalítica

Etapa	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
1	0.0519	0.0000	0.0034	0.0369	0.2933	0.1693	0.0885	0.1958	0.1577	0.0009	0.0022
2	0.0495	0.0000	0.0033	0.0160	0.2541	0.1630	0.0978	0.2214	0.1901	0.0025	0.0024
3	0.0465	0.0000	0.0031	0.0115	0.2348	0.1582	0.1012	0.2321	0.2058	0.0044	0.0024
4	0.0441	0.0001	0.0031	0.0106	0.2258	0.1552	0.1023	0.2364	0.2134	0.0067	0.0024
5	0.0423	0.0001	0.0030	0.0104	0.2215	0.1534	0.1026	0.2378	0.2169	0.0096	0.0023
6	0.0411	0.0002	0.0030	0.0103	0.2193	0.1522	0.1024	0.2379	0.2182	0.0130	0.0023
7	0.0401	0.0004	0.0030	0.0103	0.2179	0.1513	0.1021	0.2372	0.2183	0.0172	0.0022
8	0.0393	0.0008	0.0030	0.0103	0.2168	0.1504	0.1016	0.2360	0.2175	0.0222	0.0021
9	0.0387	0.0014	0.0029	0.0103	0.2157	0.1494	0.1009	0.2344	0.2162	0.0280	0.0021
10	0.0380	0.0024	0.0029	0.0103	0.2144	0.1483	0.1002	0.2323	0.2143	0.0349	0.0020
11	0.0375	0.0041	0.0029	0.0102	0.2128	0.1469	0.0992	0.2298	0.2119	0.0427	0.0020
12	0.0370	0.0070	0.0029	0.0102	0.2109	0.1453	0.0980	0.2267	0.2090	0.0513	0.0019
13	0.0365	0.0116	0.0028	0.0101	0.2084	0.1433	0.0965	0.2229	0.2053	0.0606	0.0019
14	0.0363	0.0190	0.0028	0.0100	0.2053	0.1408	0.0946	0.2183	0.2009	0.0700	0.0020
15	0.0363	0.0306	0.0027	0.0099	0.2013	0.1379	0.0923	0.2127	0.1954	0.0788	0.0020
16	0.0282	0.0406	0.0047	0.0098	0.1986	0.1359	0.0907	0.2090	0.1918	0.0886	0.0020
17	0.0259	0.0503	0.0066	0.0098	0.1952	0.1333	0.0887	0.2041	0.1871	0.0969	0.0020
18	0.0261	0.0600	0.0083	0.0097	0.1918	0.1307	0.0866	0.1992	0.1822	0.1035	0.0021
19	0.0273	0.0697	0.0097	0.0096	0.1886	0.1283	0.0846	0.1945	0.1775	0.1079	0.0022
20	0.0290	0.0796	0.0110	0.0096	0.1858	0.1262	0.0828	0.1904	0.1733	0.1101	0.0023

Tabla 4.4, continuación

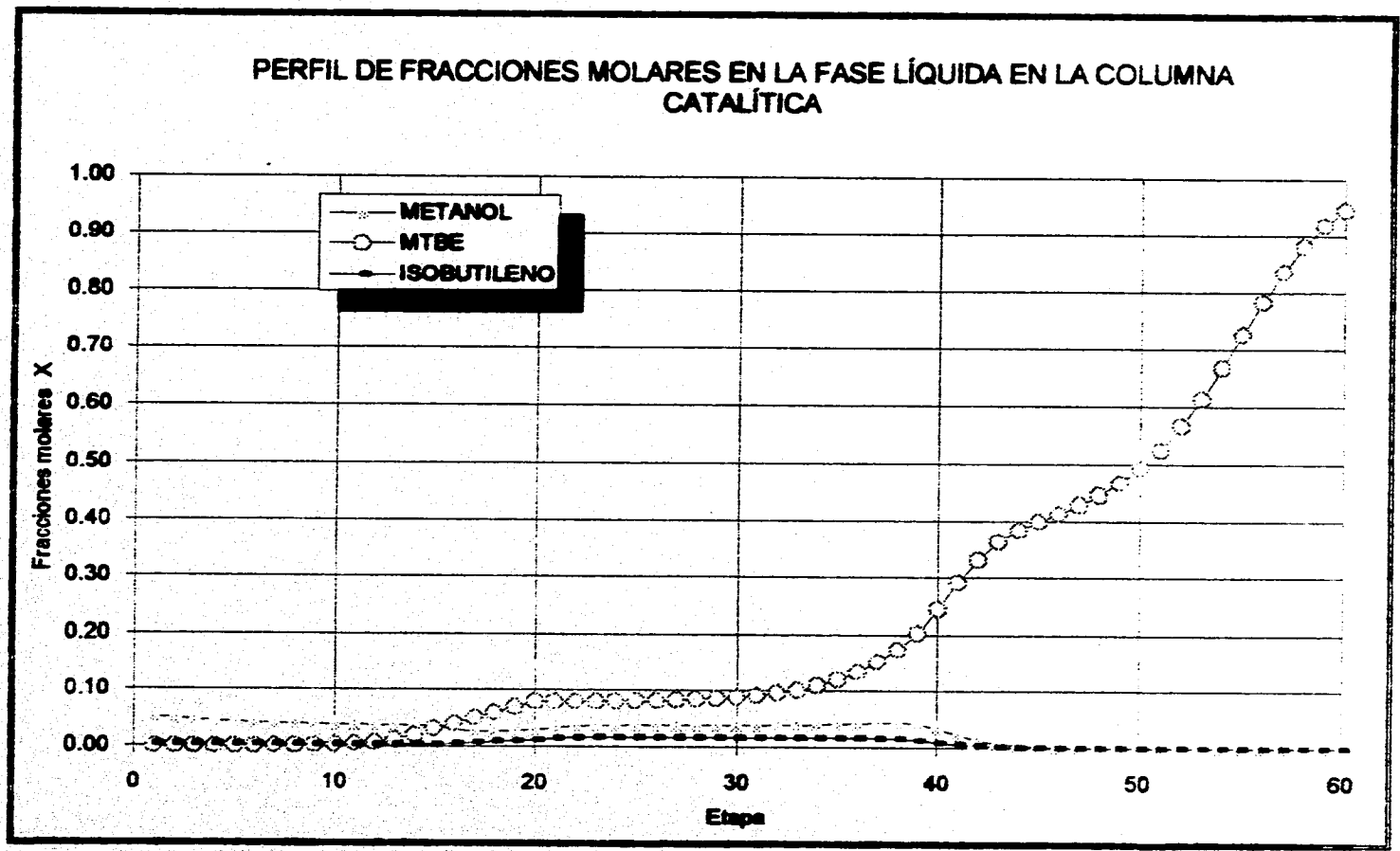
Fraciones molares de los compuestos en la fase líquida en la torre catalítica

Etapa	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
21	0.0335	0.0796	0.0147	0.0096	0.1847	0.1252	0.0817	0.1878	0.1705	0.1101	0.0024
22	0.0357	0.0798	0.0161	0.0096	0.1843	0.1248	0.0813	0.1867	0.1692	0.1100	0.0025
23	0.0367	0.0800	0.0166	0.0096	0.1842	0.1247	0.0810	0.1862	0.1686	0.1098	0.0026
24	0.0371	0.0804	0.0168	0.0096	0.1842	0.1246	0.0809	0.1860	0.1682	0.1094	0.0026
25	0.0374	0.0809	0.0169	0.0096	0.1842	0.1246	0.0809	0.1859	0.1681	0.1090	0.0026
26	0.0375	0.0815	0.0169	0.0096	0.1842	0.1246	0.0808	0.1858	0.1679	0.1084	0.0027
27	0.0376	0.0824	0.0169	0.0096	0.1842	0.1246	0.0808	0.1857	0.1678	0.1078	0.0027
28	0.0377	0.0836	0.0169	0.0096	0.1841	0.1245	0.0807	0.1855	0.1676	0.1069	0.0027
29	0.0378	0.0853	0.0169	0.0096	0.1839	0.1244	0.0806	0.1853	0.1674	0.1060	0.0027
30	0.0380	0.0876	0.0169	0.0096	0.1836	0.1243	0.0805	0.1850	0.1671	0.1047	0.0028
31	0.0382	0.0907	0.0168	0.0096	0.1833	0.1240	0.0802	0.1846	0.1667	0.1031	0.0028
32	0.0385	0.0949	0.0168	0.0096	0.1827	0.1237	0.0799	0.1839	0.1660	0.1011	0.0029
33	0.0389	0.1007	0.0167	0.0096	0.1818	0.1232	0.0795	0.1830	0.1652	0.0985	0.0030
34	0.0394	0.1085	0.0166	0.0095	0.1807	0.1225	0.0788	0.1818	0.1639	0.0952	0.0031
35	0.0402	0.1190	0.0165	0.0095	0.1790	0.1215	0.0780	0.1800	0.1622	0.0909	0.0033
36	0.0411	0.1327	0.0163	0.0094	0.1768	0.1201	0.0768	0.1777	0.1600	0.0855	0.0035
37	0.0423	0.1506	0.0160	0.0093	0.1739	0.1183	0.0753	0.1746	0.1570	0.0788	0.0039
38	0.0438	0.1737	0.0155	0.0080	0.1656	0.1145	0.0735	0.1712	0.1548	0.0750	0.0044
39	0.0412	0.2025	0.0124	0.0031	0.1206	0.0930	0.0669	0.1604	0.1542	0.1392	0.0066
40	0.0335	0.2438	0.0088	0.0011	0.0790	0.0675	0.0544	0.1334	0.1365	0.2335	0.0083

Tabla 4.4, continuación

Fraciones molares de los componentes en la fase líquida en la torre catalítica

Etapa	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
41	0.0228	0.2903	0.0056	0.0004	0.0461	0.0433	0.0390	0.0973	0.1060	0.3408	0.0084
42	0.0132	0.3313	0.0031	0.0001	0.0243	0.0249	0.0250	0.0630	0.0732	0.4349	0.0069
43	0.0068	0.3620	0.0016	0.0000	0.0119	0.0132	0.0148	0.0374	0.0463	0.5012	0.0049
44	0.0033	0.3835	0.0008	0.0000	0.0055	0.0066	0.0083	0.0210	0.0277	0.5402	0.0031
45	0.0015	0.3996	0.0004	0.0000	0.0025	0.0032	0.0045	0.0114	0.0160	0.5591	0.0019
46	0.0007	0.4135	0.0002	0.0000	0.0011	0.0015	0.0024	0.0060	0.0091	0.5643	0.0011
47	0.0003	0.4279	0.0001	0.0000	0.0005	0.0007	0.0013	0.0032	0.0051	0.5603	0.0007
48	0.0001	0.4447	0.0000	0.0000	0.0002	0.0003	0.0007	0.0016	0.0028	0.5491	0.0004
49	0.0001	0.4655	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0003	0.0009	0.0015	0.5312	0.0003
50	0.0000	0.4918	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0004	0.0008	0.5064	0.0002
51	0.0000	0.5250	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0005	0.4741	0.0001
52	0.0000	0.5657	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.4338	0.0001
53	0.0000	0.6140	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001	0.3858	0.0001
54	0.0000	0.6685	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.3314	0.0000
55	0.0000	0.7263	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2736	0.0000
56	0.0000	0.7836	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2164	0.0000
57	0.0000	0.8363	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1637	0.0000
58	0.0000	0.8814	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1186	0.0000
59	0.0000	0.9178	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0822	0.0000
60	0.0000	0.9456	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0544	0.0000



Fracciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en la fase líquida en la torre catalítica

Figura 4.3

Tabla 4.5

Fraciones molares de los compuestos en la fase vapor en la torre catalítica

Etape	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
1	0.0494	0.0000	0.0035	0.0836	0.3257	0.1691	0.0764	0.1655	0.1248	0.0003	0.0018
2	0.0519	0.0000	0.0034	0.0369	0.2933	0.1693	0.0885	0.1958	0.1577	0.0009	0.0022
3	0.0508	0.0000	0.0033	0.0270	0.2747	0.1663	0.0929	0.2080	0.1731	0.0017	0.0023
4	0.0494	0.0000	0.0033	0.0249	0.2656	0.1640	0.0945	0.2130	0.1805	0.0026	0.0023
5	0.0482	0.0000	0.0033	0.0244	0.2613	0.1626	0.0950	0.2150	0.1841	0.0037	0.0023
6	0.0474	0.0001	0.0032	0.0243	0.2593	0.1618	0.0952	0.2157	0.1858	0.0050	0.0022
7	0.0468	0.0001	0.0032	0.0243	0.2583	0.1612	0.0951	0.2157	0.1864	0.0067	0.0022
8	0.0463	0.0002	0.0032	0.0243	0.2576	0.1608	0.0949	0.2154	0.1864	0.0086	0.0022
9	0.0460	0.0004	0.0032	0.0243	0.2572	0.1604	0.0947	0.2148	0.1860	0.0110	0.0022
10	0.0457	0.0006	0.0032	0.0243	0.2567	0.1599	0.0944	0.2140	0.1853	0.0137	0.0021
11	0.0454	0.0011	0.0032	0.0243	0.2561	0.1594	0.0940	0.2130	0.1844	0.0169	0.0021
12	0.0451	0.0019	0.0032	0.0244	0.2555	0.1588	0.0935	0.2118	0.1832	0.0206	0.0021
13	0.0449	0.0033	0.0032	0.0244	0.2547	0.1580	0.0929	0.2103	0.1818	0.0246	0.0021
14	0.0447	0.0054	0.0031	0.0244	0.2537	0.1571	0.0922	0.2084	0.1800	0.0288	0.0021
15	0.0447	0.0089	0.0031	0.0244	0.2524	0.1561	0.0913	0.2062	0.1778	0.0330	0.0021
16	0.0365	0.0121	0.0055	0.0244	0.2522	0.1558	0.0910	0.2055	0.1769	0.0378	0.0021
17	0.0340	0.0153	0.0078	0.0245	0.2510	0.1548	0.0902	0.2034	0.1749	0.0421	0.0021
18	0.0341	0.0184	0.0099	0.0245	0.2494	0.1536	0.0891	0.2009	0.1724	0.0456	0.0021
19	0.0353	0.0216	0.0118	0.0245	0.2479	0.1523	0.0880	0.1983	0.1698	0.0482	0.0021
20	0.0369	0.0248	0.0135	0.0246	0.2466	0.1512	0.0871	0.1960	0.1674	0.0499	0.0022

