

76



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

“Desarrollo y análisis del esquema de simulación
para la planta hidrodesulfuradora de naftas de
Tula, Hidalgo”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A :

RAFAEL HERRERA ALONSO



EXAMENES PROFESIONALES

MEXICO D.F. FACULTAD DE QUÍMICA 2000

254124



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

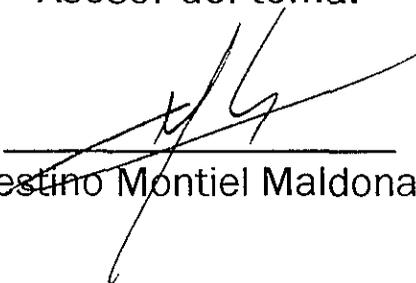
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición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

Jurado asignado

Presidente	Prof. Celestino Montiel Maldonado
Vocal	Prof. Horacio González Rodríguez
Secretario	Prof. Martín Rivera Toledo
1er. Suplente	Prof. Juvenal Flores de la Rosa
2º. Suplente	Prof. José Alfredo Tenorio López

Lugar donde se desarrollo el tema:
Facultad de química, Conjunto E.

Asesor del tema:



Celestino Montiel Maldonado

Sustentante:



Rafael Herrera Alonso

A mi familia y a mis abuelitos.

Agradecimientos.

Este trabajo no hubiera sido posible sin la participación del maestro Celestino Montiel Maldonado por su apoyo y sus atinadas recomendaciones.

A Julia por ser Julia. A Lalo, Pablo y Juan por ser amigos para siempre. A Paulina... ya sabes, eh!?. A Ingrid, Checo y demás amigos que me dieron la oportunidad de conocerlos.

A mi papá por saber cuando ser mi apá y cuando ser el doc. A mi mamá por quererme más que nadie. A las tías Nena y Chivis. A José y Q por ser más listos que yo.

INDICE

Resumen	1
Introducción	3
Objetivos	5
Antecedentes	6
Marco Teórico	
1. Simulación de procesos	9
2. HYSYS	10
3. Datos disponibles	11
4. Descripción general del proceso	
4.1. Componentes	11
4.2. Sección de reacción	14
4.3. Sección de estabilización y fraccionamiento	16
5. Esquemas de reacción	
5.1. Mecanismos de reacción para HDS	20
5.2. Mecanismos de reacción para hidrocracking	24
6. Modelos cinéticos	
6.1. Tiofeno	25
6.2. Benzotiofeno	30
6.3. Dibenzotiofeno	34
6.4. Hidrocracking	36
7. Reactor PFR	39
Desarrollo del esquema de simulación	
1. Ecuación de estado, compuesto y pseudocomponentes	42
2. Esquema de simulación	46
3. Ecuaciones cinéticas	58
Esquemas de Simulación	
1. Esquema General	60
2. Esquema DA-401	61
3. Esquema DA-402	62

Resultados	
1. Sistema de reacción	
1.1. Hidrodesulfuración	64
1.2. Hidrocracking	69
1.3. Consumo de hidrógeno	73
2. Efecto de variables de proceso en el reactor	
2.1. Temperatura	76
2.2. Presión	78
2.3. Recirculación de hidrogeno	80
3. Esquema de simulación	82
Conclusiones	84
Bibliografía	87
Apéndice A	93
Apéndice B	102
Apéndice C	104

FIGURAS

Figura 1	Reacciones involucradas	19
Figura 2	Esquema de reacción para tiofeno	26
Figura 3	Esquema de reacción para benzotiofeno	31
Figura 4	Esquema de reacción para dibenzotiofeno	34
Figura 5	Esquema para consumo de hidrogeno	38
Figura 6	Consumo de hidrogeno por parte de los tres grupos reaccionante	74

GRAFICAS

Gráfica 1	Perfiles de flujo para compuestos que se involucran en la reacción de HDS de tiofeno	66
Gráfica 2	Perfiles de flujo para compuestos que se involucran en la reacción de HDS de benzotiofeno	66
Gráfica 3	Porcentaje de tiofeno en la mezcla de compuestos sulfurados	68
Gráfica 4	Comparación de la conversión por componente del modelo vs. conversión reportada por PEMEX para hidrocracking.	72
Gráfica 5	Efecto de la temperatura de entrada al reactor PRF-100 sobre la concentración de compuestos sulfurados en la corriente (5).	77
Gráfica 6	Efecto de la temperatura de entrada al reactor PFR-100 sobre el consumo de hidrogeno	78
Gráfica 7	Efecto de la presión de entrada al reactor PFR-100 sobre la concentración de compuestos sulfurados en la corriente (5) y sobre el consumo de hidrogeno general	79
Gráfica 8	Efecto de la presión de entrada al reactor PFR-100 sobre el consumo de hidrogeno para los tres sistemas reaccionantes.	80
Gráfica 9	Efecto de la recirculación de hidrogeno sobre la concentración de hidrocarburos sulfurados en la corriente (5).	81

