



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



EXAMENES PROFESIONALES FACULTAD DE QUIMICA

"MODELADO DE UN REACTOR DE HIDRODESULFURACION PARA LA PLANTA U-400 DE LA REFINERIA MIGUEL HIDALGO"

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :
MIGUEL ANGEL JUAREZ ESPINO



MEXICO, D. F.

1999.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

23/16-A



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central

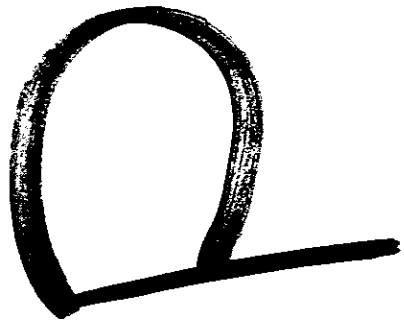
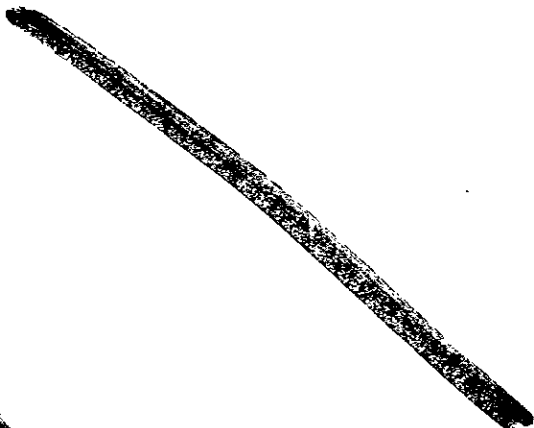
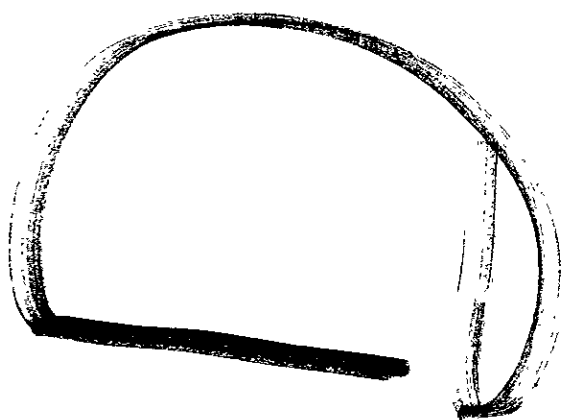


UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

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.



JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE Prof. M. en C. Celestino Montiel M.

VOCAL Prof.: Rafael Herrera Najera

SECRETARIO Prof.: Maria Rafaela Gutierrez Lara


1er. Sup. Prof. Juan Carlos Jiménez Bedolla

2do. Sup. Prof.: Martín Rivera Toledo

Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos;

Facultad de Química. UNAM.


M. en C. Celestino Montiel Maldonado
Asesor


Miguel A. Juárez Espino
Sustentante

*“... Yo no soy un hombre que sabe,
he sido un hombre que busca, y aun lo soy;
pero ya no busco en las estrellas ni en los libros,
comienzo a escuchar las enseñanzas que mi sangre murmura en mí...”*

HERMANN HESSE

*“Allí donde se encuentra el árbol del conocimiento
se encuentra también el paraíso.
Así hablan los más viejos y los jóvenes más ambiciosos”*

FEDERICO NIETZSCHE

A mi Dios:

Agradezco a Dios por brindarme un camino pleno y proporcionarme todo lo necesario para poder llegar asta este punto de mi vida. "GRACIAS DIOS MIO".

A mis padres, Miguel y Modesta:

He llegado aquí porque ustedes me impulsaron, me ayudaron y nunca me dejaron caer, lo mínimo que les puedo dar es todo mis agradecimientos. "Dios los Bendiga"

A mis Hermanos, Ma. Esther, Marcos y Omar:

Siempre me enseñaron como ser un buen hermano y buen hijo, con su honestidad, nobleza y coraje. Esto es por ustedes.

A mi asesor:

Quien me permitió darme cuenta que uno nunca da su mejor esfuerzo.

A mí mismo:

Por que siempre tuve la valentía, inteligencia y el empuje para lograr mis objetivos, en mi carrera.

A Esmeralda Lara H.:

Por el gran amor y cariño que siento por ella, nunca te olvidare.

CAPITULOS	Pags.
I INTRODUCCIÓN	2
II GENERALIDADES	
2.1 SIMULADOR HYSIM	4
2.2 REFINERIA "MIGUEL HIDALGO"	6
III HIDROPROCESO	9
3.1 PROCESO	11
3.2 CATALISIS	13
IV HIDRODESULFURACION	14
4.1 ESQUEMA DE REACCION DE HDS	16
4.2 MECANISMO Y CINETICA DE REACCION DE HDS	18
V HIDRODENITROGENACION	24
5.1 ESQUEMA DE REACCION DE QUINOLINA	26
5.2 CINETICA Y MECANISMO DE REACCION DE HDN	28
VI HIDRODEOXIGENACION	31
6.1 MECANISMO Y CINETICA DE REACCION DE HDO	32
VII PLANTA DE HIDRODESULFURACION DE NAFTAS	34
VIII DESCRIPCION DE LA PLANTA	
8.1 SECCION DE REACCION	36
8.2 SECCION DE ESTABILIZACION Y FRACCIONAMIENTO	40

IX	MODELAJE DEL REACTOR DE HIDRODESULFURACIÓN	42
9.1	SELECCIÓN DE LOS MODELOS DE ECUACIONES DE VELOCIDAD DE REACCIÓN PARA LA HDS	44
X	SIMULACION DE LA PLANTA	
10.1	SELECCIÓN DE LAS UNIDADES PARA LLEVAR A CABO LA SIMULACIÓN	49
10.2	CORRIENTE DE CORTE	50
XI	RESULTADOS	51
11.1	VALIDACIÓN DE RESULTADOS	53
XII	ANÁLISIS DE RESULTADOS	54
XIII	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	56
XIV	BIBLIOGRAFÍA	59
	APÉNDICE A	

FALTA PAGINA

No.

1

I. INTRODUCCIÓN.

Actualmente en México existe un gran esfuerzo por mejorar La industria a nivel mundial sea vuelto mas exigente, creándose normas e instituciones que marcan el rumbo de las mismas, y en las industria Mexicana existe plena conciencia de esto

La Industria Petrolera es muy importante para México y para el resto del mundo Por lo que se le han asignado mayores recursos, se utilizan las tecnologías de punta, así como los nuevos avances todo con la finalidad de obtener productos de mayor calidad y compatibles con el ambiente

En el presente trabajo se presenta un estudio completo de como reducir el contenido de azufre en fracciones ligeras de petróleo, principal precursor de SO_2 , fuerte contaminante del ambiente

Se trabaja con la Planta Hidrodesulfuradora de Naftas Ligeras de la Refineria "Miguel Hidalgo" ubicada en Tula Hidalgo

El objetivo de este trabajo es poder obtener resultados de un reactor de Hidrodesulfuración, aplicando ecuaciones de velocidad de reaccion cataliticas reales, que modelen perfectamente el comportamiento de reaccion de compuestos organo-sulfurados tales como, Tiofeno, Mercaptano, Metil Etil Sulfuro, y Dietilsulfuro, así como las reacciones de compuestos como Quinoleina y Cresol, organo-nitrogenados y organo-oxigenados, respectivamente

Utilizando una herramienta que se ha vuelto indispensable en Ingeniería Química, los Simuladores de Procesos, estos Simuladores, son programas de computación, los cuales pueden englobar todas las variables de diseño y ecuaciones que describen un sistema, de manera rápida y confiable

La primera parte de este trabajo muestra los aspectos generales de HIDROPROCESO, importancia, las reacciones que intervienen y aspectos generales. En la segunda parte se habla más específicamente de la Hidrodesulfuración, Hidrodenitrogenación e Hidrodeoxigenación, importancia de su estudio, tipo de catalizadores industriales, esquemas de reacción, ecuaciones de velocidad, y aspectos generales.

La parte importante de este trabajo y en la cual se basa todo este estudio, se muestra en el modelaje del reactor catalítico, las reacciones que se involucrarán, los reactivos, así como los productos, las ecuaciones de velocidad de reacción, la manera de introducir los datos de constantes de velocidad, adsorción, etcétera, la forma de recuperar resultados, para finalmente tener valores de composición

Una vez modelado el reactor, corazón de la planta, se simula la planta completa integrando uno y cada uno de los elementos que la integran. Obteniendo resultados como son: flujo, composición, presión, temperatura, etcétera a partir del simulador, para validarse con los datos de planta, y finalmente concluir acerca de los resultados obtenidos

II. GENERALIDADES

2.1 SIMULADOR HYSIM

El simulador Hysim diseñado por la compañía HYPROTECH, es empleado principalmente en procesos petroquímicos, procesamiento de gases, refinación de petróleo, en cualquier tipo de proceso químico y combustible sintético

HYSIM cumple con todos los aspectos requeridos en los programas computacionales. Sus correlaciones para obtener propiedades fisicoquímicas, tiene la capacidad de trabajar con cualquier tipo de componente, incluyendo pseudo-componentes generados en los cortes de petróleo, al mismo tiempo ofrece una amplia selección de Métodos de Propiedades, incluyendo Ecuaciones de Estado, Correlaciones Semi-empíricas, y Modelos de Actividad

HYSIM es un programa completamente interactivo, genera el mayor tipo de información automáticamente, con una forma fácil de leer y no se tiene que dar estimados iniciales para los equipos manejados. Al mismo tiempo, HYSIM actualiza cualquier modificación en las corrientes o en los equipos de manera automática. Estas modificaciones así como la introducción de nuevos elementos puede realizarse en el flowsheet o directamente en la pantalla principal. A diferencia de otros simuladores, Hysim despliega de manera más sencilla y clara los resultados obtenidos.

Se puede trabajar con equipos como, separadores, intercambiadores de calor, compresores, bombas, valvulas, tees, diferentes modelos de reactores, rigurosas columnas, así como módulos de post programación

El aprendizaje de Hysim es muy sencillo, la interface cuenta con un lenguaje apropiado para la adecuación rápida hombre-máquina

Considerando estas ventajas ofrecidas por HYSIM, es el simulador de procesos empleado en este trabajo

2.3 REFINERÍA “MIGUEL HIDALGO”

México es un país el cual se caracteriza por su riqueza de recursos naturales, y el principal de todos estos recursos es el Petróleo, cuya importancia radica en el número de energéticos que se pueden obtener a partir de este, así como un sin fin de productos secundarios. La obtención de estos productos no es cosa sencilla, es decir, se requiere de muchos procesos de separación, purificación, reacción, etcétera, en la obtención de productos de alta calidad.

En la República Mexicana existen complejos importantes, cuya finalidad es la de procesar los miles de barriles de petróleo crudo que se extraen en las costas mexicanas, para su posterior uso, o ser sometidos a otros procesos y obtener nuevos productos. Entre estos complejos se encuentran, Pajaritos, La Cangrejera, La refinería “Miguel Hidalgo”, Francisco I. Madero, etc.

La construcción de la Refinería “Miguel Hidalgo” se inició en 1972, para inaugurarse en el trigésimo aniversario de la Expropiación Petrolera, el 18 de marzo de 1976. Esta refinería se encuentra localizada en el municipio de Tula de Allende, en el Estado de Hidalgo.

En primer instancia se pensó que esta refinería crearía un polo de desarrollo industrial en una zona de bajos ingresos y tradicionalmente agrícola y como una oportunidad para la descentralización de la planta productiva del Valle de México, asimismo se pensó en la proximidad con el principal consumidor de energéticos del país y una localización ajena a la

problemática de contaminación ambiental y dotación de servicios del área metropolitana de la ciudad de México.

La refinería de Tula constituye un salto en la tecnología de Petróleos Mexicanos al instalar las primeras plantas de alta capacidad de proceso y equipo que posteriormente habrían de adaptarse en las refinerías de Cadereyta, Nuevo León y en Salina Cruz, Oaxaca

La refinería “ Miguel Hidalgo” tiene una capacidad nominal de proceso de 315 mil barriles por día de petróleo crudo y su función es la de obtener productos comerciales de gran demanda como son gas licuado, gasolina, turbosinas, diáfano, diesel, combustoleo, azufre, y productos especiales como son gas solvente, gas nafta, hexano, heptano, y aceite decantado, también se usan subproductos para uso interno como son hidrogeno, gas combustible, propileno, butano-butileno, isobutano e isopentano

En esta refinería se procesan una mezcla de crudo cretácico y crudo maya. El gas natural utilizado como combustible proviene de los campos petroleros localizados al sur y al sudeste del país, incluyendo la zona de Campeche

En la elaboración de los productos, la refinería cuenta actualmente con 12 plantas de proceso como son

- Planta de Destilación Combinada.
- Planta Reductora de Viscosidad.
- Planta de desintegración Catalítica
- Planta de Hidrodesulfuración de Gasolina (U-400)
- Planta Reformadora de Gasolinas (U-500)
- Planta Tratadora y Fraccionadora de Hidrocarburos (U-600).
- Planta Hidrodesulfuradora de Destilados Intermedios (U-700 y U-800).
- Planta de Destilación Atmosférica No 2
- Planta de Destilación al Alto Vacío
- Planta Estabilizadoras de Gasolinas No. 1 y 2.

Conociendo con que tipo de plantas cuenta la refinería y considerando que se tienen 3 plantas de Hidrodesulfuración, se trabajará con la planta U-400, por cuyas razones se darán en capítulos posteriores.

III. HIDROPROCESO.

Un aspecto importante dentro del tratamiento de crudo es el Hidroproceso, el cual permite una reducción de los compuestos que pueden resultar contaminantes al ambiente y que puedan reducir la eficiencia de los procesos

Esta fase en el tratamiento de crudo ha sido estudiada por diferentes investigadores a nivel mundial. Dentro de las aplicaciones del hidroproceso diversos componentes reaccionan catalíticamente con el Hidrógeno. La más importante aplicación de este proceso es la HIDRODESULFURACION, en el cual se ven involucradas reacciones que disminuyen la concentración de componentes Organo-sulfurados transformándolos hacia H_2S e Hidrocarburos.

La principal justificación para este proceso es dar un pretratamiento antes de llevar a la Reformación, disminuyendo la posibilidad de un envenenamiento por azufre del catalizador de Platino, utilizado en dicha reformación, así como para un tratamiento de las gasolinas formadas en el craking, teniendo un endulzamiento y estabilización de los productos. Además se obtienen productos como Diesel, aceites, aceites combustibles, a partir de la Desulfuraciones de fracciones pesadas.

Actualmente las normas internacionales presionan fuertemente para eliminar el azufre de los combustibles derivados del petróleo, a partir de que se percataron que los componentes organo-sulfurados ocasionaban contaminación por SO_2 en la atmósfera

En el Hidroproceso se llevan a cabo otras reacciones al paralelo con las reacciones de HDS como, Hidrodesnitrogenación (HDN), e Hidrodesoxigenación (HDO). Estas deben ser las reacciones consideradas para alimentaciones comerciales de crudo por cuestiones ambientales y económicas, de tal forma que se tiene que tener bien en claro cuales son los modelos de reacción que permitan la reducción de los compuestos de azufre, nitrógeno y oxígeno, en los reactores catalíticos empleados. En este estudio se plantearán los modelos para dichos compuestos; los productos y conversiones obtenidas, considerando los compuestos más representativos de cada grupo.

En este trabajo no se considerarán las inhibiciones de una reacción con otra, solo se aplicarán los efectos de productos como reactivos. Pocos investigadores han realizado el estudio con tres o más componentes de estas familias de componentes; Schuit y Gates, 1973, Katzer y Sivasubramain, 1979, Furimsky, 1983; Vriant, 1983, Ho, 1988.

3.1 PROCESO

Dentro del proceso de fracciones ligeras de petróleo, la alimentación se introduce completamente vaporizada en contacto con hidrógeno, fluyendo a través de partículas de catalizador en el reactor de lecho fijo. Se han realizado diferentes diseños de reactores para diversas alimentaciones, sin embargo todas están encaminadas hacia, el mismo principio de operación.

En el caso de que el petróleo que reacciona dentro del proceso, se encuentre en fase líquida, entonces dentro del reactor se encuentran tres fases: gas, líquida y sólida, a lo que se le ha denominado como reactor "trickled-bed".

Estos reactores denominados Trickled-Bed son requeridos en la industria para la hidrosulfuración de alimentaciones pesadas de petróleo. Operando en condiciones más severas, con estas mezclas menos reactivas. Además que las reacciones de coquización y desmetalización, que se presentan, son muy importantes para este tipo de residuos de petróleo, estas se forman rápidamente depósitos de coque y compuestos orgánicos, lo que impide la regeneración del catalizador. Este problema del catalizador en las fracciones pesadas de petróleo requiere de estudios diferentes.

Industrialmente, para la hidrodesulfuración se utilizan reactores del tipo de cama fluidiza. Este reactor es diferente del reactor gas-sólido por que contienen líquido. En estos reactores las partículas de catalizador se encuentran en suspensión, debido al contraflujo de líquido reaccionante y flujo de Hidrogeno a contracorriente. El diseño de reactor tiene ciertas ventajas:

- 1 El catalizador desactivado puede ser removido constantemente.
- 2 Se pueden utilizar partículas de catalizador pequeñas, teniendo gran ventaja con respecto a las de gran tamaño, cuando la resistencia a la transferencia de masa a nivel partícula es significativo, disminuyendo la caída de presión a lo largo del reactor, y.
- 3 En el reactor de cama fluida tiene muy buen mezclado .

Mientras que las desventajas del diseño de este reactor son:

- 1 El alto grado de mezclado de los reactivos en dirección del flujo requiere altas temperaturas o bajos valores de espacio velocidad, en comparación con el reactor de lecho fijo, para obtener la misma conversión
- 2 Con estas altas temperaturas, se llevan acabo reacciones laterales indeseadas, tales como el hidrocracking, lo que implica un alto consumo de hidrogeno, y
- 3 La complejidad de tener tres fases no se ha resuelto del todo. Con un sistema de reacciones exotérmicas, involucrando hidrogeno a altas temperaturas y presiones

3.2 CATÁLISIS

La gran mayoría de los resultados son obtenidos con catalizador comercial sulfurado CoO-MoO₃/γ-Al₂O₃ (Co-Mo/ Al₂O₃), para las reacciones de Hidrodesulfuración comúnmente se utiliza NiO-MoO₃/γ-Al₂O₃ (Co-Mo/ Al₂O₃) sulfurado, el cual es similar en forma, sin embargo tiene alta reactividad para hidrogenación y el típicamente aplicado para las reacciones de HDN, es el catalizador, NiO-WO₃/γ-Al₂O₃ (Ni-W/ Al₂O₃)

En contraste con el platino y las aleaciones de platino utilizados como catalizador en la reformación, la catálisis de hidrodesulfuración tiene mayor actividad en la hidrogenación estando presentes altas concentraciones de componentes azufrados, esta actividad, es característicamente menor en el platino por bastante orden de magnitud

IV. HIDRODESULFURACIÓN.

El azufre se tiene que remover de fracciones de petróleo principalmente por razones técnicas y ambientales. Las especificaciones sobre fracciones de petróleo son muy estrictas. Por ejemplo, en los Estados Unidos en Octubre de 1993, y a la fecha, se decretó que el contenido de azufre en fracciones de petróleo no debía sobrepasar el 0.05% en peso o sea menos de 500 ppm. En algunas ciudades de Europa del este el máximo contenido de azufre no debía sobrepasar de 0.2% y 0.3%, sin embargo las disposiciones de la Comunidad Europea especificaron que el contenido no debía ser superior al 0.05%.

La Hidrodesulfuración (HDS) y Hidrodenitrógenación (HDN) son importantes procesos de hidrotratamiento los cuales envuelven reacciones en la disminución de sulfuros y compuestos nitrogenados, respectivamente, de ciertas fracciones de petróleo. Estas reacciones dan por resultados la obtención de ácido sulfhídrico (H_2S) y amoníaco (NH_3). Además es necesaria la remoción de estos elementos de las fracciones de petróleo, para reducir eventualmente las emisiones de Nitrogeno y Azufre como SO_x , NO_x en la combustión de dichas fracciones, y proveer una estabilidad en los productos finales.