Tabla 4.5, continuación

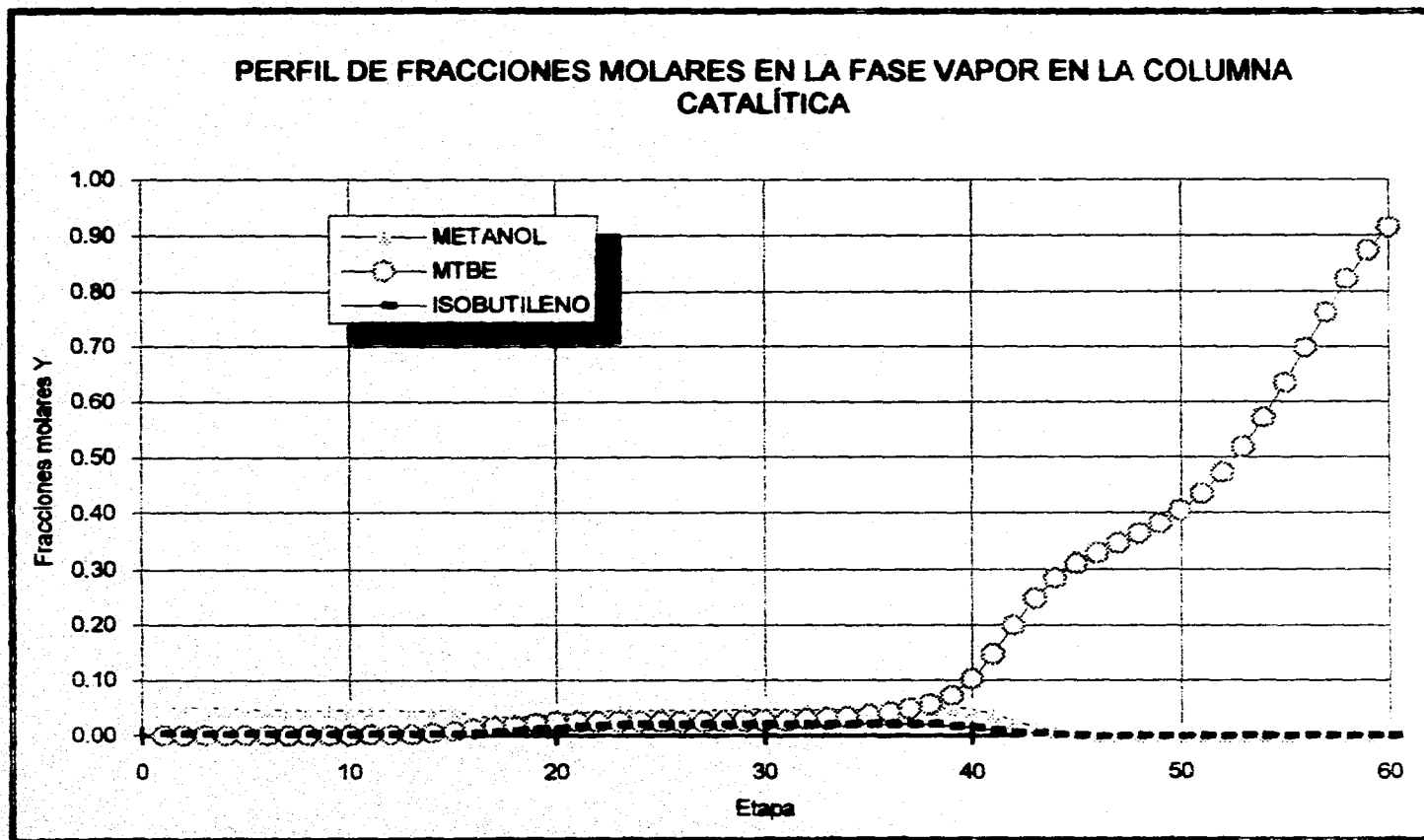
Fraciones molares de los compuestos en la fase vapor en la torre catalítica

Etapa	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
21	0.0415	0.0246	0.0179	0.0246	0.2451	0.1500	0.0859	0.1934	0.1647	0.0499	0.0022
22	0.0436	0.0246	0.0196	0.0247	0.2447	0.1496	0.0855	0.1923	0.1635	0.0498	0.0023
23	0.0445	0.0246	0.0202	0.0247	0.2446	0.1494	0.0853	0.1918	0.1629	0.0498	0.0023
24	0.0450	0.0247	0.0204	0.0247	0.2445	0.1493	0.0852	0.1915	0.1626	0.0496	0.0023
25	0.0452	0.0249	0.0205	0.0247	0.2445	0.1493	0.0851	0.1914	0.1625	0.0495	0.0024
26	0.0453	0.0251	0.0206	0.0247	0.2445	0.1493	0.0851	0.1914	0.1624	0.0493	0.0024
27	0.0454	0.0254	0.0206	0.0247	0.2445	0.1493	0.0851	0.1913	0.1623	0.0490	0.0024
28	0.0454	0.0257	0.0206	0.0247	0.2445	0.1493	0.0851	0.1913	0.1623	0.0487	0.0024
29	0.0455	0.0263	0.0206	0.0247	0.2445	0.1493	0.0850	0.1912	0.1622	0.0483	0.0024
30	0.0455	0.0270	0.0206	0.0247	0.2445	0.1493	0.0850	0.1911	0.1621	0.0479	0.0024
31	0.0456	0.0280	0.0206	0.0247	0.2444	0.1492	0.0849	0.1910	0.1620	0.0473	0.0024
32	0.0457	0.0293	0.0206	0.0247	0.2442	0.1491	0.0848	0.1908	0.1617	0.0465	0.0024
33	0.0458	0.0311	0.0205	0.0247	0.2440	0.1490	0.0847	0.1905	0.1615	0.0456	0.0025
34	0.0460	0.0336	0.0205	0.0247	0.2438	0.1488	0.0845	0.1901	0.1611	0.0444	0.0025
35	0.0463	0.0370	0.0205	0.0248	0.2434	0.1485	0.0842	0.1896	0.1605	0.0428	0.0026
36	0.0466	0.0414	0.0204	0.0248	0.2428	0.1481	0.0839	0.1888	0.1598	0.0407	0.0027
37	0.0470	0.0472	0.0204	0.0248	0.2420	0.1476	0.0834	0.1878	0.1587	0.0382	0.0028
38	0.0481	0.0554	0.0201	0.0216	0.2361	0.1460	0.0834	0.1886	0.1602	0.0375	0.0030
39	0.0496	0.0724	0.0175	0.0090	0.1874	0.1295	0.0831	0.1937	0.1751	0.0777	0.0050
40	0.0467	0.1024	0.0140	0.0035	0.1369	0.1055	0.0759	0.1820	0.1750	0.1506	0.0075

Tabla 4.5, continuación

Fraciones molares de los compuestos en la fase vapor en la torre catalítica

Etapa	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
41	0.0381	0.1472	0.0100	0.0013	0.0899	0.0768	0.0619	0.1518	0.1553	0.2582	0.0095
42	0.0260	0.1997	0.0063	0.0004	0.0525	0.0493	0.0444	0.1107	0.1207	0.3804	0.0096
43	0.0150	0.2476	0.0036	0.0001	0.0276	0.0283	0.0284	0.0716	0.0831	0.4867	0.0079
44	0.0077	0.2841	0.0018	0.0000	0.0135	0.0149	0.0168	0.0424	0.0525	0.5608	0.0055
45	0.0037	0.3099	0.0009	0.0000	0.0063	0.0075	0.0094	0.0237	0.0313	0.6038	0.0035
46	0.0017	0.3290	0.0004	0.0000	0.0028	0.0036	0.0051	0.0128	0.0181	0.6243	0.0021
47	0.0008	0.3453	0.0002	0.0000	0.0013	0.0017	0.0027	0.0068	0.0102	0.6297	0.0013
48	0.0003	0.3618	0.0001	0.0000	0.0006	0.0008	0.0014	0.0036	0.0057	0.6249	0.0008
49	0.0002	0.3808	0.0000	0.0000	0.0002	0.0004	0.0007	0.0019	0.0032	0.6121	0.0005
50	0.0001	0.4044	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0004	0.0010	0.0017	0.5919	0.0003
51	0.0000	0.4340	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0005	0.0009	0.5640	0.0002
52	0.0000	0.4713	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0005	0.5276	0.0001
53	0.0000	0.5172	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0003	0.4823	0.0001
54	0.0000	0.5715	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001	0.4282	0.0001
55	0.0000	0.6330	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.3669	0.0000
56	0.0000	0.6982	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.3017	0.0000
57	0.0000	0.7628	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2371	0.0000
58	0.0000	0.8223	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1777	0.0000
59	0.0000	0.8732	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1268	0.0000
60	0.0000	0.9142	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0858	0.0000



Fracciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en la fase vapor en la torre catalítica

Figura 4.4

REACTOR PRINCIPAL:

El reactor 01-D-101 es de tipo tubular con una longitud de la sección empacada de 7 m y un diámetro de 1.96m. El balance de materia para este reactor, se hace sobre una sección diferencial del mismo, asumiendo flujo tapón (plug flow), quedando la siguiente ecuación.

$$\frac{\partial X_i}{\partial(z_R/L_R)} = r \frac{W}{F_i}$$

Y el balance de energía para un reactor tubular adiabático queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial(F C_p T)}{\partial(z_R/L_R)} = r W (-\Delta H_R)$$

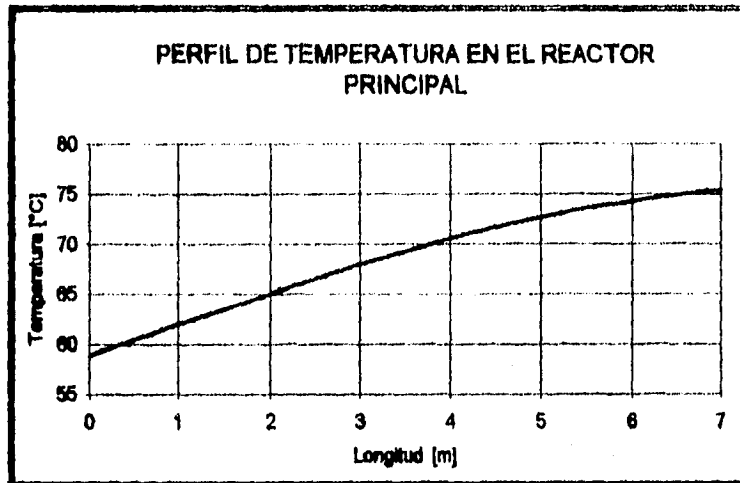
Al resolver simultáneamente ambas ecuaciones, se obtienen los perfiles de concentración y de temperatura a lo largo del reactor.

Tabla 4.6

Temperatura y tiempo de residencia a lo largo del reactor

Longitud [m]	Temperatura [°C]	Tiempo de residencia [h]
0.0	58.9	0.000
0.7	61.1	0.010
1.4	63.3	0.019
2.1	65.4	0.029
2.8	67.4	0.038
3.5	69.3	0.048
4.2	71.0	0.057
4.9	72.5	0.067
5.6	73.7	0.076
6.3	74.7	0.086
7.0	75.4	0.095

Las temperaturas de entrada y salida del reactor son, según el diseño, de 60 y 75 °C respectivamente. La figura 4.5 muestra la variación de la temperatura a lo largo del reactor adiabático.



Perfil de temperatura en el reactor principal

Figura 4.5

En la tabla 4.7 se indican los perfiles de fracciones molares de los compuestos en el reactor principal.