TABLAS

Tabla 1	Curva TBP	12
Tabla 2	Composición de Hidrogeno de reposición	13
Tabla 3	Especificación de efluentes de planta	13
Tabla 4	Parámetros cinéticos para tiofeno	24
Tabla 5	Parámetros cinéticos para benzotiofeno	33
Tabla 6	Parámetros cinéticos para dibenzotiofeno	36
Tabla 7	Parámetros de ajuste para la energía de activación en hidrocracking	37
Tabla 8	Energías de activación y coeficientes preexponenciales para hidrocracking,	38
Tabla 9	Selección de compuestos modelo. Compuesto: tiofeno. Consumo de H ₂ , producción de H ₂ S y flujos de entrada y salida para escoger a compuestos modelo en HDS	65

INDICE DE FIGURAS, GRAFICAS, TABLAS Y ESQUEMAS DE SIMULACIÓN

Tabla 10	Selección de compuestos modelo. Compuesto: benzotiofeno. Consumo de H ₂ , producción de H ₂ S y flujos de entrada y salida para escoger a compuestos modelo en HDS.	65
Tabla 11	Selección de compuestos modelo. Compuesto: dibenzotiofeno. Consumo de H ₂ , producción de H ₂ S y flujos de entrada y salida para escoger a compuestos modelo en HDS.	65
Tabla 12	Energías de activación y coeficientes preexponenciales utilizados para hidrocracking.modelo 1	71
Tabla 13	Por ciento de error por conversión para hidrocracking.	72
Tabla 14	Consumo de hidrógeno por parte de las reacciones de HDS e hidrocracking.	73

Esquemas de simulación

Esquema 11	General de la planta de HDS Tula, Hidalgo	60
Esquema 12	Torre de destilación desbutanizadora DA-401	61
Esquema 13	Torre de destilación desisohexanizadora DA-402	62

RESUMEN

En un análisis integral del proceso de HDS de naftas se debe hacer énfasis en los sistemas reaccionantes. La simulación en estado estacionario de plantas tales como la planta de HDS de naftas de Tula, Hidalgo tiene como paso limitante la descripción y manejo de las ecuaciones que rigen la simulación de las diferentes reacciones que se llevan a cabo en la etapa de reacción de la planta de HDS.

En el presente trabajo se realizó el esquema de simulación a estado estacionario para la planta de HDS de naftas de Tula, Hidalgo. La realización del esquema de simulación de HDS se dividió en dos grandes rubros: el primero fue la incorporación y generación de los esquemas de reacción los cuales describen el comportamiento general del sistema reaccionante; y el segundo fue la incorporación de los datos de diseño para generar el esquema global de simulación, el cual permite describir las secciones de reacción y de fraccionamiento de la planta de HDS de naftas. El sistema reaccionante considera dos diferentes tipos de reacción: hidrogenólisis de compuestos con azufre (HDS) e hidrocracking de los hidrocarburos presentes en la mezcla de naftas. La representación de HDS para naftas se hizo considerando como compuestos modelo al tiofeno y benzotiofeno; mientras el hidrocracking se consideraron pseudocomponentes, que normalmente se utilizan para representar a la mezcla de naftas. Para la integración del esquema global de simulación se utilizaron los datos de operación y de diseño proporcionados por PEMEX (Petróleos Mexicanos).

Por el lado de HDS se encontró que el tiofeno y benzotiofeno son buenos representantes para simular el comportamiento de la gama de compuestos con azufre que se encuentran en la nafta. Para hidrocracking después de probar con diferentes modelos se escogió un modelo simplificado con parámetros cinéticos empíricos para poder modelar el sistema reaccionante. Con estas dos herramientas se predijo el impacto que tendrían

algunas variables de operación (temperatura y presión de reacción, flujo de recirculación y porcentaje de compuestos de azufre) en el reactor sobre la calidad del efluente de la planta.

La importancia del estudio del proceso de HDS radica en el grado de pureza que se requiere en naftas o gasolinas con respecto a los compuestos de azufre contenidos en el producto final.

INTRODUCCION

Los procesos de hidrotratamiento de corrientes con hidrocarburos ha tenido su mayor aplicación en la eliminación de compuestos de azufre por varias razones: la primera para evitar envenenamiento de los catalizadores de platino, los cuales se utilizan en las secciones de reformación; y la segunda, y tal vez la mas importante es la eliminación de azufre de los combustibles líquidos, por la contaminación por SO_2 que se convierte en lluvia ácida en el ambiente.