Las formas de azufre presente en el petróleo pueden ser: Mercaptanos $R-SH$, Sulfuros $R-S-R'$, Disulfuros $R-S-S-R'$, Polisulfuros $R-S_n-R'$, Tiofeno, Benzotiofeno, Dibenzotiofeno, y otros derivados alquilados. Asimismo contiene varios compuestos nitrogenados como y alquilpiridinas, quinoles y alquilquinoles, benzoquinoles, acridinas, indoles y también están presentes carbazoles.

La hidrodinámica en los procesos de Hidrodesulfuración (HDS) no es aun bien comprendida. El calculo exacto de las propiedades termodinámica, como entalpías, etc , también es otro problema. La cinetica es el elemento más importante en el modelaje y simulación de los reactores empleados. La literatura sobre la conversión de los componentes claves es abundante, pero esa información es pocas veces clara y coordinada de un investigador con otro. El desarrollo del proceso de HDS es más rígidos debido a las nuevas especificaciones, requiriendo definitivamente cinéticas más precisas.

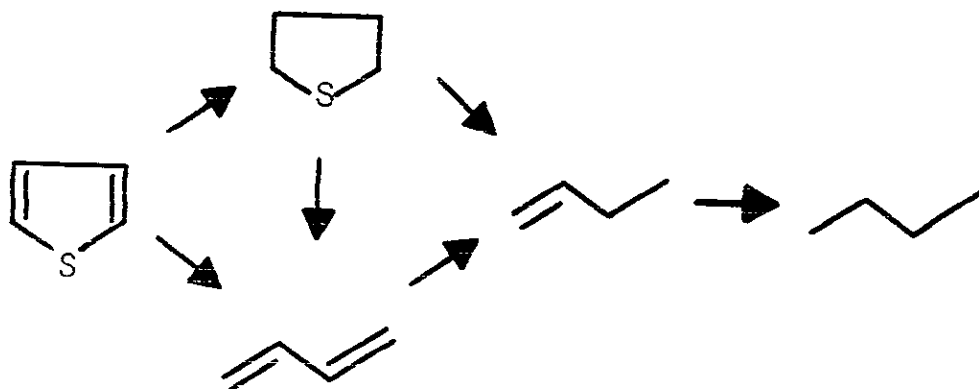
La HDS de compuestos organo-sulfurados es exotérmica y esencialmente irreversible bajo condiciones industriales, es decir aproximadamente 340-425 °C y 55-170 atmósferas de presión.

Se ha discutido mucho acerca de como ocurre la remocion del azufre con o sin la hidrogenación del anillo heterocíclico. Los rutas de este tipo de reacciones involucra que una hidrogenación anterior del anillo aromático puede afectarse por cuestiones termodinámica, porque la hidrogenación de los compuestos que contienen anillos aromaticos se encuentran en el limite del equilibrio a las temperaturas de la HDS. Por ejemplo, la constante de equilibrio para la hidrogenacion de Tiofeno obteniendo tetrahidrotiofeno es menor que la unidad a temperaturas abajo de los 350 °C. De esta manera, la ruta para la remoción de compuestos sulfurados via hidrogenación de compuestos organo-sulfurados puede encontrarse inhibida a a bajas presiones y altas temperaturas, principalmente por las bajas concentraciones de equilibrio de estas especies intermedias.

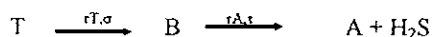
4.1 ESQUEMA DE REACCIÓN DE HDS.

Los compuestos tiofénicos son los compuesto organo-sulfurados de menor reactividad en el petróleo, dentro de estos compuestos el más facil de obtener y más representativo es el tiofeno por lo que es el más utilizado para el estudio de HDS

La HDS de tiofeno se realiza por dos caminos paralelos, es decir por hidrogenólisis y por hidrogenacion, para finalmente obtener como producto final el butano. si bien el esquema de reaccion no se encuentra del todo claro, con los resultados de diferentes investigadores existen menos dudas sobre dicho esquemas



Estudios realizados por Van Parijs y Froment (1986) sobre la hidrogenólisis de tiofeno en catalizadores $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ en un reactor comercial de hidrodesulfuración no se encontraron concentraciones de 1,3-butadieno y tetrahidrotiofeno en los efluentes de salida de dicho reactor, por lo que adoptaron un esquema el cual, primeramente se da la hidrogenólisis de tiofeno (T) hacia ácido sulfhídrico (H_2S), Buteno, luego la generación de este hacia Butano (A)

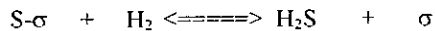
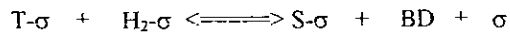
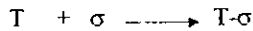


La hidrogenólisis de tiofeno hacia buteno y la hidrogenación de buteno hacia butano se considera que toman lugar en dos sitios activos diferentes, σ y τ del catalizador. La existencia de dos diferentes tipos de sitios en catalizadores de Co-Mo bajo condiciones de HDS, fue evidenciada por Owens y Amber (1962), Zdrzil (1975), y Delmon (1979)

4.2 MECANISMO Y CINÉTICA DE REACCIÓN DE HDS.

En la construcción del posible mecanismo de reacción, Hougen-Watson, realizan una distinción para la hidrogenólisis, σ , y para la hidrogenación, τ . En donde la adsorción de los reactivos o la reacción de superficie, o la desorción de los productos podría determinar la velocidad de reacción. Después de varias discusiones se encontró que los mejores mecanismos de reacción son los que se presentan abajo.

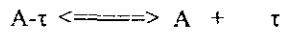
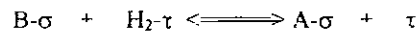
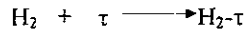
a Para la hidrogenólisis de Tiofeno sobre los sitios σ



$$r_{T, \sigma} = \frac{k_T * K_T * K_{H_2} * p_T * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H + K_T * p_T + K_S * p_S / p_H)^2}$$

donde K_T , K_{H_2} y K_S son las constantes de adsorción de Tiofeno, Hidrogeno y Azufre sobre los sitios σ del catalizador respectivamente; k_T es la constante cinética de Tiofeno; y p_T , p_H , y p_S son las presiones parciales de Tiofeno, Hidrogeno y Azufre, respectivamente.

b Para la formación de butano a partir de la hidrogenación de Buteno en sitio τ



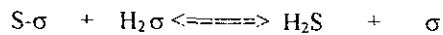
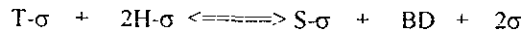
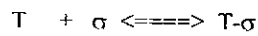
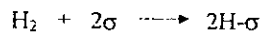
$$r_{A, \tau} = \frac{k_B * K_B * K_{H_2} * p_B * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H + K_A * p_A + K_B * p_B)^2}$$

donde K_B , K_{H_2} y K_A son las constantes de adsorción de Buteno, Hidrogeno y Butano sobre los sitios τ , del catalizador respectivamente, k_B es la constante cinética de Buteno, y p_B , p_H , y p_A son las presiones parciales de Buteno, Hidrogeno y Butano, respectivamente

En este primer modelo desarrollado a partir del mecanismo de Hougen-Watson, la reacción de superficie y la adsorción de hidrogeno molecular son los pasos determinantes, en la hidrogenolisis e hidrogenación

En los experimentos desarrollados por Van Parijs y Froment se desarrollo otro modelo en el cual se adsorbe en su forma atómica. El correspondiente mecanismo de reacción y ecuación de rapidez es mostrado en la parte de abajo.

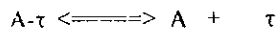
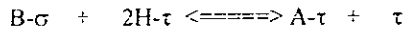
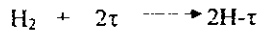
a Para la hidrogenólisis de Tiofeno sobre los sitios σ



$$r_{T, \sigma} = \frac{k_r * K_T * K_{H_2}^2 * p_T * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H^{0.5} + K_T * p_T + K_S * p_S / p_H)^3}$$

donde K_T , K_{H_2} y K_S son las constantes de adsorción de Tiofeno, Hidrogeno y Azufre sobre los sitios σ del catalizador respectivamente; k_T es la constante cinética de Tiofeno; y p_T , p_H , y p_S son las presiones parciales de Tiofeno, Hidrogeno y Azufre, respectivamente.

b Para la formación de butano a partir de la hidrogenación de Buteno en sitio τ .



$$r_{A, \tau} = \frac{k_B * K_B * K_{H_2}^2 * p_B * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H + K_S * p_S + K_B * p_B)^3}$$

donde K_B , K_{H_2} y K_S son las constantes de adsorción de Buteno, Hidrogeno y Butano sobre los sitios τ , del catalizador respectivamente; k_B es la constante cinética de Buteno, y p_B , p_H , y p_S son las presiones parciales de Buteno, Hidrogeno y Butano, respectivamente.

En los estudios comparativos realizados se encontró que ambos modelos ajustaban perfectamente

Satterfield y Roberts, quienes utilizaron un catalizador de cobalto y molibdeno, determinaron la cinética de reacción de tiofeno, en ausencia de transferencia de masa. Los productos observados fueron consistentes con el esquema de reacción presentado por Amberg y otros. Para la velocidad de desaparición de tiofeno (hidrogenólisis) y los velocidad de formación de buteno (hidrogenación de butano) fueron representadas por las siguientes ecuaciones de Langmuir-Hinshelwood:

$$r_{\text{HDS}} = \frac{k_T * p_T * p_H}{(1 + K_T * p_T + K_S * p_S)^2}$$

$$r_{\text{HD}} = \frac{k * p_B * p_H}{(1 + K_B * p_B + K'_S * p_S)}$$

Frye y Mosby hallaron que el proceso de hidrodesulfuración era inhibido por H₂S y por los hidrocarburos aromatico, incluyendo los que participan en la HDS, Frye y Mosby también confirmaron el orden de reacción con respecto al hidrogeno. Sus resultados fueron se reflejan en la siguiente ecuación de rapidez:

$$r_{HDS} = \frac{k * p_s * p_H}{(1 + K_{AR} * p_{AR} + K_s * p_s)^2}$$

En análisis más exactos, el termino indicando la adsorción de los hidrocarburos aromáticos ($K_{AR} * p_{AR}$) podría ser reemplazado por la suma de términos para especificar compuestos aromaticos, incluyendo aquellos que contienen azufre.

Phillipson realizo un estudio cinético de hidrodesulfuración de muchos compuestos encontrados en destilados ligeros. El catalizador utilizado fue, 2% Co y 8% Mo. Se encontró que la conversion era independiente de la velocidad lineal a través del lecho catalítico, demostrando una influencia significativa de la transferencia de masa, por parte de la fase fluida. Obteniendo la siguiente ecuación empírica, en la cual se observa inhibición debido a los hidrocarburos, ademas queda involucrado el termino de la presión total.

$$r_{HDS} = \frac{k * p_s^{1/2} * p_H^{1/2} * p_{TOT}^{1/2}}{p^{1/2} (1 + 0.21 * p_{H_2S} / p_{TOT})^2}$$

V. ESTUDIO DE HIDRODENITROGENACION (HDN).

Otra reacción de hidrogenólisis son las reacciones de hidronitrogenación, es decir



Las reacciones de este tipo son efectivas en la remoción de nitrógeno, la cual es frecuentemente necesaria antes de la refinación por hidrocrackin, ya que los componentes básicos que contiene nitrógeno son contaminantes para los sitios ácidos de la catálisis bifuncional del hidrocrackin

El nitrógeno en la alimentación de estas naftas es predominantemente aromático heterocíclico, también se encuentran compuestos organonitrogenados no-heterocíclico tales como aminas alifáticas, y nitrilos también se encuentran presentes sin embargo en concentraciones considerablemente pequeñas, y la hidrogenación es mucho más rápida que para los compuestos heterocíclicos

La remoción del nitrógeno en componentes heterocíclicos requiere primeramente la hidrogenación del anillo que contiene al nitrógeno antes de la hidrogenólisis del enlace C-N. La hidrogenación del anillo aromático reduce la relativamente grande energía del enlace C-N, permitiendo su fácil incisión. Las energías de enlace dobles y sencillas C-N son del orden de

magnitud de 147 y 73 kcal/mol respectivamente, según encontraron Streitweiser y Heathcock en 1976

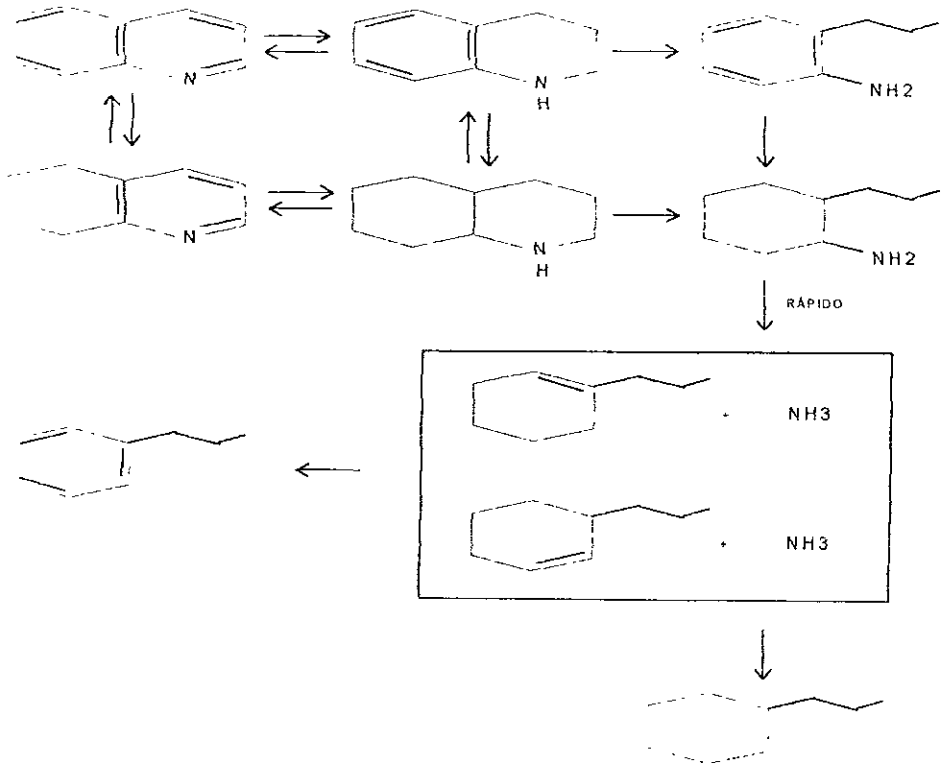
La necesidad de hidrogenación del anillo aromático antes de la remoción de nitrógeno también implica que la posición del equilibrio de las reacciones de hidrogenación pueden afectar las velocidades de desnitrificación, si las velocidades de hidrogenólisis son relativamente más bajas que las velocidades de hidrogenación. Un desfavorable equilibrio de hidrogenación podría resultar en bajas concentraciones de compuestos con nitrógenos hidrogenados experimentando hidrogenólisis, la velocidad de HDN, en pequeñas superficies cubiertas por compuestos organonitrogenados podrían ser de esta manera bajas. Altas presiones parciales de hidrógeno pueden utilizarse para incrementar las concentraciones de componentes heterocíclicos saturados de esta forma incrementar las velocidades de HDN.

Debido a que los compuestos heterocíclicos nitrogenados deben ser hidrogenados antes de la remoción de nitrógeno, se encuentran numerosos productos intermedios nitrogenados. De cualquier manera, la HDN se distingue por la obtención de productos tales como hidrocarburos y amoníaco, principalmente.

5.1 ESQUEMA DE REACCIÓN DE QUINOLEINA.

El complejo esquema de reacción de la quinolina es el más representativo de los componentes nitrogenados de alto peso molecular.

El esquema propuesto por muchos investigadores puede representarse en la figura de abajo y resumirse como sigue. La HDN de la Quinoleina requiere primeramente de la hidrogenación de por lo menos de uno de sus anillos aromáticos. La hidrogenación de la Quinoleina produce 1,2,3,4-Tetrahydroquinolina que es mucho más rápida que para la obtención de 5,6,7,8-tetrahydroquinolina y muy cerca de la concentración del equilibrio a bajas conversiones de quinolina. La rápida formación de 1,2,3,4-tetrahydroquinolina la relacionan con la alta densidad electrónica de los electrones π del heteroanillo aromático de la quinolina. La hidrogenólisis de 1,2,3,4-tetrahydroquinolina obteniendo o-Propilalnila es más lenta que la hidrogenación obteniendo de Decahidroquinoleina. Esta lenta hidrogenólisis de 1,2,3,4-tetrahydroquinolina puede ser debida a la resonancia del par de electrones libres del nitrógeno y el anillo aromático, estas interacciones de pares de electrones libres puede redundar en la adsorción de 1,2,3,4-tetrahydroquinolina. De cualquier forma la remoción de nitrógeno procede a partir de la Decahidroquinoleina.



ESQUEMA DE REACCIÓN PARA LA HIDRODESINITROGENACIÓN (HDN) DE QUINOLINA

5.2 CINÉTICA Y MECANISMO DE REACCIÓN DE HDN

En 1984, Satterfield y Yang desarrollaron una ecuación de tipo Langmuir-Hinshelwood usada para las reacciones de hidrogenólisis e hidrogenación. En este estudio se desarrolló con cada compuesto organo-nitrogenado y donde se cuantificó las inhibiciones de cada intermediario.

$$r_{ij} = \frac{k_p * K_i * C_i}{K_{AA} * C_A + K_{SA} * C_{SA} + K_A * C_A}$$

$$K_{SA} \sqrt{K_{AA}} = 2$$

$$K \sqrt{K_{AA}} = 2$$

Los subíndices A, SA, y AA denotan amoníaco, decahidroquinolina, y 1,2,3,4-tetrahidroquinolina, respectivamente. Para el 5,6,7,8-tetrahidroquinolina, y o-propilnilina, se asume que tiene los mismos parámetros de adsorción que $K_{AA} \cdot C_A$ denotando la suma de concentraciones de las aminas aromáticas. La relación de parámetros de adsorción se asume que son independientes de la temperatura

En la ecuación el término unitario en el denominador es insignificante, la quinoleína sigue un orden de reacción de cero, ocasionado probablemente por la alta superficie cubierta del componente organo-nitrogenado bajo las condiciones de reacción. Aquí se asume que todos los componentes nitrogenados son adsorbidos, en donde de los parámetros de adsorción, se asumen deberían ser independientes de la temperatura. El segundo grupo de aminas (decahidroquinoleína) es fuertemente adsorbida

Shih, en el año de 1977, propuso dos sitios de reacción, uno para la hidrogenación y otro para la hidrogenólisis, esto por que el mecanismo de reacción de la quinoleina, sigue una cinética de pseudo-primer orden, con respecto a la concentración de quinoleina alimentada, además su modelo propone que todos los componente que contiene nitrógeno, incluyendo el amoniaco tiene el mismo parámetro de adsorción

A Hidrogenación:

$$r_{ij} = k'_{ij} C_i = \frac{k_y * P_{H_2}^2 * C_i}{(1 + K_{H_2} P_{H_2} * C_A + K_N * C_{N_2})^2}$$

Las constantes de reacción a 342 °C son

$$K_{H_2} = 0.05 \text{ atm}^{-1}$$

$$K_N = 6.4 \times 10^6 \text{ g de petróleo/mol}$$

B Hidrogenólisis:

$$r_{ij} = k'_{ij} C_i = \frac{k_y * P_{H_2}^{2n} * C_i}{(1 + K_{H_2} P_{H_2} * C_A + K_N * C_{N_2})^2}$$

Donde "n" es igual con 1 y 0 para la hidrogenólisis de 1,2,3,4-tetrahidroquinoleina y decahidroquinoleina, respectivamente

Las constantes de reacción a 342 °C son

$$K_{H_2} = 0.05 \text{ atm}^{-1}$$

$$K_N = 6.4 \times 10^6 \text{ g de petróleo/mol}$$

Los subíndices i, j se refieren al componente i en la reacción j .