Tabla 4.7

Fracciones molares de los compuestos en el reactor principal

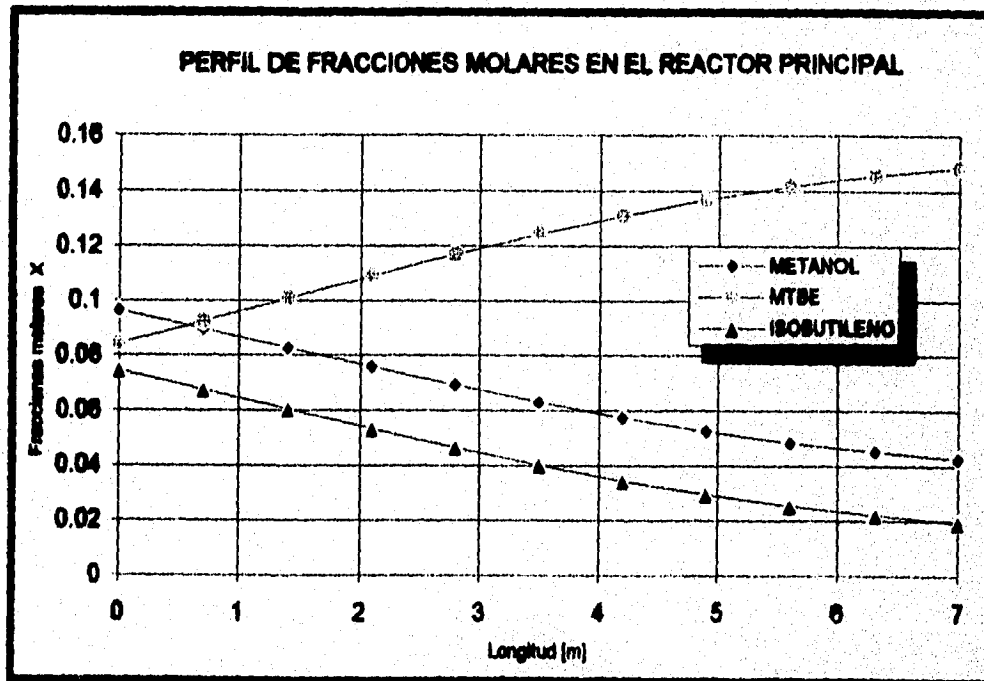
Longitud [m]	MET	MTBE	ISOB	C3	ISOBUTA	1-BUTE
0.0	0.0964	0.0843	0.0745	0.0287	0.2285	0.1319
0.7	0.0896	0.0925	0.0675	0.0290	0.2302	0.1329
1.4	0.0827	0.1008	0.0604	0.0292	0.2320	0.1339
2.1	0.0758	0.1090	0.0534	0.0294	0.2337	0.1349
2.8	0.0692	0.1170	0.0466	0.0296	0.2354	0.1358
3.5	0.0630	0.1244	0.0402	0.0298	0.2370	0.1368
4.2	0.0574	0.1311	0.0345	0.0300	0.2384	0.1376
4.9	0.0525	0.1370	0.0295	0.0301	0.2396	0.1383
5.6	0.0485	0.1419	0.0254	0.0303	0.2406	0.1389
6.3	0.0452	0.1458	0.0220	0.0304	0.2414	0.1393
7.0	0.0427	0.1488	0.0194	0.0305	0.2421	0.1397

Tabla 4.7, continuación

Fraciones molares de los compuestos en el reactor principal

Longitud [m]	N-BUTA	2TBUTE	2CBUTE	C5	AGUA
0.0	0.0689	0.1525	0.1229	0.0097	0.0017
0.7	0.0694	0.1537	0.1238	0.0098	0.0017
1.4	0.0700	0.1548	0.1247	0.0099	0.0017
2.1	0.0705	0.1560	0.1257	0.0099	0.0017
2.8	0.0710	0.1571	0.1266	0.0100	0.0017
3.5	0.0715	0.1582	0.1274	0.0101	0.0017
4.2	0.0719	0.1591	0.1282	0.0101	0.0017
4.9	0.0723	0.1599	0.1288	0.0102	0.0018
5.6	0.0726	0.1606	0.1294	0.0102	0.0018
6.3	0.0728	0.1612	0.1298	0.0103	0.0018
7.0	0.0730	0.1616	0.1302	0.0103	0.0018

Los perfiles de las fracciones molares del metanol, MTBE e isobutileno están graficados en la figura 4.6.



Fraciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en el reactor principal

Figura 4.6

INTERCAMBIADORES DE CALOR:

El proceso tiene ocho intercambiadores de calor (contando al condensador y al rehervidor de la columna catalítica), de los cuales cinco son enfriadores, dos calentadores y un intercambiador proceso a proceso. Para su simulación se dieron los datos de las temperaturas de diseño. En este caso el balance de energía indica que la carga térmica es igual a la diferencia de entalpías entre las corrientes de entrada y salida. La tabla 4.8 muestra la comparación entre las cargas térmicas obtenidas en la simulación, con las de diseño.

Tabla 4.8

Comparación diseño-simulación de cargas térmicas

CLAVE DEL EQUIPO	CARGA TÉRMICA DE DISEÑO [MM kcal/h]	CARGA TÉRMICA SIMULADA [MM kcal/h]
01-C-106	-0.948	-0.398
01-CA-101	-0.025	-0.057
01-CA-102	-5.472	-5.196
01-C-105	-0.358	-0.463
01-C-104	-0.385	-0.379
01-C-101	0.000	0.121
01-C-102	5.064	4.928
01-C-103	0.297	0.300

CAPÍTULO V

CAPÍTULO V

SENSIBILIDAD DE PARÁMETROS Y SIMULACIÓN CON MODELO DE NO-EQUILIBRIO.

METODOLOGÍA.

El simulador ASPEN PLUS (TM) tiene la opción de análisis de sensibilidad, en donde el usuario le indica al programa qué variables quiere modificar en su valor, qué valores debe tomar dicha variable y qué parámetros calculados deben reportarse en cada caso; esto ahorra mucho tiempo ya que de no tener esta característica, se tendría que hacer la simulación las veces necesarias para obtener las variaciones deseadas. Esta opción reporta los resultados en una lista en la cual se pueden hacer las gráficas correspondientes, facilitando así su interpretación.

Los parámetros que se modificaron son:

1. Flujo de alimentación de isobutileno a la entrada del proceso.
2. Relación de flujos molares de las corrientes 13 y 16.
3. Temperatura de la alimentación al reactor principal.
4. Reflujo molar en el domo de la columna catalítica.
5. Alimentación de metanol a la columna catalítica.

Y las respuestas que se consideraron de interés son tanto el cambio en los servicios de calentamiento y enfriamiento, conversión total, así como la pureza y cantidad del producto deseado (MTBE) en la corriente 23. Es importante recordar que no se tomaron en cuenta las reacciones secundarias que según los datos de diseño, a esas condiciones se logran en grado no significativo.

FLUJO DE ALIMENTACIÓN DE ISOBUTILENO.

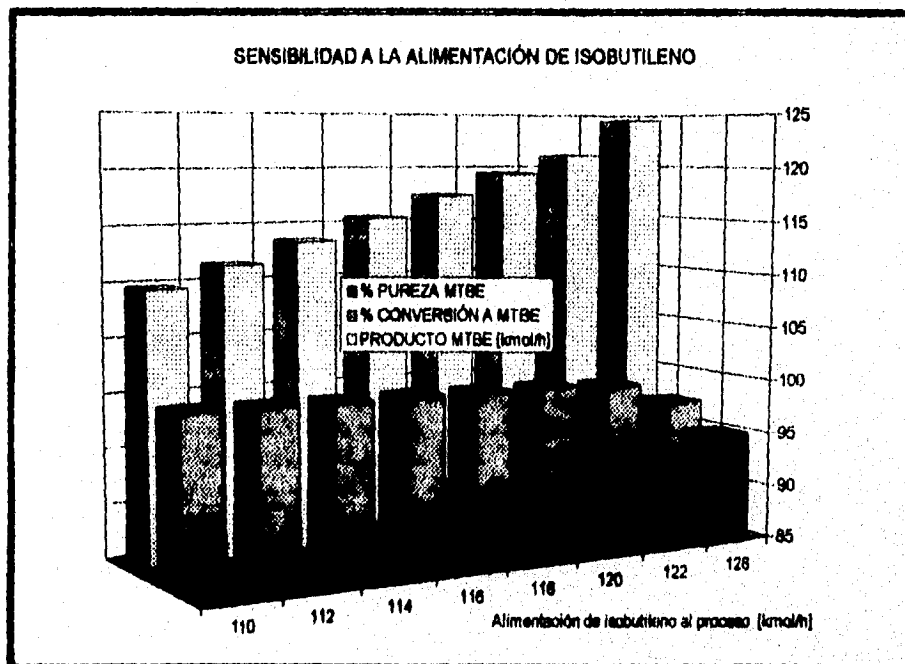
El proceso se diseñó para un flujo de alimentación de isobutileno de 125.1 kmol/h contenidos en la corriente 1 que en total tiene un valor de 712.1 kmol/h, los resultados se muestran en la tabla 5.1 y en la respectiva gráfica.

Tabla 5.1

Respuesta del proceso a la variación de la alimentación de isobutileno

Flujo de isobutileno [kmol/h]	Producto MTBE [kmol/h]	% Molar de MTBE	Servicios de calentamiento [MM kcal/h]	Servicios de enfriamiento [MM kcal/h]	% Conversión a MTBE
110.00	109.59	85.55	5.0660	-6.0318	99.63
112.00	111.53	87.03	5.0627	-6.0312	99.58
114.00	113.49	88.53	5.0510	-6.0310	99.55
116.00	115.47	90.06	5.0503	-6.0427	99.54
118.00	117.45	91.59	5.0517	-6.0552	99.53
120.00	119.43	93.12	5.0533	-6.0677	99.53
122.00	121.09	94.16	5.0487	-6.0817	99.26
128.00	124.50	94.93	5.0709	-6.1110	97.26

Como se puede ver de la tabla anterior, la variación de los servicios energéticos y de la conversión no son considerables, sin embargo la fracción molar de MTBE en el producto final si tiene una fuerte variación.



Respuesta del proceso a la variación de la alimentación de isobutileno

Figura 5.1

RELACION DE FLUJOS MOLARES DE LAS CORRIENTES 13 Y 16.

La relación de flujo molar de la corriente 16 con respecto a la 13 es de 0.4 por diseño, en este trabajo se hizo una serie de variaciones desde 0.2 hasta 1.0; este último valor corresponde a una recirculación nula al reactor principal, es decir, eliminar el ciclo que forman estos equipos. Los resultados están en la tabla 5.2

Tabla 5.2

Respuesta del proceso a la variación de la relación de recirculación al reactor principal

F16 / F13	Producto MTBE [kmol/h]	% Mol de MTBE	Servicios de calentamiento [MM kcal/h]	Servicios de enfriamiento [MM kcal/h]	% Conversión a MTBE
0.2	122.44	94.46	5.0273	-6.1101	97.90
0.3	122.86	94.51	5.0408	-6.0999	98.23
0.4	123.08	94.51	5.0497	-6.0920	98.41
0.5	123.24	94.51	5.0562	-6.0826	98.53
0.6	123.39	94.51	5.0623	-6.0741	98.66
0.7	123.41	94.49	5.0638	-6.0609	98.67
0.8	123.41	94.49	5.0649	-6.0494	98.67
0.9	123.41	94.49	5.0648	-6.0386	98.67
1.0	123.35	94.49	5.0617	-6.0403	98.62

Al proponer esta variación, las respuestas que se obtuvieron por simulación, no difieren significativamente de los datos reportados en las bases de diseño.

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACIÓN AL REACTOR PRINCIPAL

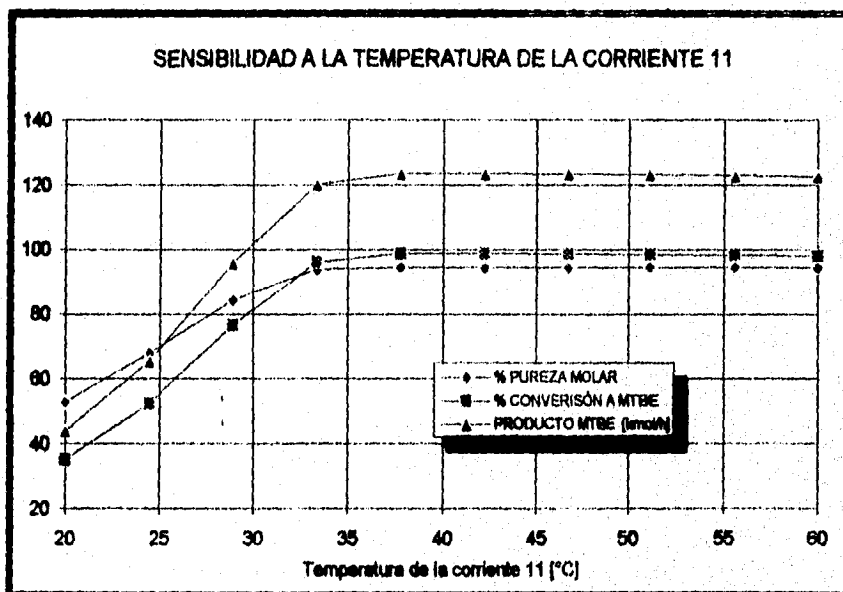
Un parámetro importante para la conversión total del isobutileno a MTBE es la temperatura de la corriente 11, la cual se mezcla con la recirculación (corriente 15) y se alimentan al reactor principal. El valor de bases de diseño de esta temperatura es de 37 °C; los resultados al realizar la simulación con la variación propuesta están en la tabla 5.3

Tabla 5.3

Respuesta del proceso a la variación de la temperatura de entrada al reactor principal

Temperatura de la corriente 11 [°C]	Producto MTBE [kmol/h]	% Mol de MTBE	Servicios de calentamiento [MM kcal/h]	Servicios de enfriamiento [MM kcal/h]	% Conversión a MTBE
20.0	43.85	52.95	3.9362	-7.5096	35.06
24.4	65.46	67.87	4.3876	-7.0875	52.34
28.9	95.86	84.39	4.8722	-6.5386	76.64
33.3	120.16	93.89	4.9204	-6.0910	96.07
37.8	123.49	94.49	5.0913	-6.0374	98.74
42.2	123.48	94.52	5.2166	-6.0357	98.73
46.7	123.36	94.49	5.3325	-6.0399	98.64
51.1	123.13	94.50	5.4490	-6.0444	98.45
55.6	122.89	94.50	5.5667	-6.0493	98.26
60.0	122.63	94.50	5.6859	-6.0543	98.05

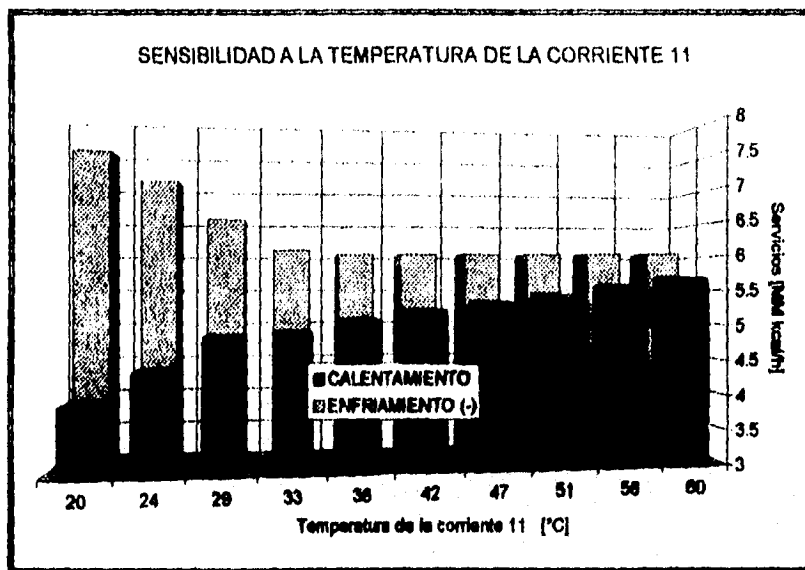
Las respuestas encontradas demuestran que la temperatura de esta corriente tiene una gran influencia sobre la conversión del proceso, y se observa que el diseño corresponde a un valor muy aproximado al máximo tanto para la producción como en la fracción molar del MTBE en la corriente 23, que es el producto final.