El proceso de hidrotratamiento que se presenta en este trabajo es precisamente la eliminación de compuestos de azufre por medio de hidrogenación sobre catalizadores de $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Este trabajo consiste en generar el esquema de simulación global a estado estacionario, para describir el comportamiento de una planta en operación de PEMEX, la cual esta localizada en Tula, Hidalgo, estos procesos de hidrotratamiento estan enfocados a los cortes ligeros del petróleo "naftas". El esquema de simulación se implemento en un simulador comercial el cual es usado en planta; este simulador es HYSYS. Para el desarrollo del esquema de simulación de la planta en operación se usaron datos de diseño, los cuales fueron proporcionados por PEMEX. Por otro lado, por ser un proceso el cual involucra una serie de reacciones, es necesario saber los procesos reaccionantes que se dan dentro del reactor para poder predecir correctamente el comportamiento del mismo.

En el desarrollo del esquema de simulación global del sistema se procuro utilizar diferentes tipos de reacciones que pudieran ocurrir dentro del reactor de HDS; las reacciones que se consideraron fueron las siguientes:

1. Reacciones de eliminación de azufre (HDS)
2. Reacciones de hidrocracking

Los dos conjuntos de reacciones son simultáneos, y el balance global de materia considera a los dos. Para HDS se uso compuestos representativos como son tiofeno y benzotiofeno con ecuaciones cinéticas de tipo Langmuir-Hinshelwood, en las cuales consideran efectos de adsorción de reactivos y productos. Respecto al hidrocracking se usaron expresiones cinéticas de primer orden con sus parámetros obtenidos empíricamente. Todas las expresiones de rapidez de reacción cinéticas fueron introducidas en el modelo de un reactor pseudohomogeneo de tipo tubular de flujo tapón que en sus siglas en ingles se representa (PFR) en donde se despreciaron efectos de problemas de transferencia de masa y energía.

Para la generación global del esquema de simulación se utilizaron los datos proporcionados tratando de apegarse lo mas posible a ello para poder tener un esquema de simulación representativo.

OBJETIVOS

Objetivo general

Se desarrollara el esquema general de simulación a estado estacionario para la planta de Hidrodesulfuración (HDS) de naftas de Tula; Hidalgo, con base en los datos de diseño y del desarrollo de las reacciones involucradas en el proceso.

Objetivos específicos

- Se representaran a los compuestos de azufre que se encuentran en la mezcla de naftas mediante compuestos puros que sean representativos al corte de interés y de propiedades conocidas.
- Se Identificaran las reacciones representativas que suceden dentro del reactor de HDS para explicar de manera general el consumo de hidrogeno y las conversiones de los reactivos presentes.
- Se Identificaran las variables de procesos que afectan a la calidad del efluente de la planta.
- Contar con un esquema de simulación confiable para en el futuro aplicarlo a una simulación dinámica.

ANTECEDENTES

El desarrollo de este trabajo surge del convenio firmado por PEMEX-UNAM en donde el laboratorio de simulación y optimización de procesos, dirigido por el Maestro Celestino Montiel, se compromete a desarrollar los esquemas de simulación de la Refinería de Tula, Hidalgo con base a los datos proporcionados por Petróleos Mexicanos. Dentro de la Refinería de Tula, Hidalgo se encuentra la sección de tratamiento de los cortes ligeros (naftas) del petróleo con hidrogeno para eliminar azufre del hidrocarburo, esta sección del complejo tiene la característica principal de contar con una sección de reacción la cual no ha sido estudiada a fondo para conocer su comportamiento general. Este fue uno de los motivos que me llevo a interesarme en el desarrollo de este tema, ya que se trata de un problema real que requiere una mejor comprensión del proceso. El desarrollo de este esquema de simulación es un gran ejercicio como Ingeniero Químico, ya que prueba mis habilidades en todas las ramas que se estudiaron durante toda la carrera, desde el estudio de temas relacionados transferencia de calor, flujo de fluidos, procesos de separación, ingeniería de reactores por mencionar algunas, todas dentro de un proyecto de simulación de plantas.

Para generar el esquema de simulación de esta planta dentro de la Facultad de Química, se cuentan con recursos suficientes, como son los simuladores disponibles, los cuales se podían utilizar para desarrollar el esquema deseado. Uno de los objetivos del convenio UNAM-PEMEX consiste en generar esquemas de simulación, los cuales sean accesibles, no solo en la Facultad de Química sino también en sus plantas, de tal manera que se pudieran consultar en cualquier momento.