Miller y Hineman proponen en 1984 la siguiente ecuación de velocidad de reacción:

$$r_{HDN} = \frac{k * C_N}{(1 + K_N * C_N)}$$

Los valores de velocidad de adsorción tomados a 330 y 375 °C son

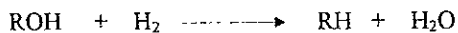
$$K_N = (7.9-9.6) \times 10^4 \text{ g de petróleo/mol}$$

$$K_N = (1.7-2.3) \times 10^4 \text{ g de petróleo/mol}$$

En este modelo Miller y Hineman asumieron que los compuestos como Quinoleína, 1,2,3,4-tetrahidroquinoleína, y decahidroquinoleína tienen la misma adsorción, pero la adsorción del amoníaco es insignificante. En comparación con la propuesta de Satterfield y Yang, Miller y Hineman mantiene el uno en el denominador, aun cuando la concentración en de la Quinoleína la comparan de la misma manera

VI. ESTUDIO DE HIDRODEOXIGENACIÓN (HDO).

La hidrogenólisis de compuestos oxigenados también ocurre durante la hidrodesulfuración



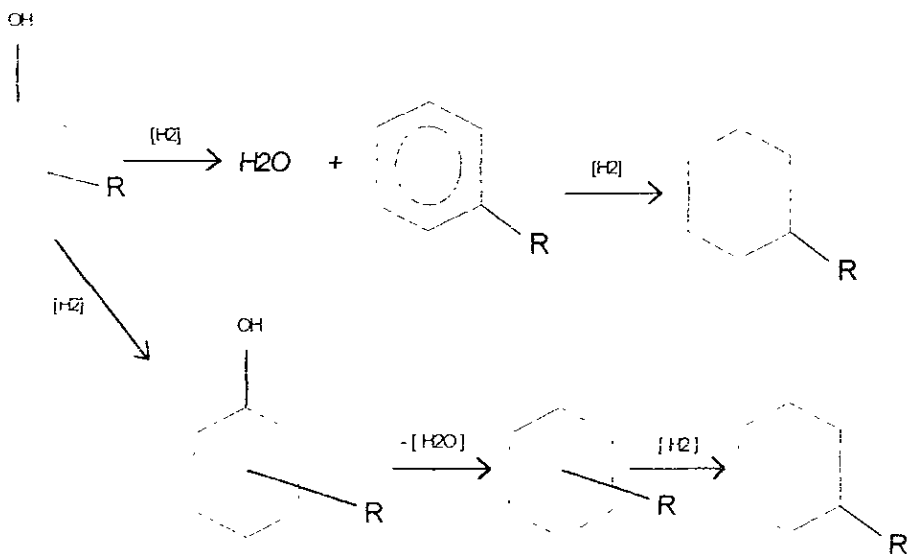
Esta última reacción tiene importancia económica en los procesos debido al consumo de hidrógeno sin la remoción de azufre

Pocos investigadores han realizado investigaciones de HDO, debido principalmente a que la concentración de oxígeno en fracciones de petróleo son relativamente menores que las concentraciones de azufre y nitrógeno. De cualquier manera el oxígeno es un heteroátomo que abunda en los residuos fósiles. Por lo que el estudio de la Hidrodeoxigenación es de gran importancia. Los componentes organo-oxigenados predominan principalmente en dos clases: (a) derivados de fenoles y naftoles (b) componentes heterocíclicos oxigenados, alcoholes, ácidos carboxílicos y cetonas se encuentran presentes, pero en pequeñas cantidades

6.1 MECANISMO DE REACCIÓN Y CINÉTICA DE LA HDO

Los mecanismos de reacción indican que la HDO ocurren con la saturación anterior del anillo aromático o directamente, sugiriendo la necesidad del desarrollo de un catalizador selectivo, de tal forma que reduzca el consumo de oxígeno

Esquema de reacción de Hidrodeoxigenación (HDO), compuestos fenólicos, estudiado por Odebumi y Ollis.



Odebunmi y Ollis encontraron las energías de activación y las constante de Arrhenius para el Cresol

	Ea(Kcal/mol)	ln A(litro/hr ² g cat)
o-Cresol	23	11.1
m-Cresol	27	15.0
p-Cresol	37	21.9

De acuerdo a las investigaciones realizadas por estos investigadores la conversión del Cresol a presión constante de Hidrógeno es aproximadamente de primer orden

VII. PLANTA DE HIDRODESULFURACIÓN DE NAFTAS

Así la Planta de Hidrodesulfuración de Naftas localizada en la refinería de Tula, consiste de un tratamiento catalítico de las Naftas que posteriormente serán sometidas al proceso de Reformación. El catalizador empleado es una mezcla de Co-Mo. Además que en esta planta se procesa 36,000 Barriles por día de naftas procedentes de la planta combinada y 500 Barriles por día de naftas ligeras procedentes de las unidades Hidrodesulfuradoras de Destilados Intermedios.

Estas cargas se mezclan con una corriente rica en hidrogeno proveniente de la planta reformadora, vaporizándose en un tren de precalentamiento y en un calentador a fuego directo antes de entrar al reactor. La hidrogenación se lleva a cabo dentro de la sección de reacción en un reactor catalítico de lecho fijo, de Co-Mo, a una temperatura de 313 °C y bajo una presión de 28.5 kg/cm² man.

El efluente de dicho reactor previamente enfriado se recibe en el separador de productos del reactor en donde se separan dos fases. La fase gaseosa consiste en su mayor parte de hidrogeno, que se recircula cierta parte a la sección de reacción y otra parte se envía como gas amargo a la planta de tratamiento con DEA. La fase líquida consiste en una mezcla de hidrocarburos hidrotratados se envían a la sección de estabilización y fraccionamiento, obteniéndose los siguientes productos:

- a Gas Amargo.
- b Hidrocarburos Líquidos Amargos
- c Nafta Hidrotratada
- d Gasolina isohexanizada

Esta sección cuenta con dos torres, en la primera se obtienen por el domo gas amargo (LPG) e hidrocarburos líquidos amargos los cuales son enviados a la sección de tratamiento con DEA de la Unidad tratadora y fraccionadora, mientras que por el fondo se obtiene una mezcla de nafta hidrotratada que se envía como alimentación a la segunda torre, de donde por el domo se obtienen pentanos e iso-hexanos los cuales se envían a la sección de fraccionamiento de la unidad tratadora y fraccionadora , y por el fondo se obtiene gasolina desisohexanizada la cual constituye la carga a la Unidad reformadora de Naftas y es el producto principal de esta unidad

VIII. DESCRIPCIÓN DE LA PLANTA

Para la descripción de la Unidad Hidrodesulfuradora de Nafta se consideran las siguientes secciones: reacción, estabilización y fraccionamiento.

8.1 SECCIÓN DE REACCIÓN

En la figura 8.1 se muestra la distribución de la sección de reacción.

La alimentación se recibe de tanques a razón de 36000 BPD a 38 °C y 5.0 kg/cm² man. También se recibe otra corriente de nafta ligera procedente de las plantas Hidrodesulfuradora de destilados intermedios a razón de 500 BPD y a las condiciones de 49 °C y 3.2 kg/cm² man.

La carga es mezclada y es enviada por medio de las bombas de alimentación GA-401, con un flujo de 36500 BPD y una presión de 38 kg/cm² man. Con esta corriente se mezcla una corriente rica en Hidrogeno, ya que se forma por la mezcla de las corrientes de gas de hidrogeno de recirculación procedente del compresor GB-401 y del hidrogeno fresco requerido para las reacciones de hidrodesulfuración, el cual es proporcionado por la planta reformadora.

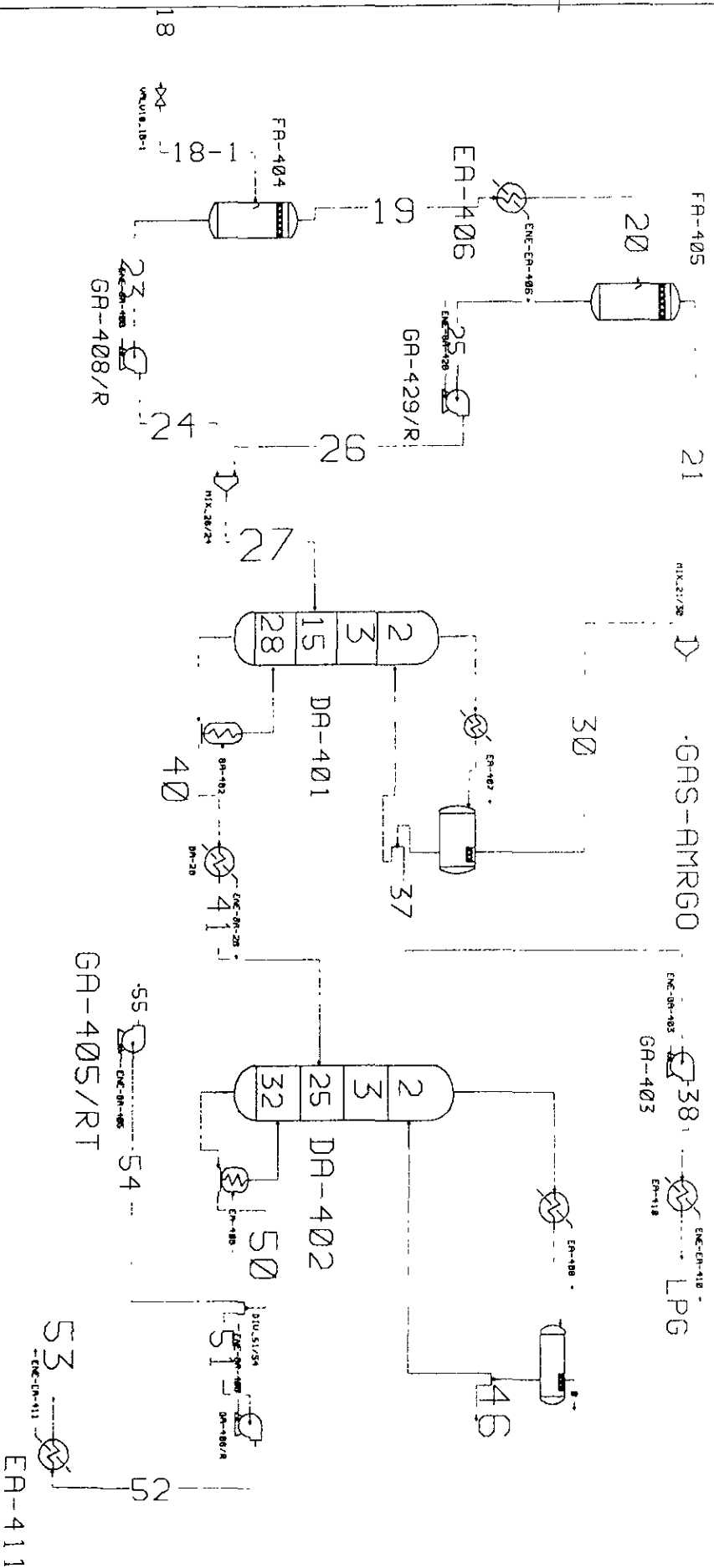


Figura 8 2
SECCION DE ESTABILIZACION Y FRACCIONAMIENTO

Los flujos de nafta ya mezclados con el hidrogeno pasan por el lado coraza del primer tren de precalentadores EA-401 y del segundo tren de precalentadores EA-402, en los cuales el efluente del reactor cede parte de su calor para incrementar la temperatura desde 42.6 °C hasta 261.5 °C y su consiguiente vaporización del 100%.

La carga vaporizada al 100% en peso continua a través del calentador a fuego directo BA-401 donde recibe la carga térmica necesaria para alcanzar la temperatura requerida en el reactor

La mezcla de gasolinas e hidrogeno que sale del calentador de carga BA-401 a una temperatura aproximada de 313 °C y una presión de 28.5 kg/cm² man, entra al reactor DC-401 en donde se lleva a cabo las reacciones de HDS.

El reactor contiene 37527 kg de catalizador DSD-1 del IMP soportado sobre un lecho de esferas de alumina dispuestas de la siguiente manera.

Una capa de esferas de ¾" de diámetro en el fondo del reactor hasta una altura de 152.4 mm arriba de la línea de tangencia y una segunda capa arriba de la anterior con esferas de ¼" de diámetro y la misma altura. El catalizador ocupa una altura total de 5029.0 mm, sobre él se encuentran dos capas de esferas de alumina de 76.2 mm cada una, la primera con esferas de ¼" de diámetro y la superior con esferas de ¾" de diámetro.

Sobre el catalizador se encuentra colocada la placa de canasta de distribución con el fin de distribuir uniformemente la carga a través de este

La relación de H₂/HC requerida para la HDS de naftas ligeras evitando la formación de coque es de 11.33 m³ base 100 % puro por barril de carga. La relación de velocidad espacial es de 6.0 h⁻¹, es decir

$$\text{LHSV} = \frac{\text{M3 de carga / hr}}{\text{M3 de catalizador}} = 6.0 \text{ h}^{-1}$$

La Velocidad Espacial Líquida por Hora, LHSV, por sus siglas en inglés, nos sirve para describir las conversiones de salida del reactor, bajo ciertos valores de LHSV.

Mientras menor sea el espacio velocidad, el grado de reacción se incrementará

La temperatura de operación del reactor influye sobre las reacciones que se llevan a cabo, siendo diferente sobre cada tipo de reacción. Por lo tanto, uno de los objetivos será controlar el contenido de azufre en el producto del reactor mediante el ajuste de las temperaturas de salida del calentador B-A-401, para compensar los cambios en el contenido de azufre y en los flujos de carga.

Algunos compuestos de azufre se descomponen a temperaturas tan bajas como 260 °C, el grado y la rapidez de la desulfuración se incrementa marcadamente cuando la temperatura a 343 °C, la velocidad de reacción es sumamente rápida, manteniéndose este incremento hasta la temperatura de 371 °C. Arriba de esta temperatura solo existe un ligero incremento en la rapidez de reacción. La saturación de oleofinas sigue un comportamiento al de desulfuración, con la diferencia de que el incremento en la velocidad de reacción se logra a temperaturas un poco mayores. Sin embargo, al aumentar la temperatura también aumenta la deposición de carbon sobre el catalizador acortando el tiempo de vida y actividad.

El efluente del reactor DC-401, pasa por el lado de los tubos del segundo precalentado EA-402 en el cual se enfría a 208.8 °C. El efluente continúa a través del EA-401 por el lado de los tubos donde cede calor para enfriarse a 180 °C. A continuación los productos de reacción pasan por el lado de los tubos del EA-403 en el cual se enfría y finalmente disminuyen su temperatura hasta 43 °C al ceder calor en el enfriador EA-404, después del cual llegan al tanque separador de productos del reactor FA-402.

Del FA-402 la fase líquida se envía a la sección de estabilización y fraccionamiento. La fase gaseosa rica en hidrógeno se recircula hacia la línea de alimentación de nafta por medio del compresor GB-401.

8.2 SECCIÓN DE ESTABILIZACIÓN Y FRACCIONAMIENTO

La figura 8 2 muestra la distribución de la sección de estabilización y fraccionamiento

La finalidad de la sección de estabilización y fraccionamiento, es la separación de hidrocarburos ligeros, lo cual se logra en la torre desbutanizadora DA-401 y la preparación de la carga a la Unidad Reformadora que se efectúa en la torre deisohexanizadora DA-402 en donde se realiza la separación de los pentanos e isohexanos de los hexanos y más pesados

La fase líquida procedente del tanque separador de producto desulfurado FA-402, a una temperatura de 43 °C y una presión de 23.0 kg/cm² man, se precalienta en el segundo precalentador de carga a la torre desbutanizadora EA-403 y finalmente aumenta su temperatura hasta 143 °C en el precalentador EA-405, utilizando los fondos de la torre deisohexanizadora DA-402 que se mandan como carga a la Unidad Reformadora de Naftas

Después de este precalentamiento, el producto desulfurado se envía a la sección de estabilización y fraccionamiento, recibiendo en el primer tanque separador de carga a desbutanizadora FA-404. Este opera a una presión de 6.3 kg/cm² man y una temperatura de 143 °C. A causa de la reducción de hidrocarburos ligeros e hidrógeno de los hidrocarburos más pesados. La fase líquida se envía hacia la torre desbutanizadora DA-401 por medio de la bomba GA-408. La fase gaseosa se enfría y condensa en el enfriador de gas amargo EA-406 y se recibe a 38 °C en el segundo tanque separador de carga desbutanizadora FA-405.

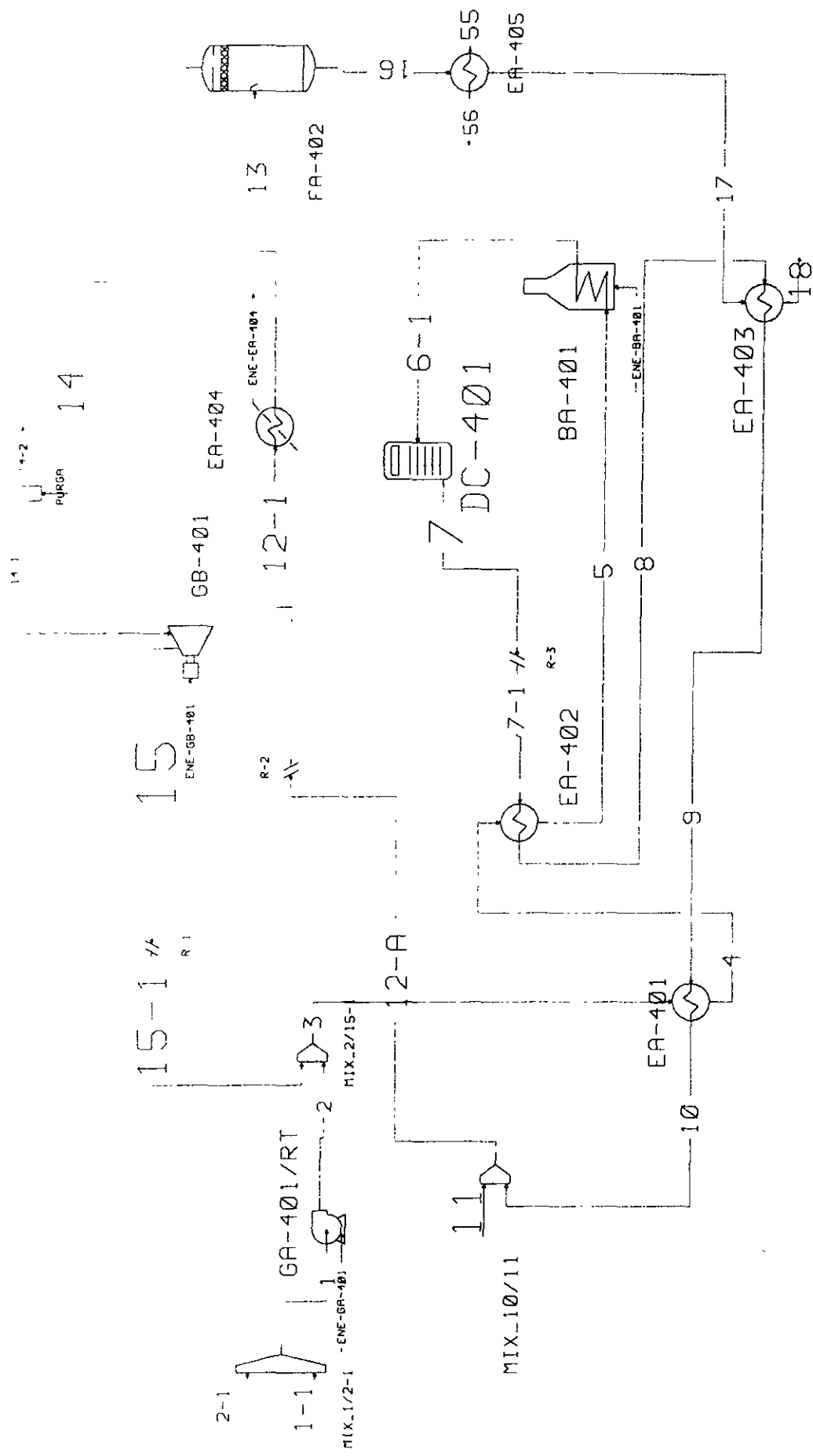


Figura 8.1
SECCION DE REACCION, Planta U-400

Este segundo separador opera a 5.6 kg/cm^2 man y tiene como objetivo recuperar los hidrocarburos de la fase gaseosa del primer separador y eliminar el gas amargo que se envía a la sección de tratamiento con DEA de la unidad Tratadora y Fraccionadora de Hidrocarburos. La fase líquida se envía hacia la torre desbutanizadora utilizando la bomba GA-409

Los hidrocarburos líquidos provenientes de los separadores FA-404 y FA-405 se unen antes de alimentarse al plato No 15 de la torre desbutanizadora. La función de esta torre consiste en estabilizar las naftas, separando los hidrocarburos más ligeros y butanos que contengan, para lo cual se cuenta con 28 platos. Las condiciones de operación de la torre son: 85°C y 12.9 kg/cm^2 man y 17.2 kg/cm^2 man en el fondo.