Respuesta del proceso a la variación de la temperatura de la corriente 11

Figura 5.2

Y en este caso los servicios de calentamiento y enfriamiento también muestran gran dependencia a la variable propuesta.



Resultados de los servicios energéticos al variar la temperatura de la corriente 11

Figura 5.3

REFLUJO MOLAR EN EL DOMO DE LA COLUMNA CATALÍTICA

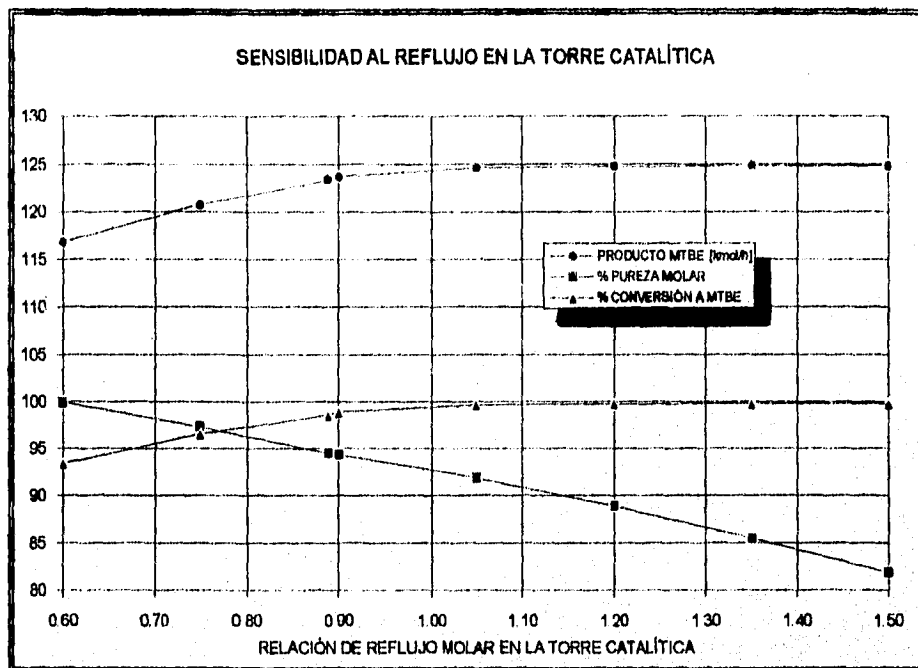
El valor de la relación de reflujo molar a la que se diseñó la columna es de aproximadamente 0.888 y se puede observar del diagrama de proceso (fig. 3.1) que la sección de la primer columna de extracción líquido-líquido y el reactor principal no sufren ningún cambio al variar dicho parámetro, sin embargo los servicios energéticos si cambian y de forma significativa ya que en el condensador y el rehervidor de la columna de destilación reactiva se tienen los mayores requerimientos energéticos del proceso, también varían la conversión total, la producción y la concentración molar del producto final.

Tabla 5.4

Respuesta del proceso a la variación de la relación molar de reflujo en la torre catalítica

Relación de reflujo molar	Producto MTBE [kmol/h]	% Mol de MTBE	Servicios de calentamiento [MM kcal/h]	Servicios de enfriamiento [MM kcal/h]	% Conversión a MTBE
0.6000	116.82	99.92	4.5065	-5.4227	93.40
0.7500	120.74	97.33	4.7963	-5.7494	96.54
0.8879	123.35	94.49	5.0617	-6.0404	98.62
0.9000	123.71	94.38	5.0824	-6.0647	98.91
1.0500	124.65	91.90	5.4259	-6.4190	99.66
1.2000	124.75	88.86	5.7875	-6.7813	99.75
1.3500	124.81	85.47	6.1354	-7.1292	99.79
1.5000	124.84	81.86	6.4670	-7.4608	99.81

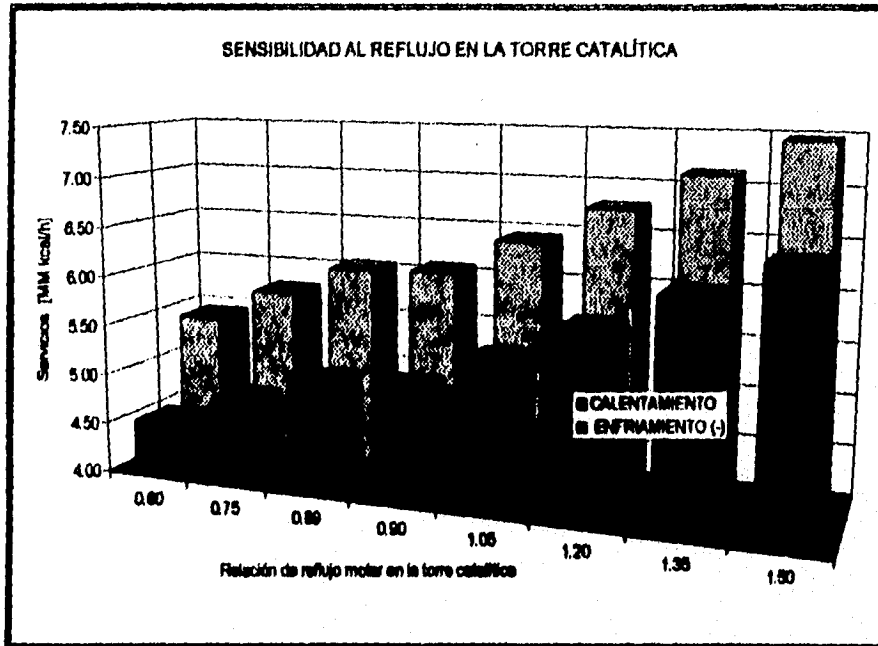
Como se observa en la tabla 5.4, esta variable tiene una notable importancia, ya que el simulador reporta que se pueden obtener aproximadamente 1.5 kmol/h de MTBE pero con la desventaja de que la concentración molar de MTBE en el producto final (corriente 23) cae desde un 95 % hasta un 82% y los servicios energéticos aumentan también alrededor de 1.4 MM kcal/h en ambos casos.



Respuesta del proceso a la variación de la relación de reflujo molar en la torre catalítica

Figura 5.4

En la figura anterior se observa mejor como decae la concentración molar del MTBE conforme se aumenta el reflujo a la columna de destilación, y en la figura 5.5 se muestra la dependencia de los servicios energéticos con dicha variable.



Resultados de los servicios energéticos al variar la relación de reflujo molar de la torre catalítica

Figura 5.5

ALIMENTACIÓN DE METANOL A LA COLUMNA CATALÍTICA

La alimentación de metanol en la columna catalítica es una variable importante para lograr la conversión a MTBE requerida, ya que se necesita un exceso de metanol para aumentar el valor de la rapidez de reacción, aún cuando la corriente de alimentación principal (corriente 18) contiene la cantidad estequiométrica para llevar a cabo la reacción al 100 %; en la ecuación cinética que se presentó en el capítulo 3, no se observa la influencia de la concentración de metanol para la rapidez de reacción, por que esa ecuación es válida solo cuando el metanol se encuentra en exceso, tal como se diseñó el proceso. Para ver la influencia de la alimentación de metanol en la columna, se utilizó una ecuación cinética que sí toma en cuenta la cantidad de metanol presente.

$$r = q k_p \left(\frac{a_{SUB}}{a_{MT}} - \frac{a_{MTBE}}{K_a a_{MT}^2} \right)$$

$$k_p = 3.67 \times 10^{12} e^{-11110/T} \text{ mol} / ((s)(equiv))$$

$$K_a = 248 e^{f(T)}$$

$$f(T) = c_1 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) + c_2 \log \left(\frac{T}{T_0} \right) + c_3 (T - T_0) + c_4 (T^2 - T_0^2) + c_5 (T^3 - T_0^3) + c_6 (T^4 - T_0^4)$$

$$T_0 = 298.15 \text{ K}$$

$$c_1 = -1493 \text{ K}$$

$$c_2 = -77.4$$

$$c_3 = 0.508 \text{ K}^{-1}$$

$$c_4 = -0.913 \times 10^{-3} \text{ K}^{-2}$$

$$c_5 = 1.11 \times 10^{-6} \text{ K}^{-3}$$

$$c_6 = -0.628 \times 10^{-9} \text{ K}^{-4}$$

Donde k , es la constante de rapidez de reacción, K , es la de equilibrio químico, a_i es la actividad del componente i , q es la cantidad de grupos ácidos en la resina por unidad de masa y r es la rapidez de reacción en mol/(s kg).

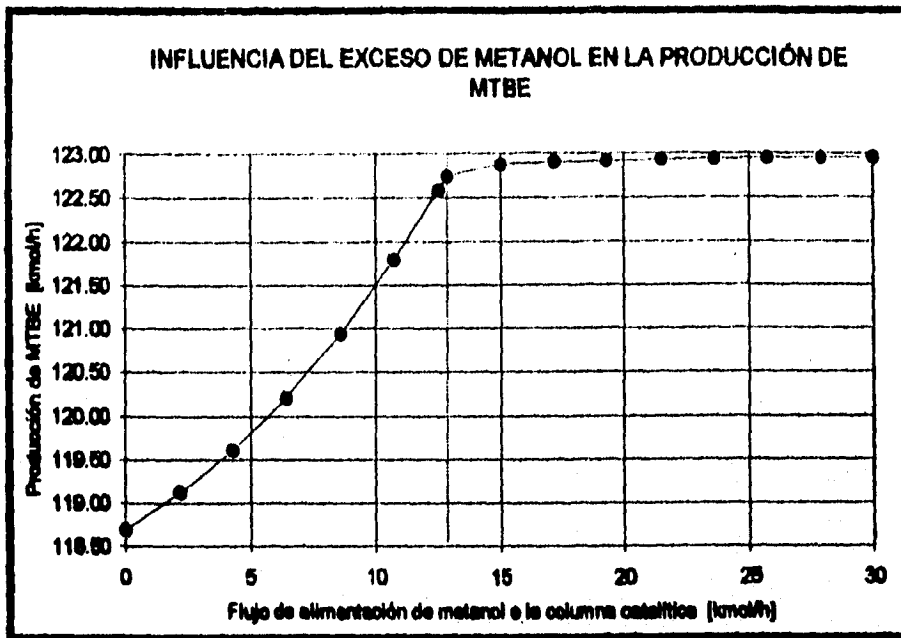
No se utilizó la ecuación cinética anterior en toda la simulación por que tiene que manejarse como subrutina hecha en Fortran y en forma externa al programa ASPEN, además se realizan más llamados de cálculos de propiedades, recordando que la ecuación de estado utilizada (Soave-Redlich-Kwong predictiva) es muy complicada; todo esto ocasiona dificultades en la convergencia, más tiempo al realizar los cálculos, y mas bloqueos de computadora, y como el proceso se diseño de forma tal que siempre haya un exceso de metanol, es válido usar la cinética reportada en el capítulo 3.

Tabla 5.5

Respuesta de la columna catalítica al variar la alimentación de metanol en exceso

Alimentación de metanol [kmol/h]	Producto MTBE [kmol/h]	Carga térmica del rehervidor [MM kcal/h]	Carga térmica del condensador [MM kcal/h]	% Conversión a MTBE
0.00	118.69	4.4768	-5.2885	94.95
2.14	119.12	4.4804	-5.2890	95.30
4.29	119.61	4.4836	-5.2893	95.69
6.43	120.21	4.4862	-5.2898	96.17
8.57	120.94	4.4882	-5.2908	96.75
10.71	121.80	4.4896	-5.2922	97.44
12.51	122.59	4.4906	-5.2936	98.07
12.86	122.74	4.4907	-5.2939	98.20
15.00	122.88	4.4924	-5.2958	98.30
17.14	122.90	4.4954	-5.2980	98.32
19.29	122.91	4.4986	-5.2998	98.33
21.43	122.93	4.5019	-5.3011	98.34
23.57	122.94	4.5051	-5.3019	98.35
25.71	122.95	4.5084	-5.3023	98.36
27.86	122.95	4.5117	-5.3022	98.36
30.00	122.95	4.5151	-5.3017	98.36

En la figura 5.6, la línea punteada pasa por el valor de la alimentación de metanol reportado en bases de diseño, por lo que se ve que corresponde a la menor cantidad de exceso que asegura una muy buena conversión, es importante decir que si el proceso se simula suponiendo equilibrio químico, con la ecuación cinética del capítulo 3, o con la ecuación cinética en función de las actividades, se obtienen los mismos resultados que los reportados en el diseño.