La representación de esta planta mediante un esquema de simulación tiene la posibilidad de tomar en cuenta esquemas de reacción complejos, que consideran una gama de hidrocarburos muy amplia. En general, la representación de estos compuestos se hace por medio de compuestos modelo y/o pseudocomponentes.

La eliminación de compuestos con azufre de las corrientes de hidrocarburos por hidrogenólisis en catalizadores de Co-Mo ha sido estudiado extensamente. La caracterización fisicoquímica de los catalizadores y sus propiedades estudiadas por Schuit y Gates (1973), Schuman y Shalit (1970) y Delmon (1979), mientras los primeros aspectos cinéticos generales fueron revisados por Vrinat y de Mourgues (1983) en condiciones lejos de las utilizadas en operaciones industriales y con un corto rango de variación de variables.

Gates y Page respectivamente dedican todo un capítulo para el estudio de HDS enfocándose principalmente al papel del catalizador y sus características, pero sin dar una descripción explícita de las reacciones que ocurren dentro de un reactor comercial aparte de las de HDS. Por otro lado Girgis y Gates (1991) publican una recopilación de las cinéticas y reacciones que ocurren dentro en procesos de hidrotratamiento con base en trabajos publicados anteriormente para HDS, HDO, HDN e hidrogenación de cíclicos para casos específicos y siempre con compuestos puros [ref. 17]. Estudios generales del comportamientos de reactores de HDS están dados por Cheng-Lie [ref. 8], Dassori [ref. 9], Díaz-Real [ref. 11], Froment [ref. 15] en donde explican ciertas características de estos reactores pero ningún entra en detalle de todas las reacciones que suceden dentro del reactor; estos artículos son una buena referencia pero limitada ya que para los fines del modelamiento de las reacciones las constantes de las ecuaciones representativas deben de ser conocidas.

Los compuestos modelo de azufre que se utilizaron para la mezcla de nafta presente fueron : tiofeno y benzotiofeno. La cinética utilizada para la hidrogenólisis del tiofeno fue desarrollada por Van Parijs y Froment (1986), la cual tiene un buen desarrollo y esquemas de reacción bien aceptados. Estos investigadores utilizaron un catalizador comercial $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ fijo en un reactor tubular; las condiciones de operación a las cuales se obtuvieron las cinéticas de reacción se variaron en el intervalo siguiente: presión total, 2-30 bar; temperatura 533-623 K; relación de hidrogeno/hidrocarburo 4-9, con estas condiciones los autores consideran que no existen limitaciones de transporte de masa en la intrafase [ref. 51]. La cinética de hidrogenólisis de benzotiofeno utilizada se realizo en un reactor tubular con un catalizador comercial de $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Las condiciones de temperatura fueron de 513-573 K y una presión de 2-30 bar y fueron desarrolladas por Van Parijs y Froment (1986) [ref. 52].

En el reactor de la PHN no solo ocurren reacciones de HDS sino también muchas otras. Las reacciones que se buscaron considerar aparte de las de HDS fueron reacciones de hidrogenólisis de hidrocarburos, denominadas hidrocracking. Para las reacciones de hidrocracking las cinéticas y esquemas de reacción están menos desarrolladas para las condiciones de reacción presentes en la PDN. Entre los pocos artículos publicados Debrabandere y Froment (1997) han estudiado reacciones de hidrocracking proporcionando cinéticas de reacción para una gama de compuestos (C1-C14) pero no publican todos los parámetros cinéticos que obtuvieron por lo que vuelve al artículo un buen parámetro pero sin mucha aplicación [ref. 12] para el modelamiento. Castellanos y Bazua (1999) en la simulación de una planta de tratamiento de hidrocarburos de diesel con hidrógeno proponen un esquema de reacción con uso de pseudocomponentes y ciertos parámetros para hidrocracking utilizándolos para una mezcla de hidrocarburos de diesel; esta propuesta fue probada sin obtener buenos resultados para la mezcla de naftas utilizada [ref. 6].

En nuestro caso el uso de pseudocomponentes es un limitante ya que no se cuentan con estudios del comportamiento de este tipo de situaciones dentro del hidrocracking. Por lo tanto el desarrollo de las cinéticas para estos compuestos fueron desarrollados para generar un esquema y parámetros que pudieran describir al sistema reaccionante de manera adecuada, los parámetros y esquemas cinéticos utilizados no tienen la finalidad de describir un mecanismo de reacción ni predecir los valores reales de las constantes de reacción; se utilizan solo para poder modelar al sistema reaccionante de manera adecuada.