Los vapores del domo de la desbutanizadora se condensan enviándolos hacia la sección de tratamiento con DEA. Mientras los fondos de la torre se envía por diferencia de presiones hacia la torre deisohexanizadora DA-402. El producto de fondos de la desbutanizadora, vaporizado al 71% por la reducción de presiones, se alimenta al plato No 25 de la torre deisohexanizadora. La torre cuenta con 32 platos y tiene como la finalidad separar los pentanos e isopentanos de la carga que se alimenta a la Unidad Reformadora, la cual debe estar constituida por hexanos y más pesados. Las condiciones de operación de la torre son: 90°C y 2.0 kg/cm^2 man en el domo y 154°C y 2.1 kg/cm^2 man en el fondo.

IX. MODELAJE DEL REACTOR DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA

Como se mencionó en un inicio la parte básica de todo este estudio es el poder integrar un reactor con ecuaciones de velocidad de reacción catalíticas reales, tanto para componentes organo-sulfurados, como para los componentes organo-nitrogenados y organo-oxigenados

Dentro del simulador HYSIM se puede “operar” con reactores de tipo PFR (tubular) con uso de ecuaciones de velocidad de reacción muy sencillas Sin embargo, como se describió en capítulos anteriores, el reactor empleado en la planta Hidrodesulfuradora, U-400, es de lecho fijo, con una mezcla de alimentación completamente vaporizada, y con ecuaciones de velocidad de reacción de tipo catalítica En este caso el simulador empleado, no cuenta con la capacidad de poder introducir todos estos tipos de parámetros involucrados en dichas reacciones

Alternativamente, HYSIM cuenta con un modulo de Post-programación Este modulo sirve para introducir programas, a través del editor de MS-DOS, creando una interface para realizar cualquier tipo de cálculo

Se realizó un algoritmo de cálculo en el cual se resolvieran las diferentes ecuaciones de balance de materia y energía para un reactor de tipo tubular, en la cual se probaron diferentes modelos asta que se ajustara bien a lo requerido de datos en planta Este algoritmo se muestra en el apendice A Resolviendo las ecuaciones diferenciales por medio del método de Runge-Kutta de cuarto orden.

Estas ecuaciones de balance de materia y energía consideran que las ecuaciones son exotérmicas y se trata de un reactor adiabático, y las cuales son las siguientes

EC DE BALANCE DE MATERIA

$$F_{A0}dx = r_A dV$$

EC DE BALANCE DE ENERGÍA

$$F_{A0}dx(-\Delta H) = m C_p dT$$

donde,

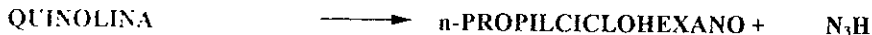
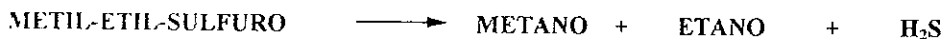
F_{A0} es la concentración de entrada al reactor de A, dx , es como cambia la composición de A, a lo largo del reactor; r_A es la ecuación de velocidad de reacción del componente A, y dV la diferencial de volumen del reactor

En la ecuación de balance de energía se introducen los términos de $(-\Delta H)$, m y C_p que son la entalpía, masa y calor específico de la corriente, sin embargo el término importante es el de dT , ya que marca como cambia la temperatura a lo largo del reactor

Una vez confirmado que el algoritmo funciona, así como las ecuaciones de velocidad de reacción se prosiguió a escribirlo en lenguaje de computadora. Aquí se estudiaron diferentes aspectos en los que la computadora pudiera crear una interfase con el programa. Todo con la finalidad de poder realizar los cálculos de conversión con los datos de la corriente de entrada al reactor y finalmente asignar valores a las corrientes de salida

9.1 SELECCION DE LOS MODELOS DE ECUACIÓN DE VELOCIDAD DE REACCIÓN PARA LA HDS.

En los estudios realizados se tomaron los siguientes compuestos organo-sulfurados, organo-nitrogenados y organo-oxigenados dentro del esquema de HDS



Las ecuaciones de velocidad de reacción empleadas en primer instancia fueron, las desarrolladas por Hougen-Watson:

Para la hidrogenólisis

$$r_{T, \sigma} = \frac{k_T * K_T * K_{H_2} * p_T * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H + K_T * p_T + K_S * p_S / p_H)^2}$$

Para la hidrogenación

$$r_{A, \tau} = \frac{k_B * K_B * K_{H_2} * p_B * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H + K_A * p_A + K_B * p_B)^2}$$

Además se aplicó el modelo desarrollado por Van Parijs y Forment

Para la hidrogenólisis

$$r_{T, \sigma} = \frac{k_T * K_T * K_{H_2}^2 * p_T * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H^{0.5} + K_T * p_T + K_S * p_S / p_H)^3}$$

Para la hidrogenación

$$r_{A, \tau} = \frac{k_B * K_B * K_{H_2}^2 * p_B * p_H}{(1 + K_{H_2} * p_H^{0.5} + K_A * p_A + K_B * p_B)^3}$$

Entre estas dos ecuaciones la conversión tenida de Tiofeno, no había grandes diferencias, obteniendo una conversión con las condiciones de alimentación al reactor de 0.91926, una concentración de salida de 66.5 ppm, con lo que los resultados no son los satisfactorios para nuestro proceso

Otra ecuación de velocidad de reacción provada dentro de las ecuaciones de balance de materia y energía en el reactor, fué la desarrollada por Satterfield y Roberts, 1968

$$r_{HDS} = \frac{k * p_s * p_H}{(1 + K_{AR} * p_{AR} + K_S * p_S)^2}$$

Con esta ecuación los valores de conversión fueron del 72% y una concentración final de azufre superior a la requerida

Posteriormente se utilizó la ecuación de Phillipson

$$r_{HDS} = \frac{k * p_s * p_H^{1/2} * p_{TOT}^{1/2}}{p^{1/2}_{HC} (1 + 0.21 * p_{H2S} / p_{TOT})^2}$$

Ademas de que se Phillipson daba los valores de las constantes para el Mercaptano, Metil Etil Sulfuro y Dietil Sulfuro se encontró los siguientes valores de conversión

COMPUESTO	CONVERSIÓN
TIOFENO	0.999
MERCAPTANO	0.9996
METIL-ETIL-SULFURO	0.999
DIETIL-SULFURO	0.9999

Con lo que se obtuvo concentraciones de 0.4 ppm de azufre en la corriente de salida. Concordando con los datos esperados.

Para las reacciones de Hidrodenitrificación se aplicó las ecuaciones desarrolladas por Miller y Hineman en 1984:

$$r_{HDN} = \frac{k * C_v}{(1 + K_v * C_v)}$$

Mientras para la Hidrodeoxigenación se utilizó las constantes desarrolladas por Odebummi y Ollis Obteniendo los siguientes resultados:

COMPUESTO	CONVERSIÓN
QUINOLINA	0.9
m-CRESOL	0.7

IX. SIMULACIÓN DE LA PLANTA

En la simulación de la planta en primer instancia se declararon los siguientes compuestos: Hidrógeno, Acido Sulfúrico, Metano, Etano, Propano, i-Butano, n-Butano, i-Pentano, 22-Metil propano, n-Pentano, 22-Metil butano, 3-Mpentano, 2-Mpentano, n-Hexano, n-Heptano, n-Octano, n-Nonano, n-Decano, n-Undecano, Metil ciclopentano, Ciclohexano, Metil ciclohexano, Etil-Mercaptano, Metil-Etil-Sulfuro, diEtil-Sulfuro, Tiofeno, Benzeno, Tolueno, m-Cresol, Quinoline, Amoniacó, Agua, n-Propil ciclohexano.

La ecuación de estado que se empleo para el cálculo de propiedades, es la Peng-Robinson-Stryjek-Vera (PRSV), debido a la naturaleza de los componentes tales como los organo nitrogenados (Quinolina y Amoniacó), los compuestos de organo-sulfurado (Etil-Mercaptano, Metil-Etil-Sulfuro, Dietil-sulfuro y Tiofeno) y organo-oxigenados (m-Cresol), los cuales son polares y presentan demasiadas dificultades, es decir ecuaciones tales como Soave-Redlich-Kwong, no tienen la capacidad de manejar dichos componentes

De acuerdo con los datos obtenidos del diseño de la planta se cuenta con composiciones para compuestos como: Hidrógeno, Acido Sulfúrico, Metano, Etano, Propano, i-Butano, n-Butano, i-Pentano, n-Pentano, i-Hexano, n-Hexano más pesados así como la concentración en partes por millón de azufre. Por lo que se ponderaron las concentraciones faltantes para los compuestos orgánicos mayores de C-6, de tal forma que se ajustará al peso molecular marcado en las condiciones de diseño, el mismo procedimiento se realizó para las concentraciones de los compuestos de azufre, de tal manera que para la entrada no sobrepasara las 800 ppm. Mientras que para los compuestos organo-nitrogenados y organo-oxigenados se tomaron datos de

concentraciones de fracciones ligeras comerciales, encontradas en la literatura y que son de 400 a 700 ppm y de 200 a 500 ppm, para compuestos organo-nitrogenados y organo-oxigenados, respectivamente

10.1 SELECCIÓN DE LAS UNIDADES DE OPERACIÓN PARA LLEVAR A CABO LA SIMULACIÓN

Los equipos en HYSIM y con los que cuenta para realizar la simulación son los siguientes

Mezcladores de corrientes MIX_1/2, MIX_10/11, MIX_24/26, MIX_21/30

Bombas GA-401, GA-409, GA-408, GA-403, GA-405

Compresor GB-401

Intercambiadores de Calor. EA-404, EA-406, EA-410, BA-29, BA-801

Intercambiadores de Calor de proceso a proceso EA-401, EA-402, EA-403, EA-405

Tanques separadores (Flash) FA-402, FA-404, FA-405.

Divisores de corrientes PURGA, DIV_54/51.

Torres de Destilación DA-401, DA-402

Operaciones denominadas " Calculator": DC-401

Esta última operación se utilizó debido a las restricciones de Hysim, y que es el reactor de hidrodesulfuración, parte central de la simulación

10.2 CORRIENTE DE CORTE.

Un aspecto muy importante para nuestra simulación, como para todas en general, es el encontrar cuantas y cuales son las corrientes de corte que integran un proceso. Por lo que al analizar el PFD original de la planta, se encontró que en la sección de reacción de la planta, se cuenta con una corriente de corte, a la cual se le tenían que proporcionar estimados iniciales, para poder seguir trabajando con las partes restantes, hasta llegar a la convergencia. Así que, de acuerdo con el análisis, nuestra corriente de corte se encontrará ubicada, como parte de la recirculación del hidrógeno y a la salida del compresor, esto es por que el hecho de saber cual debe ser la presión de diseño a la salida del compresor, y además de contar con la información, que la mayor parte de esta corriente es hidrógeno, así se reduce la complejidad del problema en la estimación de concentraciones, es importante aclarar que en este ciclo se encuentran otras corrientes que pueden servir como cortes, pero la complejidad de las composiciones es mayor

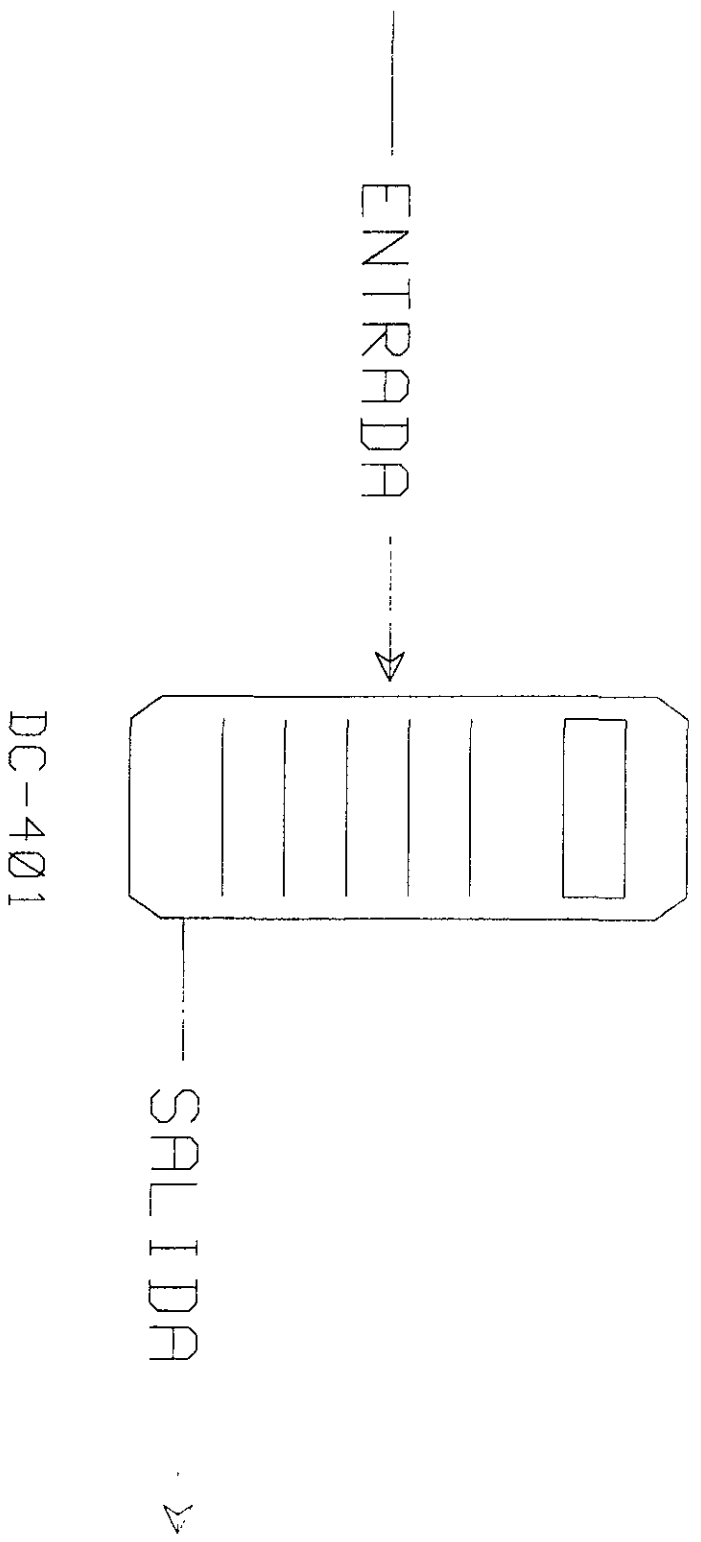
XI. RESULTADOS

Como ya se menciono, una vez realizadas las pruebas de escritorio que determina si el algoritmo de calculo es el adecuado, se traduce a lenguaje de computadora. El programa lleva por nombre, HDS12, el cual está escrito en aproximadamente 1700 líneas. Un esquema de este programa se muestra en la figura 110.

En esta primera parte de los resultados se presenta algunas pruebas del programa. Como se comporta la concentración de salida, dada una concentración de azufre a la entrada al reactor. Se manejan diferentes concentraciones de azufre y al graficar se observa una clara tendencia de dichas concentraciones, las cuales se van haciendo asintotas a concentraciones mayores a las 1,000 ppm y a concentraciones menores de 600 ppm de azufre a la entrada.

Considerando que los compuestos organo-nitrogenado y organo-oxigenados su comportamiento es menos complejo, obtuvo las siguientes concentraciones de salida del reactor, en ppm.

Compuesto	ppm en la corriente de entrada al reactor	ppm en la corriente salida del reactor
m-Cresol	300	10
Quinolena	400	20



REACTOR DE HIDRODESULFURACION
PROGRAMA HDS.13
LAB. DE SIMULACION Y OP. DE PROCESOS
FACULTAD DE QUIMICA, UNAM.

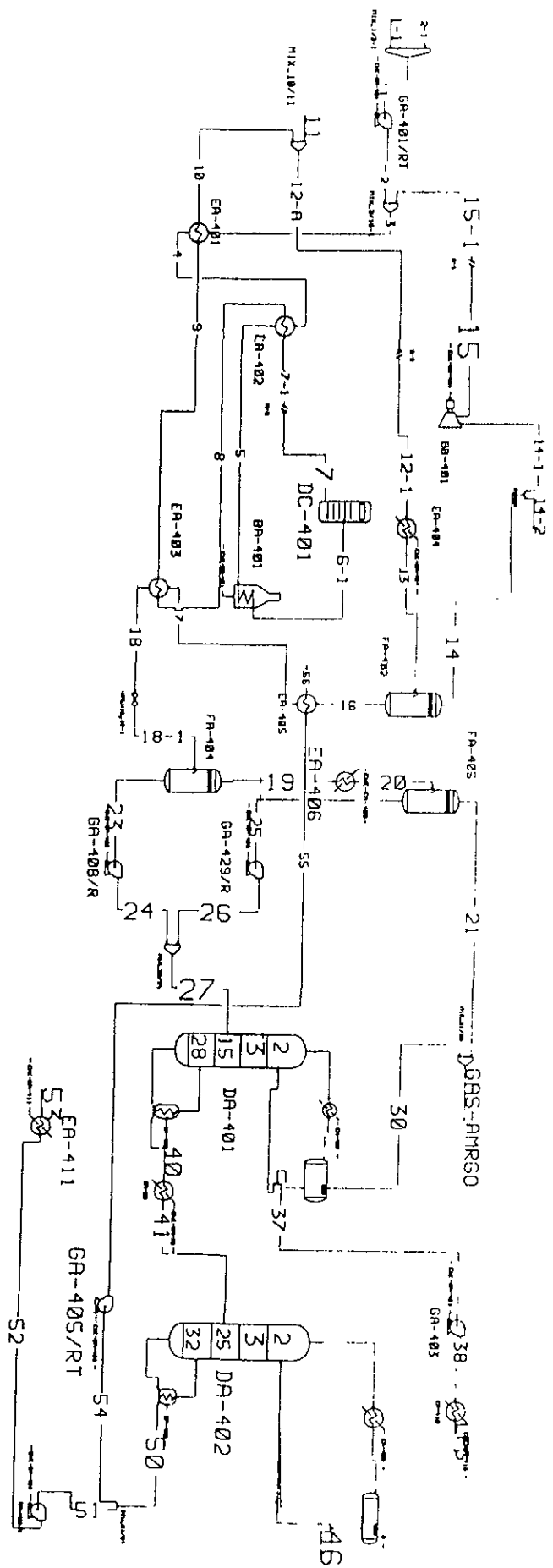
Figura 11.0

Para la simulación de la planta U-400 se presenta el “flowsheet” a partir de la integración de todos los elementos de la planta, y se muestran en la figura 11.1

Los resultados de las corrientes se dan en dos partes, en la primera parte se dan todas las propiedades de las corrientes, como son: flujo másico, molar, volumétrico, temperatura, presión, peso molecular, densidad, tabla 11.2. Para que en la segunda parte se muestren los valores de composición para todas las corrientes, tabla 11.3