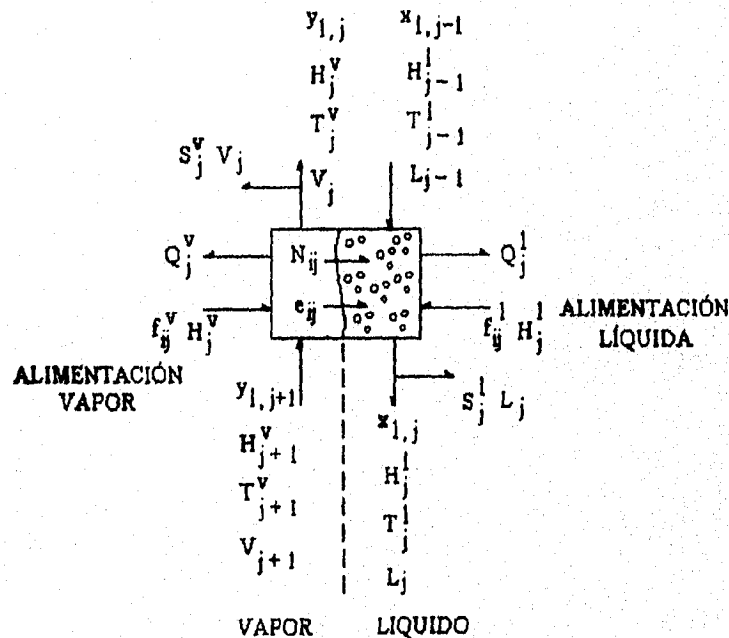
Resultados de la columna catalítica al variar la alimentación de metanol

Figura 5.6

SIMULACIÓN CON RATEFRAC

Entre las características importantes de ASPEN PLUS esta la de ofrecer la simulación de las columnas de destilación con un modelo de no-equilibrio, es decir, considerando que en los platos de la torre no se alcanza el equilibrio termodinámico, por lo que las diferencias de concentración entre los platos ideales sean mayor que en los platos reales, ya que el equilibrio termodinámico (comúnmente llamado equilibrio físico) corresponde al máximo de la separación posible. La simulación con modelo de no-equilibrio se realiza con RATEFRAC que es un módulo especial de ASPEN, para esto se utilizó la versión 8.5-6 del simulador.

En la práctica, las columnas raramente operan bajo condiciones de equilibrio termodinámico, por lo que se hace evidente la influencia de la rapidez de transferencia de masa y energía sobre el grado de separación de los compuestos presentes. El modelo que RATEFRAC utiliza describe simultáneamente los fenómenos de transferencia de masa y energía, en sistemas multicomponentes; únicamente se supone equilibrio en la interfase líquido-vapor, en el rehervidor y en el condensador. Para sistemas no reaccionantes, este modelo incluye los balances de materia y energía alrededor de las fases líquida y vapor, utilizando modelos y correlaciones de transferencia de masa y calor, correlaciones de equilibrio para la interfase, y modelos para el área interfacial; para sistemas con reacción química, además de las relaciones antes mencionadas, el modelo toma en cuenta la influencia de la reacción sobre los procesos de transferencia de masa y calor. El siguiente dibujo representa un plato de una columna en donde se identifican las variables que intervienen en los balances de materia y energía.



El modelo que RATEFRAC resuelve es el siguiente:

Balance de materia:

FASE VAPOR

$$(1 + S_j^v) V_{j,i} - V_{j,i+1} - f_{j,i}^v + N_{j,i} = 0, \quad i=1,2,\dots,C$$

FASE LÍQUIDA

$$(1 + S_j^l) L_{j,i} - L_{j,i+1} - f_{j,i}^l - N_{j,i} - r_{j,i} = 0; \quad i=1,2,\dots,C$$

Balance de energía:

FASE VAPOR

$$(1 + S_j^v) H_j^v \sum_{i=1}^C V_{j,i} - H_{j,i}^v \sum_{i=1}^C V_{j,i+1} + Q_j^v - H_j^{v*} \sum_{i=1}^C f_{j,i}^v + h_j^v a_j \frac{e_j^v}{\exp e_j^v - 1} (T_j^v - T_j^l) + \sum_{i=1}^C N_{j,i} H_{j,i}^v = 0$$

FASE LÍQUIDA

$$(1 + S_j^l) H_j^l \sum_{i=1}^C L_{j,i} - H_{j,i}^l \sum_{i=1}^C L_{j,i+1} + Q_j^l - H_j^{l*} \sum_{i=1}^C f_{j,i}^l + h_j^l a_j (T_j^l - T_j^v) + \sum_{i=1}^C N_{j,i} H_{j,i}^l - Q_j^R = 0$$

Ecuaciones de transferencia de masa:

FASE VAPOR

$$N_{j,i} - \sum_{k=1}^C k_{j,i}^v a_j (y_{j,i}^v - y_{j,i}^l) - y_{j,i}^v \sum_{k=1}^C N_{j,i} = 0, \quad i=1,2,\dots,C-1$$

FASE LÍQUIDA

$$N_{j,i} - \sum_{k=1}^C k_{j,i}^l a_j (x_{j,i}^l - x_{j,i}^v) - x_{j,i}^l \sum_{k=1}^C N_{j,i} = 0, \quad i=1,2,\dots,C-1$$

Ecuación de transferencia de energía:

$$h_j^v a_j \frac{e_j^v}{\exp e_j^v - 1} (T_j^v - T_j^l) + \sum_{i=1}^C N_{j,i} H_{j,i}^v - h_j^l a_j (T_j^l - T_j^v) - \sum_{i=1}^C N_{j,i} H_{j,i}^l = 0$$

Relación de equilibrio entre fases:

$$K_{j,i}^l x_{j,i}^l - y_{j,i}^v = 0 \quad i=1,2,\dots,C$$

NOMENCLATURA:

L: Flujo de líquido [moles/tiempo]
V: Flujo de vapor [moles/tiempo]
f: Flujo de alimentación [moles/tiempo]
x: Fracción molar en fase líquida
y: Fracción molar en fase vapor
H: Entalpia molar [energía/moles]
T: Temperatura
Q: Carga térmica [energía/tiempo]
K: Relación de equilibrio de fases
r: Rapidez de reacción [moles/(tiempo)(masa catalizador)]
a: Área efectiva interfacial [área]
k: Coeficiente de transferencia de masa [moles/(área)(tiempo)]
h: Coeficiente de transferencia de calor [energía/(área)(tiempo)(temperatura)]
N: Rapidez de transferencia de masa [moles/tiempo]
S: Razón entre la corriente de salida de la etapa y la corriente lateral
e: Factor de transferencia de calor

Subíndices:

i, k: Índice del número de componente
j: Índice del número de etapa

Superíndices

I: Referente a la interfase
L: Referente a la fase líquida
V: Referente a la fase vapor
F: Referente a la corriente de alimentación
R: Referente a la reacción

La simulación con RATEFRAC requiere los siguientes parámetros referentes a la configuración de la columna:

Tabla 5.6

Datos de diseño de la columna catalítica

Datos de columna	Sección 1	Sección 2
Número de platos	36	22
Diámetro interno [m]	2.1	2.6
Tipo de plato	Válvula	Válvula
Espacio entre platos [m]	0.6	0.6

La sección 1 corresponde a la parte de arriba de la columna, es decir, de la etapa 1 hasta la 37, que es donde se tiene un aumento en el diámetro; la etapa 60 corresponde nuevamente al rehervidor. La alimentación principal (la que viene de la sección del reactor tubular) está colocada en la etapa 38, y se tienen en total tres alimentaciones de metanol, en las etapas 15, 17 y 19. Cuando se utiliza el modelo de equilibrio, el simulador no reporta diferencias apreciables si se alimenta el metanol a una sola etapa o si se hace en tres distintas; al utilizar el modelo de no-equilibrio (RATEFRAC) se utilizaron las tres distintas etapas de alimentación, además se introdujeron los flujos de entrada reportados en bases de diseño de los productos de las reacciones que se dan en grado despreciable, todo esto para tratar de reproducir lo mejor posible el funcionamiento por diseño de la columna catalítica.

La tabla 5.7 muestra el perfil de fracciones molares de los compuestos principales, y se muestran gráficamente en las figuras 5.7 y 5.8

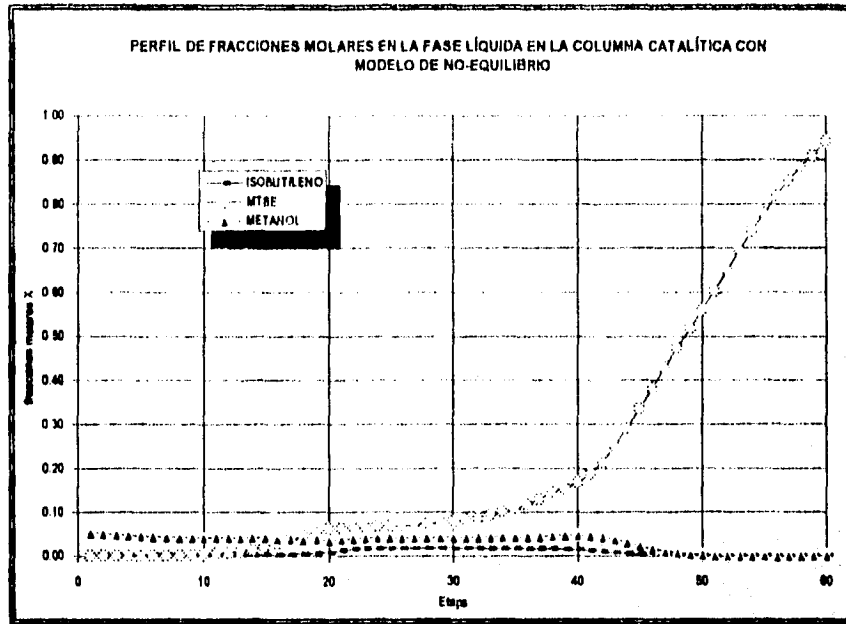
Tabla 5.7

Fracciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en la torre catalítica
con modelo de no-equilibrio

Etapa	Fase líquida			Fase vapor		
	ISOB	MTBE	MET	ISOB	MTBE	MET
1	0.0025	0.0000	0.0519	0.0026	0.0000	0.0491
2	0.0024	0.0001	0.0507	0.0025	0.0000	0.0519
3	0.0024	0.0002	0.0487	0.0025	0.0001	0.0513
4	0.0023	0.0003	0.0467	0.0025	0.0001	0.0503
5	0.0023	0.0005	0.0451	0.0024	0.0002	0.0494
6	0.0023	0.0008	0.0438	0.0024	0.0003	0.0486
7	0.0022	0.0012	0.0428	0.0024	0.0004	0.0480
8	0.0022	0.0017	0.0420	0.0024	0.0006	0.0476
9	0.0022	0.0024	0.0415	0.0024	0.0008	0.0472
10	0.0022	0.0035	0.0411	0.0024	0.0012	0.0469
11	0.0022	0.0050	0.0408	0.0024	0.0017	0.0467
12	0.0022	0.0070	0.0406	0.0024	0.0024	0.0466
13	0.0022	0.0099	0.0405	0.0024	0.0033	0.0465
14	0.0022	0.0139	0.0405	0.0024	0.0047	0.0465
15	0.0017	0.0206	0.0418	0.0024	0.0066	0.0465
16	0.0024	0.0273	0.0389	0.0033	0.0086	0.0445
17	0.0032	0.0350	0.0392	0.0045	0.0109	0.0438
18	0.0044	0.0435	0.0360	0.0060	0.0134	0.0417
19	0.0056	0.0531	0.0364	0.0080	0.0159	0.0415
20	0.0073	0.0629	0.0339	0.0109	0.0179	0.0405
21	0.0124	0.0635	0.0372	0.0155	0.0180	0.0430
22	0.0150	0.0643	0.0392	0.0179	0.0183	0.0446
23	0.0163	0.0653	0.0404	0.0191	0.0186	0.0455
24	0.0169	0.0663	0.0411	0.0197	0.0190	0.0460
25	0.0172	0.0676	0.0415	0.0199	0.0194	0.0464
26	0.0173	0.0691	0.0417	0.0201	0.0200	0.0466
27	0.0173	0.0709	0.0418	0.0201	0.0206	0.0467
28	0.0173	0.0731	0.0418	0.0201	0.0214	0.0467
29	0.0172	0.0756	0.0419	0.0201	0.0223	0.0467
30	0.0171	0.0787	0.0419	0.0201	0.0234	0.0467

Tabla 5.7, continuación
Fraciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en la torre catalítica
con modelo de no-equilibrio