MARCO TEORICO

En este capítulo se presentan las bases teóricas para la integración del diagrama de simulación de la planta de HDS de Tula, Hidalgo en términos de las herramientas básicas que se utilizaron para generar el esquema de simulación. Estas son los principios de la simulación de procesos; una descripción cualitativa del simulador HYSYS; la procedencia de los datos para la generación del esquema de simulación; descripción general del proceso; esquemas y expresiones de rapidez de reacción; ecuaciones generales para la simulación de un reactor PFR y la secuencia para la generación del esquema de simulación de la planta en general.

SIMULACION DE PROCESOS

La simulación de procesos envuelve representar a procesos reales tanto cualitativamente, como cuantitativamente en una forma matemática. Al construir una simulación de algún proceso, este se reduce a sus bases y después se describe adecuadamente en una forma matemática dependiendo de su complejidad. Por lo tanto un la simulación de procesos tiene tres facetas: (1) formulación del modelo [o esquema de simulación] (2) desarrollo de un algoritmo de solución matemática y (3) validación del modelo utilizando información conocida. Con base a estas necesidades y aprovechado las herramientas matemáticas, de computo y los principios básicos de la ingeniería química surgen los simuladores comerciales, teniendo como finalidad adaptarse a las necesidades personales de cada usuario utilizando ecuaciones generales para poder resolver problemas reales en una forma accesible para el usuario. En la actualidad, estos simuladores tienen programados ciertas herramientas tales como: modelos termodinámicos, propiedades elementales de compuestos reales y las operaciones unitarias de mayor uso; la combinación de estos tres elementos principales permite generar un esquema de simulación para describir el comportamiento general de un proceso. En el capítulo siguiente se presentan las

bases teóricas de las herramientas utilizadas para generar el esquema de simulación de la planta de hidrosulfuración de naftas de la planta de Tula, Hidalgo (PHN).

HYSYS

HYSYS, es el simulador que se utilizo para generar el esquema de simulación para la planta de HDS de Tula, Hidalgo. Este paquete de simulación fue seleccionado porque en plantas de PEMEX es el simulador que se utiliza. HYSYS es un simulador de la compañía Hyprotech; tiene como antecedentes HYSIM el cual es la primera versión de un simulador de interactivo. Hyprotech utiliza el proceso de simulación como herramienta para que el usuario incremente el entendimiento de los procesos para que se puedan tomar mejores decisiones de procesos. Para poder llegar a este objetivo HYSYS utiliza el concepto de simulación interactiva; la cual, según sus creadores no solo minimiza el tiempo de simulación sino también al estar construyendo interactivamente el modelo con acceso inmediato a los resultados el usuario va tomando conciencia del proceso.

HYSYS utiliza un diseño orientado a objetos con ambientes gráficos; la simulación interactiva empieza automáticamente en el momento en que se alimenta nueva información y de esa manera no existe información restringida de ninguna forma; este tipo de manejo de información hace posible visualizar todos los cálculos mientras se están realizando.

El ambiente de simulación interactiva de HYSYS permite utilizar otras herramientas sin tener que pasar los datos manualmente, el manejo de datos se hace automáticamente entre aplicaciones. HYSYS maneja los procesos tanto en estado estacionario o dinámico; también tiene las opciones de optimización de procesos, dimensionamiento, costos y diseños conceptuales; todas esta herramientas en un solo simulador.

La flexibilidad de HYSYS le permite ser utilizado como un modulo de calculo de propiedades termodinámicas para la aplicación con otros programas como Microsoft Excel, C++, Fortran 90 y Microsoft Visual Basic, o la posibilidad de incluir en él subrutinas no preestablecidas dentro de el mismo. Esta ultima aplicación fue de gran uso para nuestro caso, ya que dentro de las subrutinas de HYSYS no se tienen las expresiones cinéticas para nuestro sistema de reacción, Langmuir-Hinshelwood, por lo que HYSYS se extiende por

medio de programas realizados en Visual Basic en donde se definen las expresiones cinéticas con las que se quiere trabajar, sin tener que programar el método numérico para la resolución de las ecuaciones diferenciales resultantes.

DATOS DISPONIBLES

El trabajo de simulación que se realizó estuvo basado en una planta que ya esta en operación, por lo que los datos con los que se cuentan fueron proporcionados por PEMEX de la planta instalada en Tula, Hidalgo. Por lo que los resultados del modelamiento serán comparados con los disponibles obtenidos por PEMEX.