Para las torres se manejan resultados de corriente de salida, de flujo en los domos y fondos de estas, en la tabla 11.4 y 11.6, se muestran los valores para la torre desbutanizadora, DA-401, y para la torre desisohexanizadora, DA-402, respectivamente. Así como las condiciones para cada plato: presión, flujo, temperatura y calor, en tabla 11.5 y 11.7, para las torres DA-401 y DA-402, respectivamente

Los cálculos se realizaron para concentraciones de 1,200 ppm y 600 ppm en la corriente de alimentación proveniente de la planta combinada, los resultados se muestran en las tablas 11.8 y 11.9



SIMULACIÓN DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS.
 FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM
 PROF. CELESTINO MONTIEL
 ALUMNO MIGUEL A. JUAREZ ESPINO MIGUEL ANGEI.
 1999
 FIGURA 11.1

Verificación de programa HDS13.HCO a diferentes ppm de azufre en la alimentación

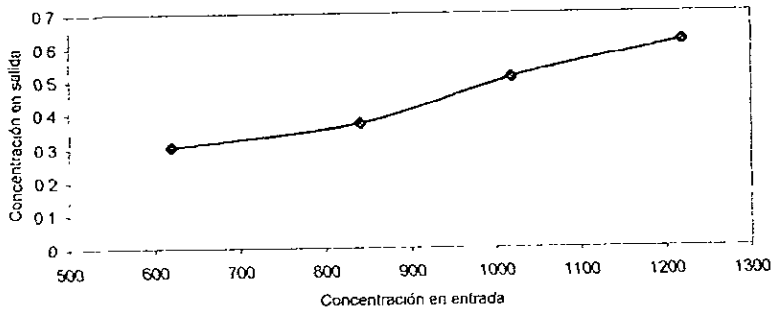
Stream	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Vapour frac.	1	1	1	1
Temperature F	665	695.4692	665	695.469
Pressure psig	406.004	377.0045	406.004	377.0045
Molar Flow lbmole/hr	5123.71	4985 9085	5123.71	4984.8374
Mass Flow lb/hr	389116 447	389151.1694	389081 173	389079 107
LiqVol Flow barrel/d	40651.5978	40453 3355	40646 7238	40445.1815
Enthalpy Btu/hr	1.79E+08	1 88E+08	1.79E+08	1.88E+08
Conc. en ppm				
E-Mercaptan lb/hr	155.6584	0 03656	155 6494	0.03655
M-E-Sulfide lb/hr	39.0241	0.02772	77 8188	0.05543
diE-Sulphide lb/hr	46 2151	0.0054	46.2125	0 00539
Thiophene lb/hr	86 2257	0.07383	116.7282	0.09982
ppm de azufre	840 6822752	0 368776998	1018 83341	0 5068121

Stream	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Vapour frac.	1	1	1	1
Temperature F	665	695 4688	665	695 4701
Pressure psig	406 004	377 0045	406 004	377 0045
Molar Flow lbmole/hr	5123 71	4983 4714	5123 71	4986.1782
Mass Flow lb/hr	389033.74	389039.8027	389159.402	389174 972
LiqVol Flow barrel/d	40640.3296	40438 8748	40657.5451	40455.0124
Enthalpy Btu/hr	1.79E+08	1 88E+08	1.79E+08	1 88E+08
Conc. en ppm				
E-Mercaptan lb/hr	194 5272	0 04552	77 8325	0.01828
M-E-Sulfide lb/hr	77.8135	0 05541	38.9162	0.02772
diE-Sulphide lb/hr	46 2093	0.00539	46 2246	0 0054
Thiophene lb/hr	155 6218	0 13333	77 8325	0 0667
ppm de azufre	1218 844926	0.616003808	618 784484	0 30346247

TABLA 11.1

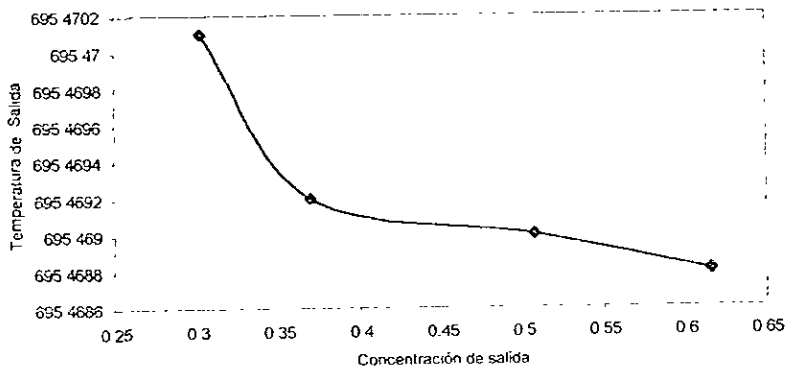
Conc. En entrada	Conc. En Salida
618.8	0.303
840.7	0.37
1018.8	0.507
1218.85	0.616

Concentraciones de Salida del reactor de Hidrosulfuración. Hds13



Conc. En Salida	Temperatura
0.303	695.4701
0.37	695.4692
0.507	695.469
0.616	695.4688

Temperaturas de salida del reactor Hds13



Resultado de Condiciones de las Corrientes Simuladas

Stream Name	1-UNO	2-UNO	2
Vapour Frac	0	0	0
Temperature F	100	120	102.7001
Pressure psig	40	40	541
Flow lbmole/hr	3378.3999	46.5	3424.8999
Mass Flow lb/hr	3.80E+05	5223.8789	3.85E+05
Liq Vol Flow barrel/day	36619.8398	502.2663	37122.1055
Mole Weight	112.4821	112.3415	112.4802
Mass Density lb/ft ³	43.5115	43.0607	43.7515

Stream Name	3	7	15
Vapour Frac	0.3081	1	1
Temperature F	109.3161	695.3868	200.2786
Pressure psig	504	377.004	504
Flow lbmole/hr	5147.8999	4993.48	1723
Mass Flow lb/hr	3.94E+05	3.94E+05	8281.6123
Liq Vol Flow barrel/day	41018.9336	40797.7852	3897.5217
Mole Weight	76.4111	78.8167	4.8065
Mass Density lb/ft ³	14.0921	2.7734	0.3472

Stream Name	16	19	24
Vapour Frac	0	1	0
Temperature F	110	277.764	279.0502
Pressure psig	324.004	89	250
Flow lbmole/hr	3547.6406	122.2117	3425.429
Mass Flow lb/hr	3.88E+05	5551.3398	3.82E+05
Liq Vol Flow barrel/day	37679.9258	691.8404	36988.0859
Mole Weight	109.3706	45.424	111.652
Mass Density lb/ft ³	43.0332	0.6218	37.794

Stream Name	26	40	GAS-AMARGO
Vapour Frac	0	0	1
Temperature F	101.2707	501.2051	97.1016
Pressure psig	280	244	79
Flow lbmole/hr	47.2689	3295.2981	114.9428
Mass Flow lb/hr	4116.4917	3.78E+05	2631.9517
Liq Vol Flow barrel/day	419.146	36305.5273	460.901
Mole Weight	87.0867	114.6919	22.8979
Mass Density lb/ft ³	41.2913	27.5414	0.3671

TABLA 11.2

Stream Name	46	56	LPG
Vapour Frac	0	0	0
Temperature F	175	220	100
Pressure psig	2.6	315	280.304
Flow lbmole/hr	348.8001	2730	137.3999
Mass Flow lb/hr	27681.7754	3.25E+05	7431.5381
LiqVol Flow barrel/day	2944.8765	30909.4297	913.5002
Mole Weight	79.3629	118.8741	54.0869
Mass Density lb/ft3	38.3466	40.1005	33.4495

Stream Name	18	12-A	11
Vapour Frac	0	0.3487	1
Temperature F	279.2259	215.0132	146
Pressure psig	303.0041	341.004	395
Flow lbmole/hr	3547.6406	5299.1797	305.7
Mass Flow lb/hr	3.88E+05	3.96E+05	2858.4902
LiqVol Flow barrel/day	37679.9258	41642.0078	844.4312
Mole Weight	109.3706	74.809	9.3506
Mass Density lb/ft3	37.5094	8.3725	0.5885

Stream Name	13	55	12-UNO
Vapour Frac	0.3305	0	0.3487
Temperature F	110	334.975	215.0132
Pressure psig	324.004	325	341.004
Flow lbmole/hr	5299.1797	2730	5299.1797
Mass Flow lb/hr	3.96E+05	3.25E+05	3.96E+05
LiqVol Flow barrel/day	41642	30909.4297	41642
Mole Weight	74.809	118.8741	74.809
Mass Density lb/ft3	9.6924	3.94E+07	2.74E+07

Stream Name	14	10	4
Vapour Frac	1	0.3098	0.3357
Temperature F	110	216	275.7684
Pressure psig	324.004	341.004	475
Flow lbmole/hr	1751.5391	4993.48	5147.8999
Mass Flow lb/hr	8418.7852	3.94E+05	3.94E+05
LiqVol Flow barrel/day	3962.0789	40797.5742	41018.9336
Mole Weight	4.8065	78.8163	76.4411
Mass Density lb/ft3	6.42E+06	2.60E+07	4.26E+07

Stream Name	15-UNO	9	7-UNO
Vapour Frac	0.6982	0.7417	1
Temperature F	593.7288	717.5707	695.3868
Pressure psig	223.5073	147.0093	377.004
Flow lbmole/hr	3723.16345	3645.9535	4993.48
Mass Flow lb/hr	265190.9408	265000.0000	3.94E+05
LiqVol Flow barrel/day	28239.07337	28128.3937	40797.5742
Mole Weight	56.9167	58.1043	78.8163
Mass Density lb/ft ³	3.391866667	6.9107	1.89E+08

Stream Name	6-UNO	17	18-UNO
Vapour Frac	1	0	0.0344
Temperature F	665	203	277.764
Pressure psig	402	313.004	89
Flow lbmole/hr	5147.8999	3547.6406	3547.6406
Mass Flow lb/hr	3.94E+05	3.88E+05	3.88E+05
LiqVol Flow barrel/day	41018.9336	37679.9258	37679.9258
Mole Weight	76.4411	109.3706	109.3706
Mass Density lb/ft ³	2.9714	40.1381	20.3182

Stream Name	19	37	30
Vapour Frac	1	0	0.9995
Temperature F	277.764	110.2026	110.2026
Pressure psig	89	235	235
Flow lbmole/hr	122.2117	137.3999	40
Mass Flow lb/hr	5551.3398	7431.5381	1197.1038
LiqVol Flow barrel/day	691.8404	913.5002	188.2066
Mole Weight	45.424	54.0869	29.9276
Mass Density lb/ft ³	0.6218	32.8582	1.3646

Stream Name	23	20	53
Vapour Frac	0	0.6132	0
Temperature F	277.764	100	100
Pressure psig	89	79	50
Flow lbmole/hr	3425.429	122.2117	216.4981
Mass Flow lb/hr	3.82E+05	5551.3398	25736.0059
LiqVol Flow barrel/day	36988.0859	691.8404	2451.2205
Mole Weight	111.652	45.424	118.8741
Mass Density lb/ft ³	37.6113	1.1473	43.9914

Stream Name	21	14-DOS	14-DOS
Vapour Frac	1	1	1
Temperature F	100	110	110
Pressure psig	79	324.004	324.004
Flow lbmole/hr	74.9428	28.5391	1723
Mass Flow lb/hr	1434.8481	137.1734	8281.6123
LiqVol Flow barrel/day	272.6943	64.557	3897.5217
Mole Weight	19.1459	4.8065	4.8065
Mass Density lb/ft ³	0.3028	0.264	0.264

Stream Name	27	52	41
Vapour Frac	0	0	0.5349
Temperature F	277.2997	332.6183	343
Pressure psig	250	60	30
Flow lbmole/hr	3472.698	216.4981	3295.2981
Mass Flow lb/hr	3.87E+05	25736.0059	3.78E+05
LiqVol Flow barrel/day	37407.2344	2451.2205	36305.5273
Mole Weight	111.3177	118.8741	114.6919
Mass Density lb/ft ³	37.8211	36.5403	1.2056

Stream Name	50	38	54
Vapour Frac	0	0	0
Temperature F	332.3518	110.8704	332.3518
Pressure psig	31	290.304	31
Flow lbmole/hr	2946.498	137.3999	2730.0000*
Mass Flow lb/hr	3.50E+05	7431.5381	3.25E+05
LiqVol Flow barrel/day	33360.6484	913.5002	30909.4297
Mole Weight	118.8741	54.0869	118.8741
Mass Density lb/ft ³	36.5028	32.9183	36.5028

Stream Name	8	5	25
Vapour Frac	0.4749	1	0
Temperature F	408	546.3435	100
Pressure psig	363.004	465	79
Flow lbmole/hr	4993.48	5147.8999	47.2689
Mass Flow lb/hr	3.94E+05	3.94E+05	4116.4917
LiqVol Flow barrel/day	40797.5742	41018.9336	419.146
Mole Weight	78.8163	76.4411	87.0867
Mass Density lb/ft ³	6.1467	4.2871	41.1756

Stream Name	51	I
Vapour Frac	0	0
Temperature F	332.3518	100.2739
Pressure psig	31	40
Flow lbmole/hr	216.4981	3424.8999
Mass Flow lb/hr	25736.0059	3.85E+05
Liq Vol Flow barrel/day	2451.2205	37122.1055
Mole Weight	118.8741	112.4802
Mass Density lb/ft3	36.5028	43.5054

RESULTADO DE CONCENTRACIONES EN LA SIMULACIÓN

Stream	1-UNO	DOS-UNO	1	2
Hydrogen mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H2S mole frac.	0.0000	0.0058	0.0001	0.0001
Methane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane mole frac.	0.0028	0.0006	0.0038	0.0038
i-Butane mole frac.	0.0052	0.0019	0.0052	0.0052
n-Butane mole frac.	0.0242	0.0165	0.0241	0.0241
i-Pentane mole frac.	0.0128	0.0080	0.0127	0.0127
2,2-Mpropane mole frac.	0.0069	0.0080	0.0069	0.0069
n-Pentane mole frac.	0.0329	0.0350	0.0330	0.0330
2,2-Mbutane mole frac.	0.0107	0.0250	0.0109	0.0109
3-Mpentane mole frac.	0.0203	0.0200	0.0202	0.0202
2-Mpentane mole frac.	0.0405	0.0412	0.0405	0.0405
n-Hexane mole frac.	0.0302	0.0303	0.0302	0.0302
n-Heptane mole frac.	0.0527	0.0527	0.0527	0.0527
n-Octane mole frac.	0.2938	0.2960	0.2939	0.2939
n-Nonane mole frac.	0.1924	0.1920	0.1924	0.1924
n-Decane mole frac.	0.1205	0.1214	0.1205	0.1205
n-C11 mole frac.	0.0603	0.0608	0.0603	0.0603
Mecyclopentanmole frac.	0.0609	0.0579	0.0608	0.0608
Cyclohexane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mecyclohexanemole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
E-Mercaptan mole frac.	0.0004	0.0002	0.0004	0.0004
M-E-Sulfide mole frac.	0.0003	0.0001	0.0003	0.0003
diE-Sulphidemole frac.	0.0001	0.0002	0.0001	0.0001
Thiophene mole frac.	0.0004	0.0001	0.0004	0.0004
Benzene mole frac.	0.0076	0.0053	0.0076	0.0076
Toluene mole frac.	0.0225	0.0204	0.0225	0.0225
m-Cresol mole frac.	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002
Quinoline mole frac.	0.0004	0.0004	0.0004	0.0004
Ammonia mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H2O mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Psychexanemole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

TABLA 11.3

Stream	3	9	10	4
Hydrogen mole frac.	0.2986	0.2755	0.2755	0.2986
H2S mole frac.	0.0008	0.0017	0.0017	0.0008
Methane mole frac.	0.0239	0.0248	0.0248	0.0239
Ethane mole frac.	0.0044	0.0050	0.0050	0.0044
Propane mole frac.	0.0040	0.0042	0.0042	0.0040
i-Butane mole frac.	0.0040	0.0041	0.0041	0.0040
n-Butane mole frac.	0.0177	0.0185	0.0185	0.0177
i-Pentane mole frac.	0.0088	0.0091	0.0091	0.0088
2,2-Mpropane mole frac.	0.0049	0.0051	0.0051	0.0049
n-Pentane mole frac.	0.0226	0.0232	0.0232	0.0226
2,2-Mbutane mole frac.	0.0074	0.0076	0.0076	0.0074
3-Mpentane mole frac.	0.0136	0.0141	0.0141	0.0136
2-Mpentane mole frac.	0.0273	0.0282	0.0282	0.0273
n-Hexane mole frac.	0.0203	0.0209	0.0209	0.0203
n-Heptane mole frac.	0.0352	0.0363	0.0363	0.0352
n-Octane mole frac.	0.1957	0.2018	0.2018	0.1957
n-Nonane mole frac.	0.1281	0.1320	0.1320	0.1281
n-Decane mole frac.	0.0802	0.0827	0.0827	0.0802
n-C11 mole frac.	0.0401	0.0414	0.0414	0.0401
Mycyclopentane mole frac.	0.0409	0.0422	0.0422	0.0409
Cyclohexane mole frac.	0.0000	0.0027	0.0027	0.0000
Mcyclohexane mole frac.	0.0000	0.0071	0.0071	0.0000
E-Mercaptan mole frac.	0.0002	0.0000	0.0000	0.0002
M-E-Sulfide mole frac.	0.0002	0.0000	0.0000	0.0002
diE-Sulphide mole frac.	0.0001	0.0000	0.0000	0.0001
Thiophene mole frac.	0.0003	0.0000	0.0000	0.0003
Benzene mole frac.	0.0051	0.0025	0.0025	0.0051
Toluene mole frac.	0.0150	0.0086	0.0086	0.0150
m-Cresol mole frac.	0.0001	0.0000	0.0000	0.0001
Quinoline mole frac.	0.0003	0.0001	0.0001	0.0003
Ammonia mole frac.	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000
H2O mole frac.	0.0003	0.0004	0.0004	0.0003
n-Psychexane mole frac.	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000

Stream	7-UNO	8	5	6-UNO
Hydrogen mole frac	0.2755	0.2755	0.2986	0.2986
H2S mole frac	0.0017	0.0017	0.0008	0.0008
Methane mole frac.	0.0248	0.0248	0.0239	0.0239
Ethane mole frac.	0.0050	0.0050	0.0044	0.0044
Propane mole frac	0.0042	0.0042	0.0040	0.0040
i-Butane mole frac.	0.0041	0.0041	0.0040	0.0040
n-Butane mole frac	0.0185	0.0185	0.0177	0.0177
i-Pentane mole frac.	0.0091	0.0091	0.0088	0.0088
2,2-Mpropane mole frac.	0.0051	0.0051	0.0049	0.0049
n-Pentane mole frac	0.0232	0.0232	0.0226	0.0226
2,2-Mbutane mole frac	0.0076	0.0076	0.0074	0.0074
3-Mpentane mole frac	0.0141	0.0141	0.0136	0.0136
2-Mpentane mole frac	0.0282	0.0282	0.0273	0.0273
n-Hexane mole frac	0.0209	0.0209	0.0203	0.0203
n-Heptane mole frac.	0.0363	0.0363	0.0352	0.0352
n-Octane mole frac	0.2018	0.2018	0.1957	0.1957
n-Nonane mole frac	0.1320	0.1320	0.1281	0.1281
n-Decane mole frac.	0.0827	0.0827	0.0802	0.0802
n-ClI mole frac	0.0414	0.0414	0.0401	0.0401
Mycyclopentanmole frac.	0.0422	0.0422	0.0409	0.0409
Cyclohexane mole frac.	0.0027	0.0027	0.0000	0.0000
Mycyclohexanemole frac	0.0071	0.0071	0.0000	0.0000
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0002	0.0002
M-E-Sulfide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0002	0.0002
diE-Sulphidemole frac.	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001
Thiophene mole frac.	0.0000	0.0000	0.0003	0.0003
Benzene mole frac.	0.0025	0.0025	0.0051	0.0051
Toluene mole frac.	0.0086	0.0086	0.0150	0.0150
m-Cresol mole frac	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001
Quinoline mole frac.	0.0001	0.0001	0.0003	0.0003
Ammonia mole frac	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000
H2O mole frac	0.0004	0.0004	0.0003	0.0003
n-Psychexanemole frac.	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000