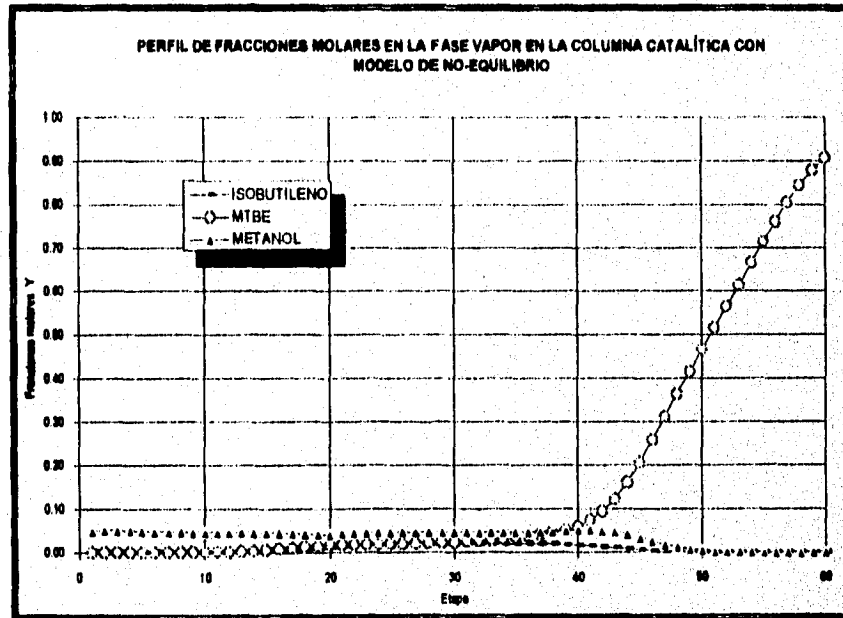
Etana	Fase líquida			Fase vapor		
	ISOB	MTBE	MET	ISOB	MTBE	MET
31	0.0171	0.0825	0.0419	0.0201	0.0247	0.0467
32	0.0170	0.0870	0.0420	0.0200	0.0263	0.0468
33	0.0168	0.0926	0.0422	0.0200	0.0283	0.0468
34	0.0167	0.0993	0.0424	0.0199	0.0307	0.0469
35	0.0165	0.1074	0.0428	0.0199	0.0336	0.0470
36	0.0163	0.1171	0.0432	0.0198	0.0370	0.0472
37	0.0161	0.1287	0.0438	0.0197	0.0411	0.0474
38	0.0165	0.1457	0.0448	0.0197	0.0460	0.0477
39	0.0151	0.1545	0.0462	0.0185	0.0518	0.0501
40	0.0134	0.1677	0.0465	0.0169	0.0605	0.0517
41	0.0114	0.1869	0.0455	0.0150	0.0737	0.0522
42	0.0093	0.2136	0.0424	0.0129	0.0934	0.0511
43	0.0072	0.2485	0.0370	0.0105	0.1217	0.0477
44	0.0052	0.2903	0.0299	0.0081	0.1597	0.0418
45	0.0035	0.3361	0.0222	0.0059	0.2062	0.0338
46	0.0023	0.3831	0.0153	0.0040	0.2582	0.0251
47	0.0014	0.4291	0.0100	0.0026	0.3120	0.0173
48	0.0008	0.4737	0.0062	0.0016	0.3649	0.0112
49	0.0005	0.5174	0.0038	0.0009	0.4159	0.0070
50	0.0003	0.5610	0.0023	0.0005	0.4656	0.0042
51	0.0001	0.6049	0.0013	0.0003	0.5149	0.0025
52	0.0001	0.6495	0.0008	0.0002	0.5645	0.0015
53	0.0000	0.6941	0.0005	0.0001	0.6145	0.0009
54	0.0000	0.7380	0.0003	0.0000	0.6646	0.0005
55	0.0000	0.7800	0.0002	0.0000	0.7138	0.0003
56	0.0000	0.8191	0.0001	0.0000	0.7609	0.0002
57	0.0000	0.8542	0.0001	0.0000	0.8046	0.0001
58	0.0000	0.8849	0.0000	0.0000	0.8440	0.0001
59	0.0000	0.9110	0.0000	0.0000	0.8784	0.0000
60	0.0000	0.9408	0.0000	0.0000	0.9075	0.0000



Fraciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en la fase líquida en la torre catalítica con el modelo de no-equilibrio

Figura 5.7

La gráfica correspondiente para la fase vapor es la 5.8



Fraciones molares del metanol, MTBE e isobutileno en la fase vapor en la torre catalítica con el modelo de no-equilibrio

Figura 5.8

La eficiencia de Murphree basada en el vapor se define de la siguiente forma:

$$E_{i,MP} = \frac{y_n - y_{n,l}}{y_n^* - y_{n,l}}$$

$y_n, y_{n,l}$ = composiciones del vapor que sale y entra al plato

y_n^* = composición de la fase vapor que se encontrará en equilibrio con el líquido real que sale del plato

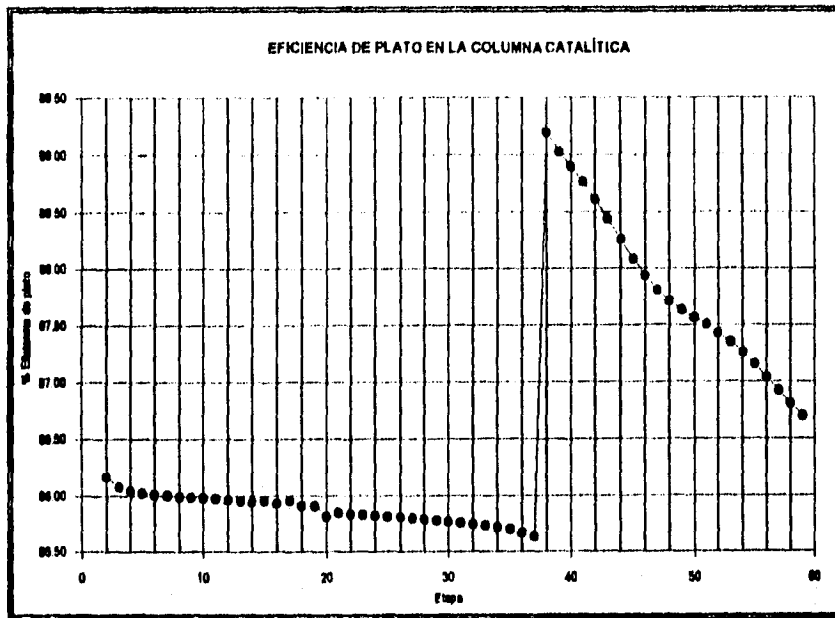
Y la eficiencia de plato se define en base a la diferencia que habría entre los flujos de salida (líquido y vapor) en equilibrio con los reales, es decir, se espera que los flujos de salida del plato si se alcanzara el equilibrio sean mayores que los calculados con el modelo de no equilibrio, ya que como no se alcanza la separación máxima en todos los componentes, los flujos totales también son distintos.

El simulador reporta las siguientes eficiencias de plato (Tabla 5.8 y figura 5.9):

Tabla 5.8

Eficiencias de plato en la torre catalítica

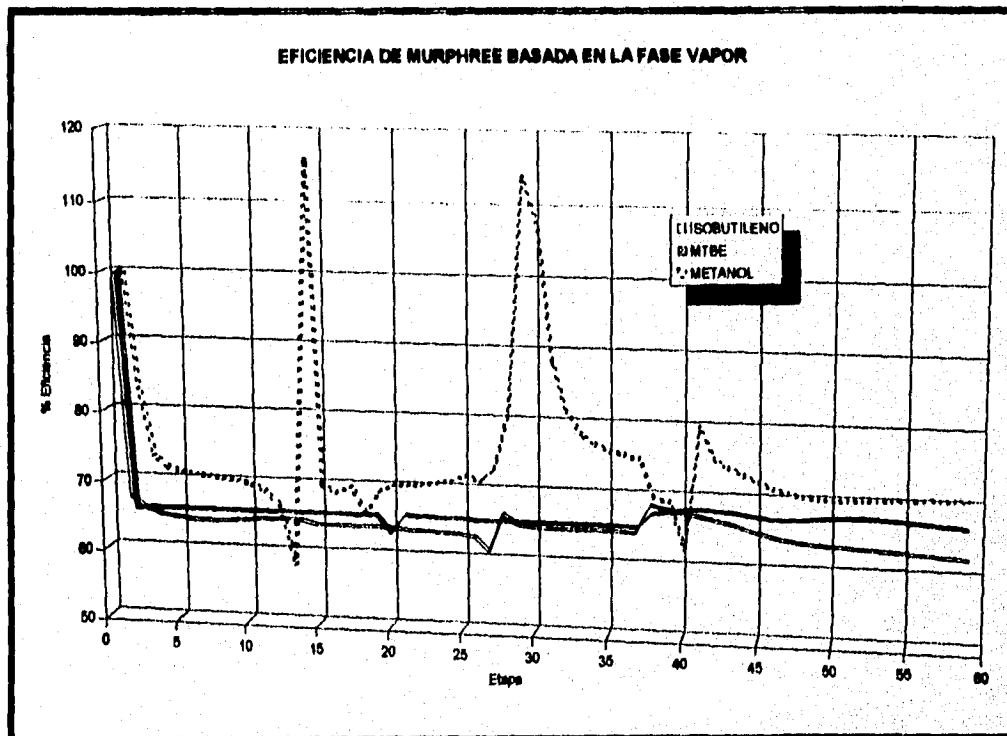
Etapa	% Eficiencia	Etapa	% Eficiencia	Etapa	% Eficiencia
1		21	85.84	41	88.76
2	86.17	22	85.83	42	88.61
3	86.07	23	85.82	43	88.44
4	86.04	24	85.82	44	88.26
5	86.02	25	85.81	45	88.08
6	86.01	26	85.80	46	87.93
7	86.00	27	85.79	47	87.81
8	85.99	28	85.78	48	87.71
9	85.98	29	85.77	49	87.63
10	85.98	30	85.76	50	87.56
11	85.97	31	85.75	51	87.50
12	85.96	32	85.74	52	87.43
13	85.95	33	85.73	53	87.35
14	85.94	34	85.71	54	87.26
15	85.96	35	85.69	55	87.15
16	85.93	36	85.66	56	87.04
17	85.95	37	85.63	57	86.92
18	85.91	38	89.20	58	86.81
19	85.90	39	89.02	59	86.70
20	85.81	40	88.90	60	



Eficiencias de plato en la columna catalítica

Figura 5.9

Las eficiencias de Murphree basadas en el vapor, se encuentran reportadas en la figura 5.10 y en la tabla 5.9 para el MTBE, isobutileno y metanol



Eficiencias de Murphree basadas en el vapor para el MTBE, isobutileno y metanol

Figura 5.10

Tabla 5.9

Eficiencias de Murphree para el metanol, MTBE e isobutileno basadas en la fase vapor

Etapa	ISOB	MTBE	MET	Etapa	ISOB	MTBE	MET
1	100.00	100.00	100.00	31	65.29	65.56	87.93
2	67.88	65.62	82.64	32	65.27	65.56	81.00
3	66.17	65.83	72.82	33	65.27	65.55	78.05
4	65.47	65.83	71.22	34	65.27	65.54	76.53
5	65.11	65.83	70.62	35	65.25	65.53	75.64
6	64.89	65.83	70.31	36	65.22	65.51	75.08
7	64.76	65.83	70.09	37	65.16	65.48	74.69
8	64.72	65.83	69.89	38	69.11	67.41	69.16
9	64.79	65.84	69.61	39	68.57	67.77	68.68
10	64.96	65.84	69.15	40	68.13	68.01	62.01
11	65.14	65.84	68.24	41	67.77	68.12	79.52
12	65.26	65.84	66.09	42	67.39	68.12	75.00
13	65.29	65.84	57.68	43	66.91	67.97	73.77
14	65.25	65.84	115.76	44	66.33	67.70	72.82
15	64.67	65.83	69.35	45	65.71	67.39	71.89
16	64.69	65.84	68.34	46	65.17	67.18	71.04
17	64.64	65.81	69.21	47	64.75	67.11	70.38
18	64.65	65.81	65.34	48	64.47	67.20	69.93
19	64.60	65.77	68.71	49	64.29	67.38	69.68
20	64.62	63.34	69.76	50	64.17	67.55	69.58
21	64.38	65.96	69.73	51	64.07	67.67	69.58
22	64.32	65.84	69.91	52	63.97	67.71	69.63
23	64.26	65.77	70.16	53	63.86	67.67	69.72
24	64.16	65.74	70.59	54	63.74	67.57	69.82
25	63.98	65.72	71.49	55	63.61	67.43	69.92
26	63.71	65.57	70.60	56	63.46	67.26	70.00
27	61.71	65.57	72.47	57	63.32	67.08	70.06
28	67.15	65.57	80.36	58	63.18	66.91	70.11
29	65.64	65.57	113.92	59	63.05	66.74	70.13
30	65.37	65.57	107.76	60			

Para la producción de MTBE en cada plato, se tiene que es en la última etapa (plato 19) en donde se realiza en mayor grado la reacción, aún cuando la alimentación de metanol se realiza no solo en esta etapa.

Tabla 5.10

Producción de MTBE por plato

Etapa	Cantidad de producción [kmol/h]
15	1.360
16	0.899
17	1.397
18	1.514
19	2.742
20	4.292

En la tabla 5.11 se dan los datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna que reporta el simulador.