DESCRIPCION GENERAL DEL PROCESO

La planta hidrosulfuradora de naftas procesara una carga de 36,000 BPD de una mezcla de naftas estabilizada y nafta atmosférica procedentes de las plantas estabilizadoras y atmosféricas respectivamente, y 500 BPD de gasolina que proviene de las plantas hidrosulfuradoras de destilados intermedios. El objetivo de la hidrosulfuradora (PHN) es eliminar los compuestos de azufre presentes en la alimentación, así como preparar la carga para la planta reformadora.

La PHN consta de dos secciones: Sección de reacción y Sección de estabilización y fraccionamiento, tal como se muestra en el diagrama de flujo de proceso. [Esquemas de simulación 1,2 ,3]

Descripción de componentes.

Para facilitar el modelamiento las fracciones del petróleo de la gasolina se representan a través de un conjunto de pseudocomponentes, técnica de caracterización que permiten traducir los ensayos de un crudo o sus fracciones en ese conjunto de pseudocomponentes. Dichos datos incluyen curvas de % destilación TBP y densidad API, básicamente la caracterización se da en términos de las siguientes propiedades: temperatura de ebullición normal, densidad relativa y peso molecular los cuales permiten determinar parámetros que se utilizan en los diversos métodos de estimación de

propiedades termofísicas. Estas técnicas de caracterización se han convertido en programas estándar que están incorporados en los simuladores de proceso comercial.

En este trabajo, la carga normal con pentanos presenta las características siguientes:

Tabla 1. Curva TBP

Destilación %Vol.	TBP, °F
0	25
10	86
30	155
50	201
70	261
90	340
100	395
API	72.66
PM	101.405
SG	0.693
Azufre	800ppm
Presión de vapor de Reid	8.26

La gasolina procedente de las unidades hidrodesulfuración de destilados intermedios tiene las características siguientes:

Destilación %Vol.	TBP, °F
0	25
10	86
30	155
50	201
70	261
90	340
100	395
API	59.2
PM	116.4
Azufre	400ppm

El hidrogeno procedente de la unidad reformadora de naftas tiene las características siguientes:

Tabla 2. Composición de Hidrogeno de reposición

Composición	%Mol
H ₂ O	Trazas
H ₂ S	Trazas
H ₂	77.24
C ₁	8.35
C ₂	7.04
C ₃	4.32
NC ₄	1.64
IC ₅	0.5
NC ₅	0.27
IC ₆	0.32
NC ₆ (+)	0.32
Total	100.0

La especificación de los productos desulfurados y desisohexanizada son los siguientes:

- 1) Se considera que la carga normal que se envíen a la unidad reformadora de naftas es de 22,700 BPD y con una composición de:

Tabla 3. Especificación de efluentes de planta

Compuesto	Composición
Arsénico	1ppb max.
Nitrógeno	0.5ppm max.
Azufre	0.5ppm max.
Cloruros	0.5ppm max.
Fluoruros	0.5ppm max.
Plomo	20ppb max
Cobre	20ppb max.
Oxigeno combinado	Total de 5ppm de agua en el gas de recirculación max.
Componentes	Carga en %mol
IC ₅	0.109
NC ₅	0.323
2,2DM-C ₄	0.075
IC ₆	1.312
3mC ₅	0.717
NC ₆	97.464
Total	100.0

2) Pentanos e Isohexanos

Componentes	Carga en %mol
NC3	0.002
NC4	1.083
IC5	22.753
NC5	33.918
2,2DM-C4	1.616
IC6	10.405
3mC5	4.239
NC6	25.983
Total	100.0

Peso molecular 79.65

Sección de reacción

El objetivo de esta sección es efectuar la eliminación de compuestos de azufre principalmente; para ello se somete a la corriente de alimentación a un proceso de hidrogenación que se lleva a cabo en un reactor catalítico de lecho fijo.

La alimentación formada por una mezcla de nafta estabilizada, nafta atmosférica y de una corriente de gasolina procedente de la planta hidrodesulfuradora de destilados intermedios se pasan a un tanque acumulador de carga FA-401, pasando previamente por un filtro de carga FG-410/R en donde se eliminan los sólidos presentes en la nafta. Esta mezcla se envía por medio de una bomba de carga GA-401/RT hacia el tren de precalentamiento de carga con previa inyección de la corriente de hidrogeno provenientes del compresor de recirculación de hidrogeno GB-401 e hidrogeno de reposición proveniente de la planta reformadora.

El tren de precalentamiento de carga esta formado por los intercambiadores EA-401 AD y EA-402 AD, los cuales utilizan el efluente del reactor para precalentar la carga de 43 a 262 °C, con una vaporización total. La carga en estas condiciones pasa al calentador de carga, BA-401, con objeto de alcanzar una temperatura de 313 °C en la entrada del reactor DC-401. Dicha temperatura se controla con la corriente de salida del calentador mediante el flujo de combustible que se alimenta a este equipo. La carga que entra al reactor de lecho

fijo se ve sometida a reacciones de hidrogenación y transformación de los compuestos de azufre. La corriente de salida del reactor intercambia calor en los intercambiadores EA-402 AD y EA-401 AD, alcanzándose una temperatura de 95 °C.