Stream	17	18	12-A	11
Hydrogen mole frac.	0.0134	0.0134	0.0308	0.7666
H2S mole frac.	0.0014	0.0014	0.0016	0.0000
Methane mole frac.	0.0070	0.0070	0.0282	0.0838
Ethane mole frac.	0.0066	0.0066	0.0088	0.0703
Propane mole frac.	0.0074	0.0074	0.0064	0.0432
i-Butane mole frac.	0.0059	0.0059	0.0044	0.0100
n-Butane mole frac.	0.0246	0.0246	0.0181	0.0116
i-Pentane mole frac.	0.0126	0.0126	0.0088	0.0033
22-Mpropane mole frac.	0.0068	0.0068	0.0049	0.0018
n-Pentane mole frac.	0.0319	0.0319	0.0220	0.0027
22-Mbutane mole frac.	0.0106	0.0106	0.0072	0.0011
3-Mpentane mole frac.	0.0197	0.0197	0.0133	0.0011
2-Mpentane mole frac.	0.0392	0.0392	0.0266	0.0011
n-Hexane mole frac.	0.0292	0.0292	0.0198	0.0013
n-Heptane mole frac.	0.0510	0.0510	0.0343	0.0011
n-Octane mole frac.	0.2837	0.2837	0.1902	0.0007
n-Nonane mole frac.	0.1857	0.1857	0.1244	0.0003
n-Decane mole frac.	0.1164	0.1164	0.0779	0.0000
n-C11 mole frac.	0.0583	0.0583	0.0390	0.0000
Mycyclopentannmole frac.	0.0588	0.0588	0.0398	0.0000
Cyclohexane mole frac.	0.0038	0.0038	0.0025	0.0000
Mycyclohexanemole frac.	0.0100	0.0100	0.0067	0.0000
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphidemole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac.	0.0035	0.0035	0.0024	0.0000
Toluene mole frac.	0.0121	0.0121	0.0081	0.0000
m-Cresol mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinolne mole frac.	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000
Ammonia mole frac.	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000
H2O mole frac.	0.0002	0.0002	0.0004	0.0000
n-Psychexanemole frac.	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000

Stream	13	15	14	16
Hydrogen mole frac.	0.3038	0.8921	0.8921	0.0134
H2S mole frac	0.0016	0.0021	0.0021	0.0014
Methane mole frac	0.0282	0.0711	0.0711	0.0070
Ethane mole frac.	0.0088	0.0132	0.0132	0.0066
Propane mole frac.	0.0064	0.0046	0.0046	0.0074
i-Butane mole frac	0.0044	0.0016	0.0016	0.0059
n-Butane mole frac	0.0181	0.0049	0.0049	0.0246
i-Pentane mole frac.	0.0088	0.0010	0.0010	0.0126
2,2-Mpropane mole frac.	0.0049	0.0010	0.0010	0.0068
n-Pentane mole frac	0.0220	0.0020	0.0020	0.0319
2,2-Mbutane mole frac.	0.0072	0.0004	0.0004	0.0106
3-Mpentane mole frac	0.0133	0.0005	0.0005	0.0197
2-Mpentane mole frac	0.0266	0.0011	0.0011	0.0392
n-Hexane mole frac.	0.0198	0.0006	0.0006	0.0292
n-Heptane mole frac	0.0343	0.0004	0.0004	0.0510
n-Octane mole frac	0.1902	0.0007	0.0007	0.2837
n-Nonane mole frac	0.1244	0.0002	0.0002	0.1857
n-Decane mole frac.	0.0779	0.0000	0.0000	0.1164
n-C11 mole frac	0.0390	0.0000	0.0000	0.0583
Mcyclopentane mole frac.	0.0398	0.0012	0.0012	0.0588
Cyclohexane mole frac.	0.0025	0.0001	0.0001	0.0038
Mcyclohexane mole frac	0.0067	0.0001	0.0001	0.0100
E-Mercaptan mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac	0.0024	0.0001	0.0001	0.0035
Toluene mole frac.	0.0081	0.0001	0.0001	0.0121
m-Cresol mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac	0.0001	0.0000	0.0000	0.0001
Ammonia mole frac	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
H2O mole frac.	0.0004	0.0008	0.0008	0.0002
n-Psychexane mole frac	0.0001	0.0000	0.0000	0.0001

Stream	55	56	23	7
Hydrogen mole frac	0.0000	0.0000	0.0027	0.2755
H2S mole frac.	0.0000	0.0000	0.0010	0.0016
Methane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0031	0.0248
Ethane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0046	0.0050
Propane mole frac	0.0000	0.0000	0.0062	0.0042
i-Butane mole frac	0.0000	0.0000	0.0053	0.0041
n-Butane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0229	0.0185
i-Pentane mole frac	0.0000	0.0000	0.0122	0.0091
22-Mpropane mole frac	0.0000	0.0000	0.0065	0.0051
n-Pentane mole frac	0.0001	0.0001	0.0312	0.0233
22-Mbutane mole frac.	0.0006	0.0006	0.0105	0.0076
3-Mpentane mole frac	0.0126	0.0126	0.0198	0.0141
2-Mpentane mole frac	0.0100	0.0100	0.0393	0.0282
n-Hexane mole frac.	0.0341	0.0341	0.0294	0.0209
n-Heptane mole frac	0.0614	0.0614	0.0520	0.0363
n-Octane mole frac	0.3416	0.3416	0.2915	0.2018
n-Nonane mole frac	0.2236	0.2236	0.1915	0.1320
n-Decane mole frac.	0.1401	0.1401	0.1203	0.0827
n-C11 mole frac.	0.0702	0.0702	0.0603	0.0414
Mecyclopentanmole frac.	0.0702	0.0702	0.0593	0.0422
Cyclohexane mole frac.	0.0045	0.0045	0.0038	0.0027
Mecyclohexanemole frac.	0.0120	0.0120	0.0102	0.0071
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphidemole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac.	0.0042	0.0042	0.0035	0.0025
Toluene mole frac.	0.0145	0.0145	0.0123	0.0086
m-Cresol mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac	0.0002	0.0002	0.0001	0.0001
Ammonia mole frac	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001
H2O mole frac	0.0000	0.0000	0.0001	0.0004
n-Psychexanemole frac.	0.0002	0.0002	0.0001	0.0001

Stream	18-UNO	19	14-DOS	20
Hydrogen mole frac.	0.0134	0.3134	0.8921	0.3134
H ₂ S mole frac.	0.0014	0.0116	0.0021	0.0116
Methane mole frac.	0.0070	0.1162	0.0711	0.1162
Ethane mole frac.	0.0066	0.0626	0.0132	0.0626
Propane mole frac.	0.0074	0.0404	0.0046	0.0404
i-Butane mole frac.	0.0059	0.0204	0.0016	0.0204
n-Butane mole frac.	0.0246	0.0729	0.0049	0.0729
i-Pentane mole frac.	0.0126	0.0223	0.0010	0.0223
2,2-Mpropane mole frac.	0.0068	0.0165	0.0010	0.0165
n-Pentane mole frac.	0.0319	0.0497	0.0020	0.0497
2,2-Mbutane mole frac.	0.0106	0.0118	0.0004	0.0118
3-Mpentane mole frac.	0.0197	0.0178	0.0005	0.0178
2-Mpentane mole frac.	0.0392	0.0380	0.0011	0.0380
n-Hexane mole frac.	0.0292	0.0239	0.0006	0.0239
n-Heptane mole frac.	0.0510	0.0222	0.0004	0.0222
n-Octane mole frac.	0.2837	0.0652	0.0007	0.0652
n-Nonane mole frac.	0.1857	0.0229	0.0002	0.0229
n-Decane mole frac.	0.1164	0.0077	0.0000	0.0077
n-C ₁₁ mole frac.	0.0583	0.0021	0.0000	0.0021
Methylcyclopentane mole frac.	0.0588	0.0453	0.0012	0.0453
Cyclohexane mole frac.	0.0038	0.0025	0.0001	0.0025
Methylcyclohexane mole frac.	0.0100	0.0041	0.0001	0.0041
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac.	0.0035	0.0027	0.0001	0.0027
Toluene mole frac.	0.0121	0.0047	0.0001	0.0047
m-Cresol mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac.	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
Ammonia mole frac.	0.0001	0.0007	0.0001	0.0007
H ₂ O mole frac.	0.0002	0.0023	0.0008	0.0023
n-Pyridine mole frac.	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000

Stream	25	21	27	14-UNO
Hydrogen mole frac.	0.0022	0.5097	0.0027	0.8921
H ₂ S mole frac.	0.0033	0.0167	0.0010	0.0021
Methane mole frac.	0.0056	0.1860	0.0032	0.0711
Ethane mole frac.	0.0148	0.0927	0.0047	0.0132
Propane mole frac.	0.0259	0.0496	0.0065	0.0046
i-Butane mole frac.	0.0233	0.0185	0.0056	0.0016
n-Butane mole frac.	0.0981	0.0570	0.0239	0.0049
i-Pentane mole frac.	0.0418	0.0100	0.0126	0.0010
2,2-Mpropane mole frac.	0.0254	0.0109	0.0068	0.0010
n-Pentane mole frac.	0.0992	0.0185	0.0322	0.0020
2,2-Mbutane mole frac.	0.0260	0.0029	0.0108	0.0004
3-Mpentane mole frac.	0.0414	0.0030	0.0201	0.0005
2-Mpentane mole frac.	0.0870	0.0071	0.0399	0.0011
n-Hexane mole frac.	0.0566	0.0033	0.0298	0.0006
n-Heptane mole frac.	0.0557	0.0011	0.0521	0.0004
n-Octane mole frac.	0.1668	0.0011	0.2898	0.0007
n-Nonane mole frac.	0.0589	0.0001	0.1897	0.0002
n-Decane mole frac.	0.0200	0.0000	0.1189	0.0000
n-C ₁₁ mole frac.	0.0055	0.0000	0.0595	0.0000
Methylcyclopentane mole frac.	0.1073	0.0062	0.0599	0.0012
Cyclohexane mole frac.	0.0061	0.0003	0.0038	0.0001
Methylcyclohexane mole frac.	0.0104	0.0002	0.0102	0.0001
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac.	0.0064	0.0003	0.0036	0.0001
Toluene mole frac.	0.0119	0.0002	0.0123	0.0001
m-Cresol mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac.	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000
Ammonia mole frac.	0.0003	0.0009	0.0001	0.0001
H ₂ O mole frac.	0.0003	0.0035	0.0001	0.0008
n-Pyridine mole frac.	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000

Stream	24	26	GAS-AMRGO	37
Hydrogen mole frac	0.0027	0.0022	0.4088	0.0042
H2S mole frac.	0.0010	0.0033	0.0232	0.0158
Methane mole frac	0.0031	0.0056	0.1923	0.0205
Ethane mole frac.	0.0046	0.0148	0.1202	0.0690
Propane mole frac.	0.0062	0.0259	0.0722	0.1297
i-Butane mole frac.	0.0053	0.0233	0.0302	0.1253
n-Butane mole frac	0.0229	0.0981	0.0970	0.5403
i-Pentane mole frac.	0.0122	0.0418	0.0066	0.0017
22-Mpropane mole frac.	0.0065	0.0254	0.0148	0.0899
n-Pentane mole frac	0.0312	0.0992	0.0121	0.0010
22-Mbutane mole frac.	0.0105	0.0260	0.0019	0.0000
3-Mpentane mole frac	0.0198	0.0414	0.0020	0.0000
2-Mpentane mole frac	0.0393	0.0870	0.0046	0.0000
n-Hexane mole frac	0.0294	0.0566	0.0022	0.0000
n-Heptane mole frac	0.0520	0.0557	0.0007	0.0000
n-Octane mole frac	0.2915	0.1668	0.0007	0.0000
n-Nonane mole frac	0.1915	0.0589	0.0001	0.0000
n-Decane mole frac	0.1203	0.0200	0.0000	0.0000
n-C11 mole frac.	0.0603	0.0055	0.0000	0.0000
Mcyclopentanmole frac.	0.0593	0.1073	0.0040	0.0000
Cyclohexane mole frac	0.0038	0.0061	0.0002	0.0000
Mcyclohexanemole frac	0.0102	0.0104	0.0001	0.0000
E-Mercaptan mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphidemole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac	0.0035	0.0064	0.0002	0.0000
Toluene mole frac	0.0123	0.0119	0.0001	0.0000
m-Cresol mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac.	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
Ammonia mole frac	0.0001	0.0003	0.0013	0.0014
H2O mole frac	0.0001	0.0003	0.0043	0.0011
n-Pcyhexanemole frac.	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000

Stream	30	40	38	41
Hydrogen mole frac	0.2196	0.0000	0.0042	0.0000
H2S mole frac	0.0353	0.0000	0.0158	0.0000
Methane mole frac.	0.2043	0.0000	0.0205	0.0000
Ethane mole frac.	0.1718	0.0000	0.0690	0.0000
Propane mole frac.	0.1146	0.0000	0.1297	0.0000
i-Butane mole frac.	0.0521	0.0000	0.1253	0.0000
n-Butane mole frac.	0.1721	0.0006	0.5403	0.0006
i-Pentane mole frac.	0.0003	0.0132	0.0017	0.0132
22-Mpropane mole frac.	0.0220	0.0031	0.0899	0.0031
n-Pentane mole frac	0.0001	0.0339	0.0010	0.0339
22-Mbutane mole frac	0.0000	0.0113	0.0000	0.0113
3-Mpentane mole frac.	0.0000	0.0211	0.0000	0.0211
2-Mpentane mole frac	0.0000	0.0421	0.0000	0.0421
n-Hexane mole frac	0.0000	0.0314	0.0000	0.0314
n-Heptane mole frac	0.0000	0.0549	0.0000	0.0549
n-Octane mole frac	0.0000	0.3054	0.0000	0.3054
n-Nonane mole frac	0.0000	0.2000	0.0000	0.2000
n-Decane mole frac	0.0000	0.1253	0.0000	0.1253
n-C11 mole frac	0.0000	0.0627	0.0000	0.0627
Mcyclopentanmole frac	0.0000	0.0632	0.0000	0.0632
Cyclohexane mole frac	0.0000	0.0041	0.0000	0.0041
Mcyclohexanemole frac	0.0000	0.0107	0.0000	0.0107
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphidemole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac	0.0000	0.0037	0.0000	0.0037
Toluene mole frac	0.0000	0.0130	0.0000	0.0130
m-Cresol mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac.	0.0000	0.0002	0.0000	0.0002
Ammonia mole frac	0.0020	0.0000	0.0014	0.0000
H2O mole frac.	0.0059	0.0000	0.0011	0.0000
n-Psychexanemole frac	0.0000	0.0002	0.0000	0.0002

Stream	46	50	52	LPG
Hydrogen mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0042
H ₂ S mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0158
Methane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0205
Ethane mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0690
Propane mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.1297
i-Butane mole frac.	0.0002	0.0000	0.0000	0.1253
n-Butane mole frac	0.0057	0.0000	0.0000	0.5403
i-Pentane mole frac	0.1250	0.0000	0.0000	0.0017
2,2-Mpropane mole frac	0.0293	0.0000	0.0000	0.0899
n-Pentane mole frac.	0.3191	0.0001	0.0001	0.0010
2,2-Mbutane mole frac.	0.1017	0.0006	0.0006	0.0000
3-Mpentane mole frac.	0.0934	0.0126	0.0126	0.0000
2-Mpentane mole frac	0.3132	0.0100	0.0100	0.0000
n-Hexane mole frac	0.0086	0.0341	0.0341	0.0000
n-Heptane mole frac	0.0000	0.0614	0.0614	0.0000
n-Octane mole frac	0.0000	0.3416	0.3416	0.0000
n-Nonane mole frac.	0.0000	0.2236	0.2236	0.0000
n-Decane mole frac	0.0000	0.1401	0.1401	0.0000
n-C11 mole frac	0.0000	0.0702	0.0702	0.0000
Methylcyclopentanemole frac	0.0036	0.0702	0.0702	0.0000
Cyclohexane mole frac.	0.0000	0.0045	0.0045	0.0000
Methylcyclohexanemole frac	0.0000	0.0120	0.0120	0.0000
E-Mercaptan mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphidemole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac	0.0002	0.0042	0.0042	0.0000
Toluene mole frac	0.0000	0.0145	0.0145	0.0000
m-Cresol mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac	0.0000	0.0002	0.0002	0.0000
Ammonia mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0014
H ₂ O mole frac	0.0000	0.0000	0.0000	0.0011
n-Pyridinemole frac.	0.0000	0.0002	0.0002	0.0000

Stream	54	51	53
Hydrogen mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
H2S mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
Methane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
Propane mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
i-Butane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
i-Pentane mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
22-Mpropane mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane mole frac	0.0001	0.0001	0.0001
22-Mbutane mole frac	0.0006	0.0006	0.0006
3-Mpentane mole frac.	0.0126	0.0126	0.0126
2-Mpentane mole frac	0.0100	0.0100	0.0100
n-Hexane mole frac	0.0341	0.0341	0.0341
n-Heptane mole frac	0.0614	0.0614	0.0614
n-Octane mole frac	0.3416	0.3416	0.3416
n-Nonane mole frac	0.2236	0.2236	0.2236
n-Decane mole frac	0.1401	0.1401	0.1401
n-C11 mole frac.	0.0702	0.0702	0.0702
Mycyclopentanmole frac.	0.0702	0.0702	0.0702
Cyclohexane mole frac	0.0045	0.0045	0.0045
Mycyclohexanemole frac.	0.0120	0.0120	0.0120
E-Mercaptan mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
M-E-Sulfide mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
diE-Sulphidemole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
Thiophene mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
Benzene mole frac.	0.0042	0.0042	0.0042
Toluene mole frac	0.0145	0.0145	0.0145
m-Cresol mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000
Quinoline mole frac	0.0002	0.0002	0.0002
Ammonia mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
H2O mole frac	0.0000	0.0000	0.0000
n-Psychexanemole frac.	0.0002	0.0002	0.0002

**** THREE PHASES WERE DETECTED IN THE TOP OF THE TOWER ****

**** Products ****

Leaving from stage Product Phase Assigned to Stream Name	1 Vapour 30	1 Liquid 37	29 Liquid 40
Temperature - F	110.20	110.20	501.21
Pressure - psig	235.00	235.00	244.00
Hydrogen - lbmole/hr	8.785	0.577	0.000
H2S - lbmole/hr	1.412	2.168	6.03E-07
Methane - lbmole/hr	8.172	2.814	1.02E-10
Ethane - lbmole/hr	6.870	9.477	7.20E-07
Propane - lbmole/hr	4.585	17.827	5.69E-04
1-Butane - lbmole/hr	2.083	17.212	0.074
n-Butane - lbmole/hr	6.884	74.236	2.002
1-Pentane - lbmole/hr	0.010	0.238	43.624
2,2-Mpropane - lbmole/hr	0.880	12.356	10.209
n-Pentane - lbmole/hr	0.005	0.137	111.564
2,2-Mbutane - lbmole/hr	7.53E-06	3.13E-04	37.343
3-Mpentane - lbmole/hr	3.82E-07	2.36E-05	69.629
2-Mpentane - lbmole/hr	1.79E-06	1.01E-04	138.642
n-Hexane - lbmole/hr	7.95E-08	6.40E-06	103.430
n-Heptane - lbmole/hr	0.000	9.56E-09	180.818
n-Octane - lbmole/hr	0.000	0.000	1006.540
n-Nonane - lbmole/hr	0.000	0.000	658.918
n-Decane - lbmole/hr	0.000	0.000	412.888
n-C11 - lbmole/hr	0.000	0.000	206.716
Mycyclopentan - lbmole/hr	1.63E-07	1.20E-05	208.102
Cyclohexane - lbmole/hr	1.57E-09	1.38E-07	13.352
Mycyclohexane - lbmole/hr	0.000	1.19E-09	35.301
E-Mercaptan - lbmole/hr	1.46E-04	0.002	0.001
M-E-Sulfide - lbmole/hr	0.000	4.27E-09	0.008
diE-Sulphide - lbmole/hr	0.000	0.000	5.95E-04
Thiophene - lbmole/hr	0.000	1.23E-09	0.013
Benzene - lbmole/hr	1.21E-08	9.05E-07	12.336
Toluene - lbmole/hr	0.000	5.41E-10	42.789
m-Cresol - lbmole/hr	0.000	0.000	0.000
Quinoline - lbmole/hr	0.000	0.000	0.499
Ammonia - lbmole/hr	0.078	0.197	2.03E-07
H2O - lbmole/hr	0.234	0.158	1.50E-09
n-Pychehexane - lbmole/hr	0.000	0.000	0.499
Total Flow - lbmole/hr	40.00	137.40	3295.30