Tabla 5.11

Datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna catalítica con modelo de no-equilibrio

Etapa	Temperatura del líquido [°C]	Temperatura del vapor [°C]	Presión [kgf/cm ²]	Flujo de líquido [kmol/h]	Flujo de vapor [kmol/h]
1	60.31	60.31	8.10	1157.3	0.0
2	64.75	65.15	8.60	554.5	1157.3
3	65.62	65.81	8.62	554.0	1167.5
4	66.06	66.18	8.63	553.7	1167.0
5	66.34	66.43	8.65	553.5	1166.7
6	66.55	66.63	8.67	553.3	1166.5
7	66.73	66.81	8.69	553.0	1166.3
8	66.90	66.98	8.70	552.6	1166.0
9	67.07	67.15	8.72	552.1	1165.6
10	67.25	67.35	8.74	551.4	1165.1
11	67.44	67.56	8.76	550.4	1164.4
12	67.67	67.81	8.77	549.1	1163.4
13	67.93	68.10	8.79	547.3	1162.1
14	68.23	68.45	8.81	545.1	1160.3
15	68.64	68.87	8.82	546.9	1158.1

Tabla 5.11, continuación

Datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna catalítica con modelo de no-equilibrio

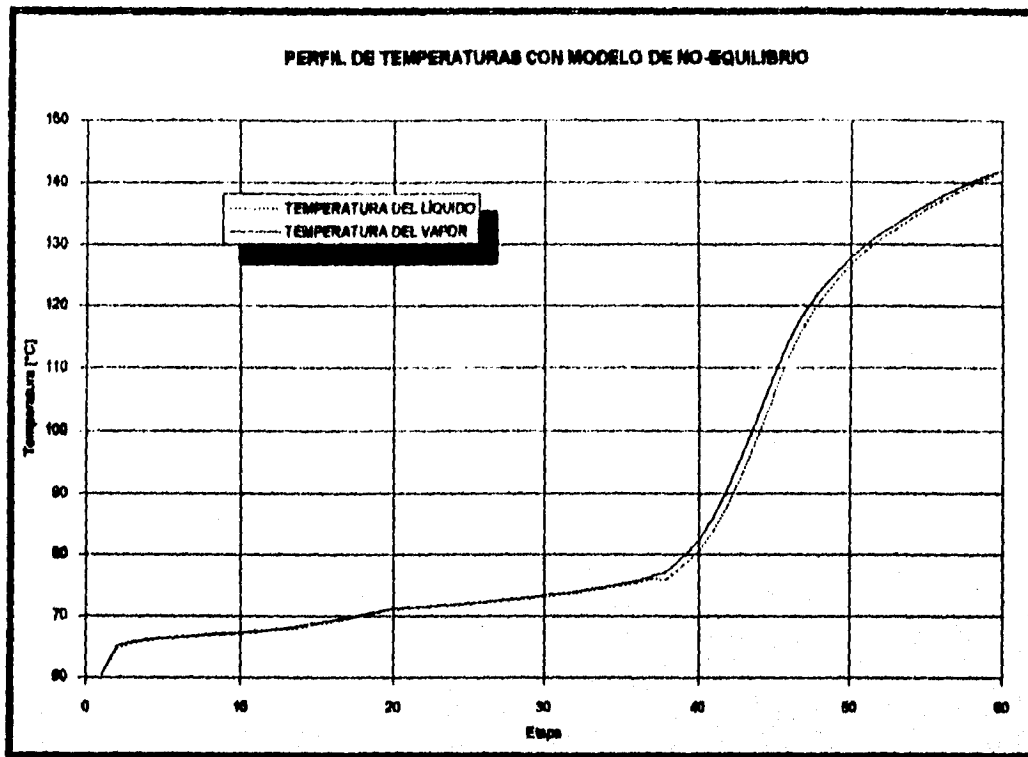
Etapa	Temperatura del líquido [°C]	Temperatura del vapor [°C]	Presión [kgf/cm ²]	Flujo de líquido [kmol/h]	Flujo de vapor [kmol/h]
16	69.09	69.33	8.84	541.9	1156.6
17	69.55	69.81	8.86	542.5	1152.5
18	70.08	70.32	8.88	535.4	1150.4
19	70.62	70.81	8.89	532.0	1144.8
20	71.20	71.23	8.91	517.4	1140.0
21	71.28	71.35	8.93	515.8	1129.6
22	71.43	71.51	8.94	514.6	1128.1
23	71.60	71.69	8.96	513.6	1126.9
24	71.78	71.88	8.98	512.6	1125.9
25	71.98	72.09	9.00	511.7	1124.9
26	72.20	72.31	9.01	510.7	1124.0
27	72.42	72.54	9.03	509.7	1123.0
28	72.66	72.78	9.05	508.6	1122.0
29	72.91	73.05	9.07	507.4	1120.9
30	73.18	73.33	9.08	506.0	1119.7
31	73.47	73.64	9.10	504.4	1118.3
32	73.79	73.97	9.12	502.6	1116.7
33	74.14	74.35	9.13	500.5	1114.9
34	74.53	74.76	9.15	498.0	1112.8
35	74.96	75.23	9.17	495.1	1110.3
36	75.45	75.77	9.19	491.6	1107.4
37	76.00	76.38	9.20	487.4	1103.9
38	75.91	77.12	9.22	1236.3	1099.7
39	78.09	79.49	9.24	1223.0	1105.6
40	80.61	82.40	9.26	1205.3	1092.3

Tabla 5.11, continuación

Datos de temperatura, presión y flujos de líquido y vapor en las etapas de la columna catalítica con modelo de no-equilibrio

Etapa	Temperatura del líquido [°C]	Temperatura del vapor [°C]	Presión [kgf/cm ²]	Flujo de líquido [kmol/h]	Flujo de vapor [kmol/h]
41	83.84	86.11	9.27	1184.9	1074.6
42	88.02	90.78	9.29	1164.7	1054.3
43	93.24	96.37	9.31	1148.8	1034.0
44	99.29	102.52	9.32	1141.7	1018.2
45	105.64	108.65	9.34	1144.8	1011.0
46	111.62	114.21	9.36	1156.2	1014.1
47	116.78	118.87	9.38	1171.5	1025.5
48	120.95	122.59	9.39	1186.6	1040.8
49	124.21	125.52	9.41	1199.1	1055.9
50	126.80	127.88	9.43	1208.5	1068.5
51	128.92	129.88	9.44	1214.9	1077.8
52	130.77	131.65	9.46	1219.4	1084.3
53	132.46	133.29	9.48	1222.7	1088.7
54	134.06	134.85	9.50	1225.5	1092.0
55	135.60	136.34	9.51	1228.4	1094.9
56	137.05	137.74	9.53	1231.6	1097.8
57	138.41	139.02	9.55	1235.1	1101.0
58	139.64	140.17	9.57	1239.0	1104.5
59	140.73	141.15	9.58	1243.4	1108.4
60	141.95	141.95	9.60	130.7	1112.8

Y finalmente se ilustra el perfil de temperaturas en la figura 5.11, en donde se observa que no hay gran diferencia entre las temperaturas del líquido y el vapor.



Perfiles de temperatura obtenidos con el modelo de no-equilibrio

Figura 5.11

CAPÍTULO VI

CAPÍTULO VI

ANÁLISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

En este capítulo se discutirán aspectos importantes sobre los resultados dados por la simulación, el análisis de sensibilidad y la simulación de la columna catalítica con el modelo de no-equilibrio; es en esta discusión donde se observan las ventajas que ofrece el tener un buen simulador del proceso, esto por que se pueden analizar las respuestas que se tendrían al decidirse cambiar las condiciones de operación en la planta, y así decidir qué cambios son los más convenientes y que parámetros de operación tienen mayor influencia en el proceso.

La ecuación de estado que mejor reprodujo los datos de diseño, fue la SOAVE-REDLICH-KWONG predictiva. Esta ecuación es muy compleja en el cálculo de propiedades, lo que afecta también a la convergencia. Aún con el método NONIDEAL, ASPEN tuvo muchos problemas para llegar al resultado; la columna es muy complicada, tanto por el número de compuestos presentes, como por su no-idealidad, número de platos, lo cual en varias ocasiones condujo a la computadora a un bloqueo del sistema.

En el capítulo 4 se mostraron los resultados al simular todo el proceso, en la tabla 6.1 se realiza la comparación entre corrientes calculadas con el simulador y las obtenidas en bases de diseño; y se observa que la simulación dio excelentes resultados. Una diferencia que puede ser importante es que en la corriente 16, que después se alimenta a la columna con reacción, la cantidad de isobutileno obtenida en la simulación es 0.6 kmol/h mayor que la de diseño, esto puede explicarse por el error que siempre existirá en una simulación y que se incrementa la diferencia porque no se tomaron en cuenta las reacciones secundarias en las que se ve involucrado dicho compuesto. Para el caso de los pentanos se observa que el error entre las corrientes 23 y 28 (ambas salen de la columna catalítica) puede ser aun mayor que un 50 %; sin embargo, es un compuesto que siempre está en cantidades poco significativas con respecto a los demás, por lo que este error no tiene importancia; si se deseara disminuir la diferencia encontrada el procedimiento correcto para mejorar la separación es el de introducir parámetros de interacción binarios para la ecuación termodinámica de estado que se utilizó; ASPEN solo tiene en su banco de datos los parámetros binarios del pentano con el propano, metanol y n-butano, por lo que sería necesario ver con que parámetro binario de los compuestos restantes se mejora el grado de separación calculado, pero esto puede dificultar la convergencia.

Tabla 6.1

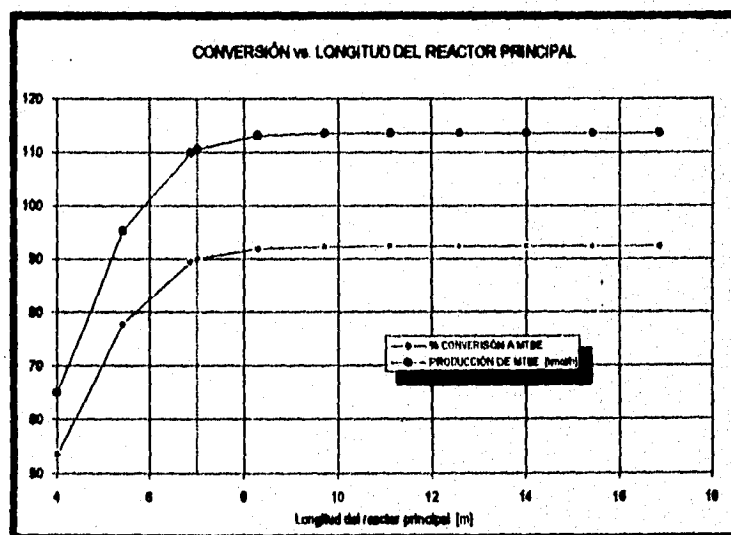
Comparación entre los datos de las corrientes de diseño, con los obtenidos por la simulación

COMPUESTO [kmol/h]	CORRIENTE											
	5 diseño	5 simulada	14 diseño	14 simulada	16 diseño	16 simulada	23 diseño	23 simulada	28 diseño	28 simulada	29 diseño	29 simulada
METANOL	0.0	0.0	46.6	47.5	31.1	31.7	0.0	0.0	31.1	31.8	0.1	0.0
MTBE	0.0	0.0	166.1	165.8	110.7	110.5	122.9	122.9	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOBUTILENO	125.1	125.0	20.6	21.7	13.8	14.4	0.0	0.0	1.2	2.1	1.2	2.1
PROPANOS	22.7	22.6	34.0	33.9	22.7	22.6	0.0	0.0	22.7	22.6	22.7	22.5
ISOBUTANO	179.9	179.8	269.2	269.8	179.9	179.8	0.0	0.0	179.9	179.8	179.9	179.5
1-BUTENO	103.9	103.8	155.7	155.7	103.8	103.8	0.0	0.0	103.8	103.8	103.8	103.6
N-BUTANO	54.3	54.2	81.4	81.4	54.3	54.2	0.0	0.0	54.3	54.3	54.3	54.1
2 T-BUTENO	120.1	120.0	180.1	180.1	120.1	120.0	0.0	0.0	120.0	120.0	120.0	119.7
2 C-BUTENO	96.8	96.7	145.1	145.1	96.8	96.7	0.0	0.0	96.7	96.7	96.7	96.5
PENTANOS	7.6	7.6	11.5	11.5	7.6	7.6	6.2	7.1	1.5	0.6	1.5	0.6
AGUA	1.7	1.1	2.7	2.0	1.8	1.3	0.0	0.0	1.7	1.3	1.37	0.8
TOTAL [kmol/h]	712.1	711.0	1114.9	1114.3	743.2	742.9	130.1	129.9	613.1	613.1	581.7	586.5
TOTAL [kg/h]	40210	40171	67157	67098	44771	44732	11363	11341	33808	33791	32808	32819
DENSIDAD [kg/m ³]	773.8	520.6	564.1	497.7	564.1	496.4	715.4	666.3	567.2	520.9	562.6	565.4
TEMPERATURA [°C]	38	38	75	76	75	75	38	38	38	38	38	38

Para el caso de los intercambiadores de calor, se ve en la tabla 4.8 que las cargas térmicas de diseño y las resultadas de la simulación son muy distintas, se encuentran errores incluso mayores al 50 %, esto posiblemente se debe a que las temperaturas de salida de los equipos no son exactamente iguales a las de diseño y que después entran a los intercambiadores, lo que ocasiona que las cargas térmicas difieran, esto puede apreciarse en el caso del reactor tubular, en donde las temperaturas de entrada y salida de dicho equipo reportados por el simulador difieren muy poco de los valores por diseño, pero como el flujo total que se maneja es grande, estas diferencias aun cuando son pequeñas, dan lugar a importantes errores en el cálculo de cargas térmicas, como prueba de que pequeñas diferencias de temperatura involucran cargas térmicas significativas se tiene que las corrientes 14 y 15 difieren según los datos de diseño en una cantidad menor a 0.5 °C y el intercambiador 01-CA-101 se diseñó con una carga térmica de -0.025 MM kcal/h, todo esto adicionado a los errores inherentes al uso de la ecuación termodinámica de estado provocan los errores antes mencionados.