El siguiente paso para el proceso tiene como objetivo separar el hidrogeno no reaccionante (denominado hidrogeno de recirculación) y reincorporarlo al sistema de reacción, mezclándolo con la corriente de carga. Para tal propósito, el efluente del reactor intercambia calor con el liquido precedente del tanque separador de producto desulfurado FA-402 en el intercambiador EA-403 AB y con agua de enfriamiento en el enfriador de producto desulfurado EA-404 AD, para alcanzar una temperatura de 43 °C y una vaporización de 2.4% en peso.

La mezcla liquido-vapor formada se separa en el tanque separador de producto desulfurado FA-402. El vapor resultante, con un contenido de 87% de hidrogeno aproximadamente, se envía al tanque de succión del compresor de recirculación, FA-403, con objeto de eliminar las pequeñas cantidades de liquido que pudieran haber sido arrastradas. Este gas tiene dos destinos: una pequeña parte, 3% en volumen, sirve como purga de gas amargo del sistema y al mismo tiempo como regulador de la presión de la sección de reacción; la otra parte de la corriente al compresor de recirculación de hidrogeno, GB-401, desde donde se descarga a una presión suficiente para que se mezcle con las corrientes de hidrogeno de reposición, primeramente y después con la corriente de carga.

La relación de hidrogeno/hidrocarburo manejado en la entrada al reactor es de 400 ft³ de H₂ a 68°F y 1 atm abs / Barril de carga a 60°F, con lo cual las reacciones de hidrogenación y transformación se llevan a cabo satisfactoriamente minimizando la despositación de carbón sobre el catalizador. La fase liquida separada del tanque FA-402 después de intercambiar calor con el efluente del reactor en el intercambiador EA-403 AB, se envía a la sección de estabilización y fraccionamiento.

Sección de estabilización y fraccionamiento

La finalidad de esta sección es la separación de los compuestos ligeros y la preparación de la carga a la planta reformadora. La separación de los ligeros se logra mediante la torre desbutanizadora, DA-401 [esquema de simulación 2], y la torre deisohexanizadora, DA-402 [esquema de simulación 3], realiza la separación del isohexano de los hexanos y mas pesados. Como se menciono antes, la fase liquida (procedente del tanque separador de producto desulfurado, FA-402) intercambia calor en el intercambiador, EA-403 AB, y enseguida se precalienta con la corriente de fondos de la torre desisohexanizadora , DA-402, en el intercambiador, EA-405 AB. Al liquido precalentado se le reduce la presión, mediante una válvula que opera a control de nivel del tanque separador de producto desulfurado, FA-402, de presión 21.6 a 6.3 kg/cm² man. lo cual provoca una expansión del fluido formándose una mezcla liquido-vapor que se envía al primer tanque separador de alimentación a torre desbutanizadora FA-404.

La fase vapor formada por hidrocarburos ligeros, hidrogeno y compuestos de azufre, tales como el ácido sulfhídrico, se condensan parcialmente en el enfriador de gas amargo EA-406 AB a una temperatura de 38 °C, inyectándose antes una corriente de inhibidor de corrosión para la protección de los equipos. Este enfriamiento se hace con el objeto de condensar los hidrocarburos mas pesados de la mezcla. La mezcla pasa el segundo separador de alimentación a la torre desbutanizadora FA-405, en donde la fase gaseosa rica en hidrogeno, metano y ácido sulfhídrico (gases amargos), se envían a la línea de gas amargo cuyo destino final es la planta de tratamiento con DEA.

Las corrientes liquidas procedentes de los tanques separadores FA-404 y FA-405, se manejan a control de nivel de dichos tanques mediante las bombas GA-408/R y GA-409/R respectivamente. Estas corrientes se mezclan enseguida y se alimentan al plato numero 15 de la torre desbutanizadora DA-401.

La torre desbutanizadora, tiene por objeto separar los hidrocarburos ligeros y butanos de los pentanos e hidrocarburos mas pesados; las condiciones de operación en el domo son de 16.8 kg/cm² man y 85°C. Por el domo de esta torre salen vapores con cierta cantidad de compuestos de azufre, por lo que nuevamente se inyecta un inhibidor de corrosión para evitar problemas de corrosión de equipos subsecuente. Estos vapores se

condensan parcialmente al pasar a través del condensador de la torre desbutanizadora EA-407 AB y se envían al tanque acumulador de reflujo de la torre desbutanizadora FA-406 donde se separan las fases liquido-gas. La fase gaseosa de este tanque es propiamente gas amargo el cual se envía hacia la línea de gas amargo mezclándose con el resto de los gases.