TABLA 11.4

**** THREE PHASES WERE DETECTED IN THE TOP OF THE TOWER ****

**** Stage Variables ****

Reflux Ratio 6.00002

Stg No	Press psig	Temp F	Flow Rates (lbmole/hr)				Duty MMBtu/hr
			Liquid	Vapour	Feed	Draws	
1	235.0	110.2	1064.4			40.0 V 137.4 L	-10 898
2	235.3	197.1	1449.4	1241.8			
3	235.6	211.9	1523.6	1626.8			
4	236.0	217.7	1545.3	1701.0			
5	236.3	221.0	1552.0	1722.7			
6	236.6	223.5	1552.6	1729.4			
7	236.9	226.0	1549.2	1730.0			
8	237.2	228.6	1541.7	1726.6			
9	237.6	231.6	1528.5	1719.1			
10	237.9	235.4	1506.4	1705.9			
11	238.2	240.3	1468.0	1683.8			
12	238.5	247.4	1392.0	1645.4			
13	238.9	259.5	1216.7	1569.4			
14	239.2	286.0	895.1	1394.1			
15	239.5	347.3	7414.1	1072.5	3472.7		
16	239.8	356.0	7820.3	4118.8			
17	240.1	362.2	8055.1	4525.0			
18	240.5	367.7	8250.0	4759.8			
19	240.8	373.2	8422.0	4954.7			
20	241.1	378.7	8592.7	5126.7			
21	241.4	384.4	8758.8	5297.4			
22	241.8	390.6	8911.6	5463.5			
23	242.1	397.6	9067.8	5616.4			
24	242.4	405.8	9221.0	5772.5			
25	242.7	416.2	9373.8	5925.7			
26	243.0	429.7	9537.3	6078.5			
27	243.4	447.6	9717.7	6242.0			
28	243.7	471.2	9972.6	6422.4			
29	244.0	501.2		6677.3		3295.3 L	72.860

TABLA 11.5

**** Products ****

Leaving from stage Product Phase Assigned to Stream Name	1 Liquid 46	33 Liquid 50
Temperature - F	117.72	332.35
Pressure - psig	2.60	31.00
Hydrogen - Mole Frac	0.000000	0.000000
H2S - Mole Frac	1.73E-09	0.000000
Methane - Mole Frac	0.000000	0.000000
Ethane - Mole Frac	2.06E-09	0.000000
Propane - Mole Frac	1.63E-06	0.000000
1-Butane - Mole Frac	0.000214	0.000000
n-Butane - Mole Frac	0.005740	3.90E-09
1-Pentane - Mole Frac	0.124972	0.000011
2-Mpropane - Mole Frac	0.029268	1.39E-07
n-Pentane - Mole Frac	0.319075	0.000092
2-Mbutane - Mole Frac	0.101734	0.000630
3-Mpentane - Mole Frac	0.093448	0.012569
2-Mpentane - Mole Frac	0.313159	0.009982
n-Hexane - Mole Frac	0.008576	0.034087
n-Heptane - Mole Frac	0.000000	0.061367
n-Octane - Mole Frac	0.000000	0.341606
n-Nonane - Mole Frac	0.000000	0.223627
n-Decane - Mole Frac	0.000000	0.140128
n-C11 - Mole Frac	0.000000	0.070157
Mycyclopentan - Mole Frac	0.003639	0.070196
Cyclohexane - Mole Frac	1.63E-06	0.004531
Mycyclohexane - Mole Frac	0.000000	0.011981
E-Mercaptan - Mole Frac	3.01E-06	0.000000
M-E-Sulfide - Mole Frac	0.000011	1.54E-06
diE-Sulphide - Mole Frac	0.000000	2.02E-07
Thiophene - Mole Frac	1.59E-07	4.53E-06
Benzene - Mole Frac	0.000158	0.004168
Toluene - Mole Frac	0.000000	0.014522
m-Cresol - Mole Frac	0.000000	0.000000
Quinoline - Mole Frac	0.000000	0.000169
Ammonia - Mole Frac	5.82E-10	0.000000
H2O - Mole Frac	0.000000	0.000000
n-Pychexane - Mole Frac	0.000000	0.000169
Total Flow - lbmole/hr	348.80	2946.50

TABLA 11.6

**** Stage Variables ****

Reflux Ratio 15.00000

Stg No	Press psig	Temp F	Flow Rates (lbmole/hr)		Duty MMBtu/hr
			Liquid	Vapour	
1	2.6	117.7	5232.0		0.0 V 348.8 L -67.071
2	3.5	133.1	5185.7	5580.8	
3	4.4	144.5	5182.7	5534.5	
4	5.3	152.4	5194.5	5531.5	
5	6.1	158.0	5208.1	5543.3	
6	7.0	162.3	5220.5	5556.9	
7	7.9	165.9	5231.5	5569.3	
8	8.8	169.1	5241.3	5580.3	
9	9.7	172.0	5250.2	5590.1	
10	10.6	174.9	5258.3	5599.0	
11	11.5	177.7	5265.6	5607.1	
12	12.4	180.4	5272.2	5614.4	
13	13.2	183.1	5278.0	5621.0	
14	14.1	185.8	5283.2	5626.8	
15	15.0	188.5	5287.8	5632.0	
16	15.9	191.2	5291.7	5636.6	
17	16.8	193.9	5295.0	5640.5	
18	17.7	196.6	5297.3	5643.8	
19	18.6	199.2	5297.9	5646.1	
20	19.5	202.0	5294.0	5646.7	
21	20.3	205.0	5276.5	5642.8	
22	21.2	208.6	5211.9	5625.3	
23	22.1	214.6	4979.0	5560.7	
24	23.0	229.5	4322.0	5327.8	
25	23.9	269.6	4987.8	4670.8	3295.3
26	24.8	272.4	5040.3	2041.3	
27	25.7	274.9	5086.7	2093.8	
28	26.6	277.5	5129.1	2140.2	
29	27.4	280.7	5168.0	2182.6	
30	28.3	285.2	5202.4	2221.5	
31	29.2	292.7	5228.5	2255.9	
32	30.1	306.4	5231.9	2282.0	
33	31.0	332.4		2285.4	2946.5 L 38.643

TABLA 11.7

Resultados de las corrientes más importantes cuando la conc De azufre a la entrada es de 1200 ppm

Tabla 11.8

Stream	1-uno	2-uno	6-uno	7
Description				
Vapour frac	0	0	1	1
Temperature F	100	120	665	695.3806
Pressure psig	40	40	402	377.004
Molar Flow lbmole/hr	3378.3999	46.5	5147.8998	4993.0293
Mass Flow lb/hr	379968.9415	5244.9652	393491.75	393367.05
Liq Vol Flow barrel/day	36614.486	505.2636	41016.58	40782.385
Density lb/ft ³	43.5131	42.9362	2.9712	2.7719
Mole Wt	112.4701	112.7949	76.4373	78.7832
Hydrogen mole frac	0	0	0.2986	0.2754
H ₂ S mole frac	0	0.0058	0.0008	0.002
Methane mole frac	0	0	0.0239	0.0249
Ethane mole frac	0	0	0.0044	0.0052
Propane mole frac	0.0038	0.0006	0.004	0.0041
i-Butane mole frac	0.0052	0.0019	0.004	0.0041
n-Butane mole frac	0.0241	0.0165	0.0176	0.0185
i-Pentane mole frac	0.0127	0.008	0.0088	0.009
2,2-Mpropane mole frac	0.0068	0.008	0.0049	0.005
n-Pentane mole frac	0.0327	0.035	0.0225	0.0232
2,2-Mbutane mole frac	0.0107	0.025	0.0074	0.0076
i-Mipentane mole frac	0.0201	0.02	0.0136	0.014
i-Mpentane mole frac	0.0403	0.0412	0.0272	0.028
n-Hexane mole frac	0.03	0.0303	0.0202	0.0208
n-Heptane mole frac	0.0524	0.0527	0.035	0.0361
n-Octane mole frac	0.2973	0.296	0.198	0.2042
n-Nonane mole frac	0.1913	0.192	0.1273	0.1313
n-Decane mole frac	0.1198	0.1214	0.0798	0.0822
n-Undecane mole frac	0.0599	0.0608	0.0399	0.0411
Methylcyclopentane mole frac	0.0605	0.0579	0.0407	0.0419
Cyclohexane mole frac	0	0	0	0.0027
Methylcyclohexane mole frac	0	0	0	0.007
Di-Mercaptan mole frac	0.0005	0.0002	0.0004	0
Di-E-Sulfide mole frac	0.0004	0.0001	0.0003	0
Di-I-Sulphidemole frac	0.0002	0.0002	0.0002	0
Diphenylene mole frac	0.0005	0.0001	0.0004	0
Benzene mole frac	0.0076	0.0053	0.005	0.0025
Toluene mole frac	0.0224	0.0204	0.0149	0.0085
o-Cresol mole frac	0.0002	0.0002	0.0001	0
Quinolene mole frac	0.0004	0.0004	0.0003	0.0001
Ammonia mole frac	0	0	0	0.0001
H ₂ O mole frac	0	0	0.0003	0.0004
i-Perhexanemole frac	0	0	0	0.0001

Stream	GAS-AMRGO	LPG	53	56
Description				
Vapour frac.	1	0	0	0
Temperature F	96.5719	100	100	237.8001
Pressure psig	79	280.304	50	315
Molar Flow lbmole/hr	115.422	137.4002	214.906	2729.9999
Mass Flow lb/hr	2642.7855	7414.7916	25544.33	324495.49
Liq Vol Flow barrel/day	462.2149	911.4764	2433.2191	30909.74
Density lb/ft ³	0.3674	33.4528	43.9865	40.0886
Mole Wt	22.8967	53.9649	118.8628	118.8628
Hydrogen mole frac.	0.4066	0.0041	0	0
H ₂ S mole frac.	0.0271	0.0186	0	0
Methane mole frac.	0.1921	0.0205	0	0
Ethane mole frac.	0.1221	0.0705	0	0
Propane mole frac.	0.0707	0.128	0	0
i-Butane mole frac.	0.0299	0.1254	0	0
n-Butane mole frac.	0.096	0.5405	0	0
i-Pentane mole frac.	0.0066	0.0016	0	0
2,2-Mpropane mole frac.	0.0143	0.0872	0	0
n-Pentane mole frac.	0.0122	0.001	0.0001	0.0001
2,2-Mbutane mole frac.	0.0019	0	0.0006	0.0006
3-Mpentane mole frac.	0.0019	0	0.0123	0.0123
2-Mpentane mole frac.	0.0046	0	0.0097	0.0097
n-Hexane mole frac.	0.0022	0	0.0339	0.0339
n-Heptane mole frac.	0.0007	0	0.0611	0.0611
n-Octane mole frac.	0.0008	0	0.3458	0.3458
n-Nonane mole frac.	0.0001	0	0.2225	0.2225
n-Decane mole frac.	0	0	0.1393	0.1393
n-C11 mole frac.	0	0	0.0697	0.0697
Mecyclopentanmole frac.	0.004	0	0.0697	0.0697
Cyclohexane mole frac.	0.0002	0	0.0045	0.0045
Mcyclohexanemole frac.	0.0001	0	0.0118	0.0118
E-Mercaptan mole frac.	0	0	0	0
M-E-Sulfide mole frac.	0	0	0	0
diE-Sulphidemole frac.	0	0	0	0
Thiophene mole frac.	0	0	0	0
Benzene mole frac.	0.0002	0	0.0042	0.0042
Toluene mole frac.	0.0001	0	0.0144	0.0144
m-Cresol mole frac.	0	0	0	0
Quinoline mole frac.	0	0	0.0002	0.0002
Ammonia mole frac.	0.0013	0.0014	0	0
H ₂ O mole frac.	0.0043	0.0011	0	0
n-Psychexanemole frac.	0	0	0.0002	0.0002

Resultados de las corrientes mas importantes cuando la conc. De azufre a la entrada es de 600 ppm

Tabla 11.9

Stream	1-uno	2-uno	6-uno	7
Description				
Vapour frac	0	0	1	1
Temperature F	100	120	665	695 3866
Pressure psig	40	40	402	377 004
Molar Flow lbmole/hr	3378 3999	46 5	5147 8998	4993 4604
Mass Flow lb/hr	380078.0348	5245.04	393600.88	393575 8
LiqVol Flow barrel/dav	36627 2859	505.28	41029 396	40798.144
Density lb/ft3	43.5102	42.9353	2 9723	2 7734
Mole Wt.	112 5024	112.797	76 4585	78 8182
Hydrogen mole frac	0	0	0 2986	0.276
H2S mole frac	0	0 0058	0.0008	0.0014
Methane mole frac.	0	0	0 0239	0 0247
Ethane mole frac.	0	0	0 0044	0 0047
Propane mole frac	0.0038	0.0006	0 004	0 0042
i-Butane mole frac	0 0052	0.0019	0 004	0 0041
n-Butane mole frac	0 0242	0 0165	0 0177	0 0185
i-Pentane mole frac	0 0128	0 008	0 0088	0 0091
2-Mpropane mole frac.	0.0069	0 008	0.0049	0.0051
n-Pentane mole frac	0 0329	0.035	0.0226	0 0233
2-Mbutane mole frac	0 0107	0.025	0 0074	0 0076
3-Mpentane mole frac.	0 0203	0 02	0 0136	0.0141
2-Mpentane mole frac.	0.0405	0 0412	0.0273	0.0282
n-Hexane mole frac	0 0302	0 0304	0 0203	0 0209
n-Heptane mole frac	0 0527	0 0527	0 0352	0 0363
n-Octane mole frac	0.2939	0 2961	0 1958	0 2018
n-Nonane mole frac	0 1924	0 192	0.1281	0 132
n-Decane mole frac	0 1207	0 1214	0 0803	0 0828
n-C11 mole frac	0 0603	0 0608	0 0401	0 0414
Myclopentanmole frac.	0.0609	0.0579	0 0409	0.0422
Cyclohexane mole frac	0	0	0	0 0027
Myclohexanemole frac	0	0	0	0 0071
E-Mercaptan mole frac	0 0002	0 0002	0 0001	0
M-E-Sulfide mole frac	0.0001	0 0001	0 0001	0
diE-Sulphidemole frac.	0 0001	0 0001	0 0001	0
Thiophene mole frac.	0 0004	0.0001	0.0003	0
Benzene mole frac	0 0076	0 0053	0.0051	0.0025
Toluene mole frac	0 0225	0 0204	0.015	0 0086
m-Cresol mole frac	0.0002	0 0002	0 0001	0
Quinoline mole frac	0 0004	0.0004	0 0003	0 0001
Ammonia mole frac	0	0	0	0 0001
H2O mole frac.	0	0	0.0003	0 0004

Stream	GAS-AMRGO	LPG	53	56
Description				
Vapour frac.	1	0	0	0
Temperature F	97.1027	100	100	237.547
Pressure psig	79	280.304	50	315
Molar Flow lbmole/hr	114.9439	137.397	216.6846	2729.9999
Mass Flow lb/hr	2631.9536	7431.4	25757.724	324520.5
LiqVol Flow barrel/day	460.9034	913.482	2453.2987	30909.01
Density lb/ft3	0.3671	33.4497	43.9913	40.1012
Mole Wt.	22.8977	54.0872	118.872	118.872
Hydrogen mole frac	0.4088	0.0042	0	0
H2S mole frac.	0.0232	0.0158	0	0
Methane mole frac	0.1923	0.0205	0	0
Ethane mole frac	0.1202	0.069	0	0
Propane mole frac.	0.0722	0.1297	0	0
i-Butane mole frac	0.0302	0.1253	0	0
n-Butane mole frac.	0.097	0.5403	0	0
i-Pentane mole frac.	0.0066	0.0017	0	0
2-Mpropane mole frac	0.0148	0.0899	0	0
n-Pentane mole frac	0.0121	0.001	0.0001	0.0001
2-Mbutane mole frac	0.0019	0	0.0006	0.0006
3-Mpentane mole frac.	0.002	0	0.0126	0.0126
2-Mpentane mole frac	0.0046	0	0.01	0.01
n-Hexane mole frac.	0.0022	0	0.0341	0.0341
n-Heptane mole frac	0.0007	0	0.0614	0.0614
n-Octane mole frac	0.0007	0	0.3416	0.3416
n-Nonane mole frac.	0.0001	0	0.2236	0.2236
n-Decane mole frac.	0	0	0.1401	0.1401
n-Cl1 mole frac	0	0	0.0702	0.0702
Mecyclopentanmole frac	0.004	0	0.0702	0.0702
Cyclohexane mole frac.	0.0002	0	0.0045	0.0045
Mecyclohexanemole frac	0.0001	0	0.012	0.012
E-Mercaptan mole frac	0	0	0	0
M-E-Sulfide mole frac	0	0	0	0
dE-Sulphidemole frac.	0	0	0	0
Thiophene mole frac	0	0	0	0
Benzene mole frac	0.0002	0	0.0042	0.0042
Toluene mole frac	0.0001	0	0.0145	0.0145
m-Cresol mole frac.	0	0	0	0
Quinoline mole frac	0	0	0.0002	0.0002
Ammonia mole frac.	0.0013	0.0014	0	0
H2O mole frac	0.0043	0.0011	0	0
n-Pyechexanemole frac	0	0	0.0002	0.0002

11.1 VALIDACIÓN DE RESULTADOS

Una vez terminada la simulación de toda la planta el objetivo es verificar los resultados obtenidos con los de obtenidos en planta y reportados en Julio de 1989, por PEMEX. Primeramente se obtuvo el error en las propiedades más importantes de las corrientes, tabla 11 10, como son fracción vapor, flujo molar y másico, temperatura, presión, peso molecular y densidad, es importante aclarar que no se validaron todas las corrientes, solo aquellas más importantes

Posteriormente en la tabla 11 11 se validan las composiciones de ciertas corrientes tales como, entradas, entradas y salidas del reactor, recirculación de hidrógeno y la fase líquida de entrada a la sección de estabilización. Para que dicha comparación se cuantificara por medio de un error dado en por ciento. Los compuestos que se manejaron para la comparación fueron, Hidrogeno, Ácido Sulfhídrico, Metano, Etano, Propano, 1-Butano, n-Butano, i-Pentano, n-Pentano, i-Hexano, así como n-Hexano más pesados, y las ppm de azufre

De esta forma se podrán validar los resultados obtenidos a partir de nuestra simulación, y concluir acerca de estos

VALIDACIÓN DE RESULTADOS
COMPARACIÓN DE CORRIENTES SIMULADAS VS DISEÑADAS

Tabla 11.10

Stream Name	1-UNO SIMUL	Corr. De PFD #1	% de error
Vapour Frac	0	0	0.0
Temperature F	100	100	0.0
Pressure psig	40	40	0.0
Flow lbmole/hr	3378.3999	3378.4	0.0
Mass Flow lb/hr	3.80E+05	381041	0.3
LiqVol Flow barrel/day	36619.8398	-	-
Mole Weight	112.4821	112.79	0.3
Mass Density lb/ft ³	43.5115	44.033	1.2

Stream Name	2-UNO	Corr. De PFD #2	% de error
Vapour Frac	0	0	0.0
Temperature F	120	120	0.0
Pressure psig	40	40	0.0
Flow lbmole/hr	46.5	46.5	0.0
Mass Flow lb/hr	5223.8789	5413	3.5
LiqVol Flow barrel/day	502.2663	-	-
Mole Weight	112.3415	116.4	3.5
Mass Density lb/ft ³	43.0607	44.5	3.2