Para el caso de la columna catalítica se ve en las corrientes de salida, las temperaturas del domo y del fondo (tabla 4.2) que la simulación es muy satisfactoria, el error más pronunciado es de 5 °C de diferencia de temperatura en el domo de la columna.

En el reactor principal (01-D-101) las diferencias de temperatura que reporta la simulación con respecto a las de diseño, no es apreciable. Se mencionó al principio de esta trabajo, que el motivo de usar la destilación reactiva para completar la reacción es porque la reacción se ve limitada por el equilibrio químico, pero en la figura 4.6 no se observa que las concentraciones alcancen un valor límite. es decir, cuando una reacción alcanza el equilibrio químico, las concentraciones llegan a un valor constante a cualquier longitud mayor, pero no se observa eso en esa gráfica; entonces surge la pregunta de porque no se alcanza el equilibrio e incluso el porqué se usa la columna de destilación con reacción. La siguiente figura puede aclarar este punto:



Caso hipotético si fuese posible aumentar la longitud del reactor

Figura 6.1

La línea punteada de la figura 6.1 indica que ese es el valor real de la longitud del reactor, y se aprecia que es a una conversión muy cercana a la máxima, es más, al aumentar de 7 a 8 m la longitud del reactor se aumenta la conversión alrededor de un 1.5 % y para que el reactor alcance por completo el máximo en conversión se necesitaría una longitud de 10 m aproximadamente, lo cual significaría a lo más un aumento de 2 % en la conversión; esto hace lógico el hecho de que el reactor mida 7 m y de que no alcance el equilibrio químico. Además se cuenta con la columna para llevar la reacción a valores considerablemente mas altos.

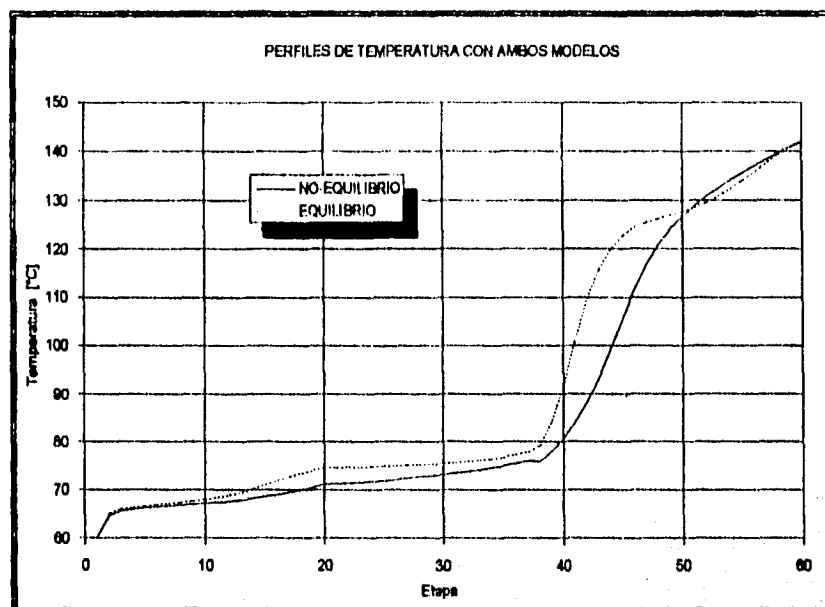
Se realiza a continuación una comparación entre los datos obtenidos de la columna al simularse con el modelo de equilibrio (RADFRAC) con el de no-equilibrio (RATEFRAC). Los resultados son los siguientes:

Tabla 6.2

Comparación entre los datos de las corrientes de salida de la torre catalítica

COMPUESTO [kmol/h]	Alimentación	Fondo diseño	Fondo Equilibrio	Fondo No-Equil.	Domo diseño	Domo Equilibrio	Domo No-Equil.
METANOL	31.1	0.0	0.0	0.0	31.1	31.8	31.8
MTBE	110.7	122.9	122.9	122.9	0.0	0.0	0.0
ISOBUTILENO	13.8	0.0	0.0	0.0	1.2	2.1	1.6
PROPANOS	22.7	0.0	0.0	0.0	22.7	22.6	22.7
ISOBUTANO	179.9	0.0	0.0	0.0	179.9	179.8	179.9
1-BUTENO	103.8	0.0	0.0	0.0	103.8	103.8	103.8
N-BUTANO	54.3	0.0	0.0	0.0	54.3	54.3	54.3
2 T-BUTENO	120.1	0.0	0.0	0.0	120.0	120.0	120.1
2 C-BUTENO	96.8	0.0	0.0	0.0	96.7	96.7	96.7
PENTANOS	7.6	6.2	7.1	7.3	1.5	0.6	0.3
AGUA	1.8	0.0	0.0	0.2	1.7	1.3	1.6
TOTAL [kmol/h]	743.2	130.1	129.9	130.1	613.1	613.1	613.0
TOTAL [kg/h]	44771	11363	11341	11385	33808	33791	33770

La tabla anterior muestra que ambos modelos concuerdan muy bien con el diseño, dando lugar al mismo grado de separación y de conversión, pero los perfiles de temperatura si difieren a lo largo de la columna tal como se muestra a continuación; como las temperaturas de liquido y el vapor con RATEFRAC no difieren mucho, en la figura 6.2 solo se comparan las de equilibrio con las temperaturas del liquido calculadas con el modelo de no-equilibrio.



Comparación de la temperatura de líquido obtenida con el modelo de no-equilibrio con respecto a la temperatura calculada con el modelo de equilibrio

Figura 6.2

También se compararon algunos parámetros de la columna catalítica, como temperaturas del domo y fondo y las cargas térmicas del rehervidor y condensador.

Tabla 6.3

Comparación de parámetros de la columna catalítica

Parámetros de la columna catalítica	Diseño	Equilibrio	No-Equilibrio
Temperatura del domo [°C]:	55.00	60.34	60.31
Temperatura del fondo [°C]:	142.00	142.09	141.95
Carga térmica del condensador [MM kcal/h]:	-5.472	-5.196	-5.199
Carga térmica del rehervidor [MM kcal/h]:	5.064	4.928	5.369

Entre ambos modelos, las diferencias en las cargas térmicas son notables, aún cuando el grado de separación es prácticamente el mismo, es más, los perfiles de temperatura están completamente acordes en la primer y última etapas; estas diferencias en el cálculo de las cargas se deben a que para simular la columna con el modelo de equilibrio se utilizó una versión de ASPEN distinta a la que se utilizó con RATEFRAC, y la ecuación de estado que se utilizó en este trabajo presentó grandes cambios de una versión a otra.

Al igual que en el caso de las temperaturas, los perfiles de fracciones molares también presentan grandes diferencias a lo largo de la torre, pero parten y salen de los mismos valores. Es notorio que teniendo eficiencias de plato de alrededor de un 85 a 89 % el grado de separación sea el mismo. Solo se muestra en la figura 6.3 los perfiles de fracciones molares en la fase líquida, para el metanol y el MTBE.

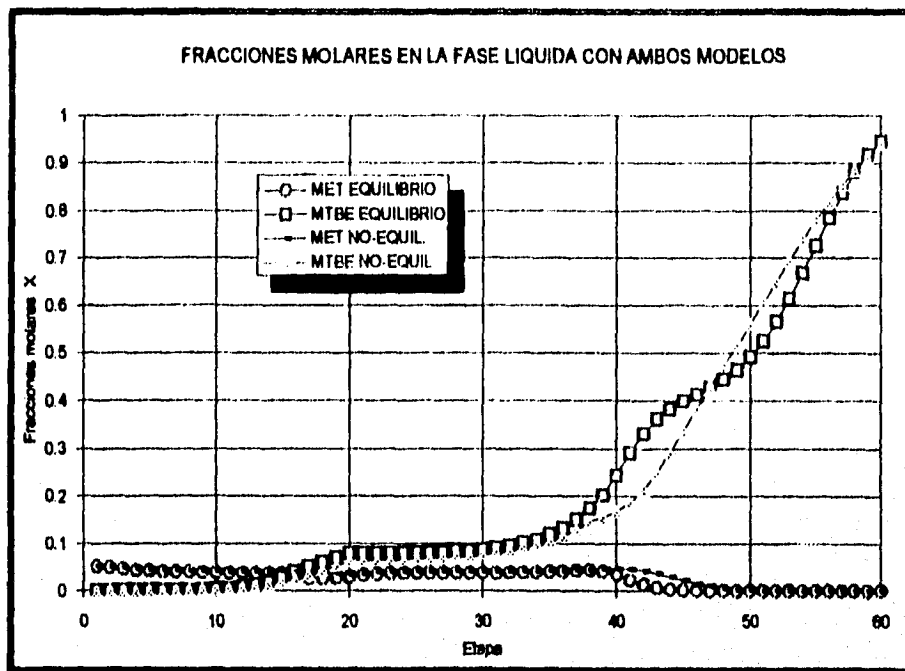


Figura 6.3

Al realizar el análisis de sensibilidad se llega a las siguientes conclusiones:

- La variación en la alimentación de isobutileno no afecta significativamente a la conversión, excepto a flujos muy altos (como 128 kmol/h) en donde la conversión alcanza un valor del 97 % cuando en flujos más bajos el valor es mayor a 99 %.
- La relación de flujos molares de las corrientes 13 y 16, que podría pensarse como una variable muy importante resultó que, aún cuando no se recircule nada, el simulador no reportó cambios fuertes.
- La temperatura de la alimentación al reactor principal mostró ser una variable de enorme importancia para el proceso, y el valor de diseño (37 °C) está prácticamente en el óptimo para la conversión y por lo tanto para la producción, como para los servicios de enfriamiento.
- El reflujo molar en el domo de la columna catalítica también es una variable importante y de nuevo el valor de diseño del proceso se encontró en un valor óptimo, porque aún cuando es posible aumentar la conversión para obtener 1.5 kmol/h más de MTBE, la concentración de éste se ve disminuida desde un 95 % hasta un 82 %, y un aumento considerable en los servicios energéticos.
- El flujo de alimentación de metanol en la columna catalítica es también una variable importante; este flujo solo tiene la función de dar el exceso suficiente en la zona de reacción de la columna catalítica para que se aumente el valor de la rapidez de reacción. De nuevo el proceso se diseñó en el valor óptimo según los resultados obtenidos.

El simulador fue capaz de reproducir las condiciones de diseño en una forma excelente, ya sea con el modelo de equilibrio con el de no-equilibrio. Para saber cuál modelo es mejor se necesitarían datos de planta confiables, lo cual no fue posible obtener.

Como se ha mostrado en este capítulo, el proceso se encuentra muy bien diseñado, ya que el simulador comprobó que los valores propuestos son óptimos en base a la conversión, concentración y producción de MTBE en la corriente de producto final. Se indicaron las variables más importantes y cómo afectan éstas al comportamiento del proceso, dejando claro la importancia de usar un simulador, y en especial el uso de ASPEN PLUS.

CAPÍTULO VII

**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

CAPÍTULO VII

BIBLIOGRAFÍA.

Refining 1994. Hydrocarbon Processing. November 1994 pags. 104-111

J.L. DeGarmo, V.N. Parulekar and V. Pinjala *Consider Reactive Distillation.*
Chemical Engineering Progress. March 1992 pags. 43-50

E. Pescarollo, R. Trotta and P.R. Sarathy *Etherify Light Gasolines.*
Hydrocarbon Processing. February 1993 pags. 53-60

L.A. Smith and M.N. Huddleston. *New MTBE design now commercial.*
Hydrocarbon Processing. March 1982 pags. 121-123

P.R. Sarathy and G.S. Suffridge *Etherify field butanes. Part 1.*
Hydrocarbon Processing. January 1993 pags. 89-92

P.R. Sarathy and G.S. Suffridge *Etherify field butanes. Part 2.*
Hydrocarbon Processing. February 1993 pags. 43-51

Tiejun Zhang and Ravindra Datta *Integral analysis of Methyl tert-butyl Ether synthesis kinetics.*
Ind. Eng. Chem. Res. 1995 vol 34, pags. 730-740

Ganesh Venimadhavan, George Buzad, Michael Doherty y Michael Malone *Effect of kinetics on residue curve maps for reactive distillation.*
AIChE Journal. November 1994 vol. 40, No. 11 pags. 1814-1824

S. Venkataraman, W. Chan and J. Boston *Reactive distillation using ASPEN PLUS.*
Chemical Engineering Progress. August 1990 pags. 45-54

F. P. J. M. Kerkhof and A. N. S. Mak *Multiple steady states durin reactive distillation of Methyl Tert-Butyl Ether.*

Ind. Eng. Chem. Res. 1993 vol 32 pags. 2767-2774

Ralph Jacobs and Rajamani Krishna *Multiple Solutions in reactive distillation for Methyl Tert-Butyl Ether synthesis.*

Ind. Eng. Chem. Res. 1993 vol 32 pags. 1706-1709

Zheng Yuxiang and Xu Xien *Study on catalytic distillation processes. Part I- Mass transfer characteristics in catalyst bed within the column.*

Trans IChemE, vol. 70, Part A, September 1992 pags. 459-464

Zheng Yuxiang and Xu Xien *Study on catalytic distillation processes. Part II- Simulation of catalytic distillation processes.*

Trans IChemE, vol. 70, Part A, September 1992 pags. 465-470

Alix Gicquel *Activation d'une resine sulfonique par un acide de lewis, application a la synthese du Methyl Tertio Butyl Ether (MTBE).* Thèse.

Universite Pierre et Marie Curie, Paris , juin 1981

ASPEN Manuales de referencia del simulador.