Stream Name	2 SIMULADA	Corr. De PFD #3	% de error
Vapour Frac	0	0	0.0
Temperature F	102.7001	100	2.7
Pressure psig	541	541	0.0
Flow lbmole/hr	3424.8999	3452.9	0.8
Mass Flow lb/hr	3.85E+05	386454	0.4
LiqVol Flow barrel/day	37122.1055	-	-
Mole Weight	112.4802	112.57	0.1
Mass Density lb/ft ³	43.7515	44.086	0.8

Stream Name	3 SIMULADA	Corr. De PFD #4	% de error
Vapour_Frac	0.3081	0.4322	0.0
Temperature F	109.3161	107	2.2
Pressure psig	504	496	1.6
Flow lbmole/hr	5147.8999	5157.1	0.2
Mass Flow lb/hr	3.94E+05	395431.68	0.4
Liq Vol Flow barrel/day	41018.9336		-
Mole Weight	76.4411	76.68	0.3
Mass Density lb/ft3	14.0921	-	-

Stream Name	7 SIMULADA	Corr. De PFD #5	% de error
Vapour_Frac	1	1	0.0
Temperature F	695.3868	680	2.3
Pressure psig	377.004	377	0.0
Flow lbmole/hr	4993.48	4975	0.4
Mass Flow lb/hr	3.94E+05	395422	0.4
Liq Vol Flow barrel/day	40797.7852		-
Mole Weight	78.8167	79.48	0.8
Mass Density lb/ft3	2.7734	2.73	1.6

Stream Name	15	Corr. De PFD #10	% de error
Vapour_Frac	1	1	0.0
Temperature F	210.2786	230	8.6
Pressure psig	504	504	0.0
Flow lbmole/hr	1723	1723	0.0
Mass Flow lb/hr	8281.6123	8964	7.6
Liq Vol Flow barrel/day	3897.5217		-
Mole Weight	4.8065	5.19	7.4
Mass Density lb/ft3	0.3472	0.368	5.7

Stream Name	16 SIMULADA	Corr. De PFD #8	% de error
Vapour_Frac	0	0	0.0
Temperature F	110	110	0.0
Pressure psig	324 004	324	0.0
Flow lbmole/hr	3547 6406	3557.7	0.3
Mass Flow lb/hr	3.88E+05	389292	0.3
LiqVol Flow barrel/day	37679 9258		-
Mole Weight	109.3706	109.43	0.1
Mass Density lb/ft3	43 0332	44.283	-

Stream Name	24 SIMULADA	Corr De PFD #12	% de error
Vapour_Frac	0	0	0.0
Temperature F	279 0502	290	3.8
Pressure psig	250	250	0.0
Flow lbmole/hr	3425.429	3306.46	3.6
Mass Flow lb/hr	3 82E+05	374960	1.9
LiqVol Flow barrel/day	36988 0859		-
Mole Weight	111 652	113.41	1.6
Mass Density lb/ft3	37 794	38 92	-

Stream Name	40 SIMULADA	Corr De PFD #19	% de error
Vapour_Frac	0	0	0.0
Temperature F	501.2051	464	8.0
Pressure psig	244	244	0.0
Flow lbmole/hr	3295.2981	3268.36	0.8
Mass Flow lb/hr	3 78E+05	378172	0.0
LiqVol Flow barrel/day	36305.5273		-
Mole Weight	114 6919	115.71	0.9
Mass Density lb/ft3	27.5414	30.1	8.5

Stream Name	46 SIMULADA	Corr De PFD #24	% de error
Vapour_Frac	0	0	0.0
Temperature F	175	175	0.0
Pressure psig	2.6	2.6	0.0
Flow lbmole/hr	348.8001	330.12	5.7
Mass Flow lb/hr	27681.7754	26090	6.1
Liq Vol Flow barrel/day	2944.8765		-
Mole Weight	79.3629	78.87	0.6
Mass Density lb/ft ³	38.35	34.6	10.8

Stream Name	56 SIMULADA	Corr De PFD #22	% de error
Vapour_Frac	0	0	0.0
Temperature F	220	200	10.0
Pressure psig	315	315	0.0
Flow lbmole/hr	2730	2730	0.0
Mass Flow lb/hr	3.25E+05	327581	0.8
Liq Vol Flow barrel/day	30909.4297		-
Mole Weight	118.8741	119.84	0.8
Mass Density lb/ft ³	40.1005	41.45	3.3

**RESULTADO DE CONCENTRACIONES EN LA SIMULACIÓN
COMPARACIÓN CON LOS DATOS DE DISEÑO**

Stream	1-UNO	1-diseño	% Error	2-uno	2-diseño	% Error
Hydrogen mole frac.	0.0000	0	0.00	0.0000	0	0
H2S mole frac.	0.0000	0	0.00	0.0058	0.0058	0
Methane mole frac.	0.0000	0	0.00	0.0000	0	0
Ethane mole frac.	0.0000	0	0.00	0.0000	0	0
Propane mole frac.	0.0028	0.00272	2.94	0.0006	0.00065	7.69
i-Butane mole frac.	0.0052	0.00532	2.26	0.0019	0.00194	2.06
n-Butane mole frac.	0.0242	0.02349	3.02	0.0165	0.01763	6.41
i-Pentane mole frac.	0.0197	0.01965	0.25	0.016	0.0163	1.84
n-Pentane mole frac.	0.0329	0.03311	0.63	0.0205	0.02043	0.34
i-Hexane mole frac.	0.0715	0.07131	0.27	0.026	0.02667	2.51
n-Hex + Pesados	0.8413	0.8444	0.37	0.91	0.91075	0.08
Azufre ppm	800	800	0.00	400	400	0
Nitrogeno ppm	500	-	-	500	-	-
Oxigeno ppm	200	-	-	200	-	-

Stream	6-UNO	4-diseño	% Error	11	6-diseño	% Error
Hydrogen mole frac.	0.2986	0.2958	0.95	0.7666	0.76734	0.10
H2S mole frac.	0.0008	0.00086	6.98	0.0000	0	0.00
Methane mole frac.	0.0239	0.0245	2.45	0.0838	0.0835	0.36
Ethane mole frac.	0.0044	0.0048	8.33	0.0703	0.07036	0.09
Propane mole frac.	0.0040	0.0037	8.11	0.0432	0.0431	0.23
i-Butane mole frac.	0.0040	0.0042	4.76	0.0100	0.00979	2.15
n-Butane mole frac.	0.0177	0.0172	2.91	0.0116	0.01164	0.34
i-Pentane mole frac.	0.0137	0.0136	0.74	0.0051	0.00503	1.39
n-Pentane mole frac.	0.0226	0.0243	7.00	0.0027	0.00267	1.12
i-Hexane mole frac.	0.0483	0.0476	1.47	0.0033	0.00323	2.17
n-Hex + Pesados	0.5609	0.5631	0.39	0.0034	0.00323	5.26
Azufre ppm	780	782	0.26	-	-	0.00
Nitrogeno ppm	450	-	-	-	-	-
Oxigeno ppm	190	-	-	-	-	-

TABLA 11.11

Stream	7	5-diseño	% Error	15	10	% Error
Hydrogen mole frac	0.2755	0.27089	1.70	0.8921	0.88548	0.75
H2S mole frac.	0.0016	0.00173	7.51	0.0021	0.00415	0.00
Methane mole frac.	0.0248	0.0247	0.40	0.0711	0.06882	3.31
Ethane mole frac	0.0050	0.00503	0.60	0.0132	0.0137	3.65
Propane mole frac	0.0042	0.00457	8.10	0.0046	0.00482	4.56
i-Butane mole frac	0.0041	0.00454	9.69	0.0016	0.00171	6.43
n-Butane mole frac	0.0185	0.01897	2.48	0.0049	0.00502	2.39
i-Pentane mole frac	0.0142	0.01543	7.97	0.002	0.00189	5.82
n-Pentane mole frac	0.0233	0.02442	4.59	0.0020	0.002039	1.91
i-Hexane mole frac	0.0499	0.04939	1.03	0.002	0.00207	3.38
n-Hex + Pesados	0.5788	0.57173	1.24	0.0044	0.0049	10.20
Azufre ppm	0.54	0.5	8.00	0.03	3	0.00
Nitrogeno ppm	20	-	-	-	-	-
Oxigeno ppm	-	-	-	-	-	-

Stream	16	8-diseño	% Error
Hydrogen mole frac	0.0134	0.0147	8.84
H2S mole frac	0.0014	0.00149	6.04
Methane mole frac	0.0070	0.00739	5.28
Ethane mole frac	0.0066	0.0066	0.00
Propane mole frac	0.0074	0.0082	9.76
i-Butane mole frac	0.0059	0.00548	7.66
n-Butane mole frac	0.0246	0.0249	1.20
i-Pentane mole frac	0.0194	0.02114	8.23
n-Pentane mole frac	0.0319	0.03503	8.94
i-Hexane mole frac	0.0695	0.06834	1.70
n-Hex + Pesados	0.8128	0.8067	0.76
Azufre ppm	0.5	-	-
Nitrogeno ppm	10	-	-
Oxigeno ppm	-	-	-

VII. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En primer instancia, se observa que al mezclar las dos corrientes de gasolinas alimentadas, junto con el hidrógeno de recirculación la temperatura no se encontraba tan alta como se esperaba, siendo que la fracción de vapor es inferior a la de diseño. Aunque la corriente resultante de la mezcla sea mayoritariamente hidrógeno, cuenta con altas concentraciones de agua que se recircula generada por las reacciones de compuestos organo-oxigenados. La corriente de entrada al reactor se encuentra completamente vaporizada, y los resultados de la corriente de salida son como los esperados, con una disminución de 162 moles de hidrógeno por hora, en reacciones de HDS, HDN y HDO. En la salida del reactor la concentración en ppm de azufre cumple con las especificaciones de diseño aunque la temperatura es un poco más alta se encuentra dentro del límite de tolerancia.

Una vez que la corriente de salida del reactor pasa por todo el tren de intercambiadores y sale del flash, FA-402, la concentración de esta corriente es mayoritariamente hidrocarburos pesados y al salir del equipo FA-405, esta corriente es rica en compuestos ligeros, incluyendo la mayoría del amoníaco formado y cierta cantidad de agua.

La alimentación a la torre DA-401, desbutanizadora, esta corriente es mayoritariamente pesados y las concentraciones como productos de la torre son, por los domos en la fase vapor, corriente 30, se presenta hidrógeno, gran cantidad de ácido sulfúrico, así como de agua y amoníaco mezclado con hidrocarburos ligeros. En la fase líquida de los domos, corriente 37, predominan los compuestos, n-butano, i-butano, propano e iso pentano. En los fondos,

corriente 40, se encuentra la mayoría de los pesados, así como la quinolina que no termino de reaccionar. De la torre "DA-402", desisohexanizadora, los productos de domos, corriente 46 se encuentra la mayoría de iso-pentanos, e iso-hexanos, para que por la parte de los fondos, corriente 50, se retiren los pesados que restan.

Por otro lado en las torres se presentan aviso de tres detectadas en los domos de estas, esto es por las pequeñas trazas de agua, producto de las reacciones, es decir junto con la fase organica, vapor y acuosa, se detectaran las tres fases, sin embargo no existe gran repercusión de esto

¿Que es lo que sucede con el azufre restante?, la mayor parte de los compuestos organo-sulfurados, sale por los dos torres, principalmente los domos de la torre desbutanizadora, y los pequeños restos por los fondos de la torre deisohexanizadora, con rumbo a la planta reformadora

En los casos cuando se alimentan mayores ppm de azufre en la corriente principal, el comportamiento es similar y no afecta las condiciones de salida de los equipos, ni de las corrientes, es decir, el gas amargo obtenido a partir de la fase liquida de los domos de la torre desbutanizadora, se encuentran gran cantidades de ácido sulfhídrico, con amoniaco y agua. El gas LPG presenta grandes cantidades n-butano e i-butano. Mientras que el consumo de hidrogeno se incrementa al igual que se incrementa la cantidad de acido. Y en el caso de introducir menor cantidad de azufre el consumo de hidrógeno decrece, pero con la misma tendencia

XIII. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Este reactor puede aplicarse para compuestos organo-sulfurados (e-mercaptano, metil-etil-sulfuro, dietil sulfuro y tiofeno), organo-nitrogenados (quinolina), y organo-oxigenados (m-cresol) de fracciones ligeras de petróleo utilizando el modelo de Phillipson, con la limitación de que no consideran las inhibiciones ocasionada entre ellos mismos. Puede manejar diversas temperaturas, así como diversas concentraciones de entrada. Si se quiere corroborar este programa con mayor detenimiento se recomienda presentar mayor número de resultados de campo con los cuales se pueden comparar los resultados.

Al validar los resultados es claro que el error máximo así como el error máximo permitido fue del 10% por lo que en ningún caso se encontró que estuviera fuera de tolerancia, siendo esto un buen indicio que el reactor modelado cumple con su función.

Se recomienda la temperatura de entrada al reactor casi estable para evitar problemas con las reacciones, así como una buena carga de alimentación de hidrógeno, lo que puede evitar la formación de depósitos de coque. Si se presentan a la entrada a la planta grandes concentraciones de compuestos organo-nitrogenados tener cuidado con el amoníaco formado, que aunque no se presenta en grandes cantidades puede ocasionar problemas en el tratamiento de los productos, o en las variables de diseño como temperatura. Si no se considera en buena forma a compuestos como los organo-oxigenados, la compresión puede dañar al compresor, y

el consumo de hidrógeno puede aumentar y afectar al proceso mismo, al mismo tiempo a nivel económico

En cuanto a los resultados de la sección de estabilización y fraccionamiento, son los esperados, en los domos de las dos torres, salen los más ligeros unos con ricos en butano, y otro en hexano e iso-hexano, con la única diferencia con los de planta, es que se presentan otros tipos de componentes como amoniaco y agua, aspecto que el diseño no lo consideraba, así como la quinoleina y n-propilciclohexano, pudiendo modificar el fraccionamiento, la temperatura y presión

Al concluir este trabajo de investigación resumo que con el modelaje de un reactor de este tipo muestra la capacidad del simulador HYSIM, como una herramienta importante en la industria y que resuelve muchos problemas de diseño, operación y economía. Por lo que este programa es de gran utilidad en aspectos de Hidrodesulfuración, que se puede aplicar en otras plantas de la misma naturaleza y que se puede comparar con otros reactores modelados. Al mismo tiempo este tipo de trabajo es de gran utilidad para la mejor comprensión de reacciones catalíticas y en especial de todo lo complejo que es un proceso de Hidrodesulfuración, así como su importancia en la Industria del Petróleo

XIV. BIBLIOGRAFÍA

Manual de Proceso para la Refinería "Miguel Hidalgo". IMP

Manual de Proceso para la Unidad Hidrodesulfuradora de la Refinería de Tula Hidalgo
Instituto Mexicano del Petróleo.

Diagrama de Flujo de Proceso, Planta Hidrodesulfuradora de Naftas PEMEX Refinería
"Miguel Hidalgo"

Froment, Gilbert F. et al Kinetic Modeling and Reactor Simulation in Hydrodesulfuration of
Oil Fractions *Ind Eng. Chem. Res.* 1994, 33, 2975

Kabe, T., Ishihara A., Zhan, Q., Deep Desulfuration of Light Oil Part 2 Hydrodesulfuration of
Dibenzothiophene, 4-Methyldibenzothiophene and 4,6-Dimethyldibenzothiophene *Appl. Catal*
1993, 97 L1

Hydrodesulfuration of polycyclic Aromatics Catalyzed by Sulfide CoO-MoO₃ / γ - Al₂O₃ The
Relative Reactivities *Jour. of Catal* 1979, 57 509

Hydrodesulfuration of Methyl-Substituted DibenzoThiophenes Catalyzed by Sulfide CoO-
MoO₃ / γ - Al₂O₃ *Jour. of Catal* 1980, 61 523

FALTA PAGINA

No.

59

Kilanowski, D R, et al. Hydrodesulfuration of Thiopheno, benzothiophene, Dibenzothiophene, and Related Compuunds Catalyzed by Sulfide CoO-MoO₃ / γ - Al₂O₃ .
Jour of Catal 1978. 55. 129.

Broderick, D H, Gates, B. C. Hydronolysis and Hydrogenation of Dibenzaothiophene Catalyzed by Sulfide CoO-MoO₃ / γ - Al₂O₃ :The Reaction Kinetics. *AICHE*.1981.27. No 4. 663

Van Parijs, Ignace, Hosten, Lucien H & Froment, Gilbert F. Kinetics of Hydrodesulfuration of by CoO-MoO₃ / γ - Al₂O₃ Catalyst. 2. Kinetics of the Hydrogenolysis of Benzothiophene. *Ind Eng Chem. Prod. Res. Dev.*1986. 25. 437.

Van Parijs, Ignace & Froment, Gilbert F. Kinetics of Hydrodesulfuration of by CoO-MoO₃ / γ - Al₂O₃ Catalyst. 1. Kinetics of the Hydrogenolysis of Thiophene *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.*1986 25 431

Girgis, M J & Gates, B. C Reactivities, Reaction Networks, and Kinetics in High-Pressure Catalytic Hidroprocessing. *Ind. Eng. Chem. Res.*.1991 30 2021.

Chen, Yu-Wen & Tsai, Ming-Chang Hydrodesulfuration of Atmospheric Gas Oil over NiMo/Aluminum Borate Catalysts in a Trickle Bed Reactor. *Ind Eng. Chem Res.*.1997 36. 2521

ESTA TESIS NO DEBE
SER DE LA BIBLIOTECA

Kabe, Tshiaki & Ishihara, Atsushi Deep Desulfuration of Light Oil. 3. Effects of Solvents on hydrodesulfuration of Dibenzothiophene. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1993. 33. 753

Houalla, M , Nag, N. K , Sapre, A. V., Broderick, D. H. & Gates, B. C. Hydrodesulfuration of Dibenzothiophene Catalyzed by Sulfided $\text{CoO-MoO}_3 / \gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ The Reaction Network *AIChE*. 1978. 24. No. 6. 1015.

Satterfield, Charles & Roberts, W. George Kinetics of Thiophene Hydrogenolysis on a Cobalt Molybdate Catalyst *AIChE*. 1968. 14. No 1 159.

Shah, Y T , G.J. Stiegel & M.M Sharma.. Backmixing in gas liquid-reactors. *AIChE*. 1978. 24 No 6 1015.

W J A Wammes, S J Mechielsen & K R. Westertep The transition between trickle flow and pulse flow in a cocurrent gas-liquid trickle-bed reactor at elevated pressures. *Chem. Ing. Science*, 45. No 10 pag 3149.

Grange, Paul Catalytic Hydrodesulfurization *Catal. Rev.-Sci. Eng.*, 21(1), 135 (1980).

Evans, Lawrence B Advances in Process Flowsheeting Systems. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139.

- Frye, G C & Mosby J. F. Kinetics of Hydrodesulfurization. *Chem. Eng. Pro* 63, No. 9, 66
- Aubert, C Durand, R. et.al. Factors Affecting the Hydrogenation of Substituted Benzenes and Phenols over Sulfided NiO- MoO₃ Catalysts *J. Catal.* 1988, 112,12-20
- Edelman, M. C Maholland, M K; et al Vapor-Phase Catalitic Hydrogenation Of Benzofuran. *J. Catal.* 1988,22 ,257-262.
- Hanlon, R T. Effects of P_{H_2S} , P_{H_2} , $P_{H_2 S} / P_{H_2}$ on the Hydrodenotrogenation or Pyridine. *Energy fuels* 1989, 1, 424
- Ho, T C ;Montagna, A. A ; Steger, J. J.. Competitive Hydrodenotrogenation an Aromatics Hydrogenation. Eighth International Congress on Catalysis Proceedings; Verlag Chemie: Berlin, 1984; Vol II, pp 257
- Smith, J M *Ingenieria de la Cinética Química*. México 1995.

APENDICE A. Algoritmo de cálculo.