Por su parte el condensado se divide en dos corrientes: una constituye el reflujo de la torre, la cual se maneja a través de la bomba de reflujo de torre desbutanizadora GA-402/RT, alimentándose en el plato numero 1 a control de flujo en cascada con un controlador de temperatura de la torre; y la otra corriente, constituida principalmente de propanos, butanos y pequeñas cantidades de compuestos de azufre, se maneja a través de la bomba de destilado liquido de la torre desbutanizadora EA-410, para luego enviarse a control de nivel del tanque FA-406 hacia la planta de tratamiento con DEA (dietilamina). El control de presión de esta torre se logra mediante la regulación del flujo de salida de los gases amargos del tanque FA-406, mientras que el control de temperatura se lleva a cabo regulando la cantidad de reflujo enviado a la torre.

La corriente de fondos de la torre desbutanizadora constituida por pentanos, hexanos y mas pesados, se divide en dos: una parte se envía al rehervidor de torre desbutanizadora, BA-402, mediante la bomba de fondos, GA-404/RT; se alcanza una temperatura de 227°C y una vaporización del 50% mol; la otra parte se manda a la torre desisohexanizadora DA-402, previa disminución de la presión de 17.1 a 2.1 kg/cm² man., mediante una válvula que controla el flujo y que actúa en cascada con el control de nivel del liquido del fondo de la torre desbutanizadora. En esta misma corriente de fondos se encuentra un control analítico cuyo analizador mide la concentración de azufre y es capaz de activar un sistema de emergencia cuando la concentración de azufre resultante sea muy alta.

Simultáneamente a la apertura de esta válvula, el sistema arranca el motor eléctrico del enfriador EC-401, abre la válvula de la línea de enfriamiento del Segundo Enfriador de Gasolina Amarga EA-409, y abre también, la válvula que permite el ingreso a la nafta desulfurada de tanques de Almacenamiento hacia la Torre Desbutanizadora DA-401. Con esta serie de acciones se evita el paro de esta planta y también el para de la Planta Reformadora, pues el flujo permanece sin interrupción en la Sección de Fraccionamiento, y se da tiempo para restablecer las condiciones adecuadas en la Sección de Reacción.

En esta misma corriente de fondos se encuentra un control analítico cuyo analizador mide la concentración de azufre y es capaz de activar un sistema de emergencia cuando la concentración de azufre resultante sea muy alta.

La Torre Desisohexanizadora tiene como objetivo obtener la nafta dentro de especificaciones para ser enviada a la Planta Reformadora. Por tal motivo, la torre separa los pentanos e isohexanos por el domo, y hexanos y más pesados por el fondo, los cuales constituyen la carga a la Unidad Reformadora.

Como se mencionó antes, los pentanos e isohexanos salen por el domo de la torre condensándose totalmente en el Condensador de la Torre Desisohexanizadora EA-408 AD y recibéndose en el Tanque Acumulador de Reflujo de la Torre Desisohexanizadora FA-407. *Parte del condensado se recircula hacia la torre para mantener la relación de reflujo requerido y la corriente restante se envía como carga a la Planta Fraccionadora y a almacenamiento.*

Cuando se trabaja con carga con pentanos el volumen de este destilado líquido es de 13,300 BPD, por lo que se destilan 5,896 BPD a la Planta Fraccionadora y 7,405 BPD a almacenamiento, bajo previo enfriamiento en el Enfriador de Pentanos EC-402.

El control de presión de la torre desisohexanizadora se realiza mediante una línea de desvío de vapores calientes al Tanque Acumulador de Reflujo FA-407. Cuando la presión disminuye la válvula permite el paso de vapores al interior del tanque produciendo una contrapresión en el sistema, mientras que si la presión aumenta, la válvula situada en la línea de desfogue del mismo tanque empieza abrir aliviando la presión. El control de la temperatura de la torre es similar al control de la torre desbutanizadora.

La corriente que sale por el fondo de la Torre Desisohexanizadora compuesta de hexano y mas pesados, constituye propiamente la nafta producto que se enviara a la planta reformadora. Una parte de este liquido de fondos se recircula al Rehervidor de la Torre Desisohexanizadora BA-403 mediante la Bomba GA-410/RT. En este equipo el líquido se vaporiza parcialmente (47% peso) a una temperatura de 168°C y se controla esta temperatura mediante el consumo de combustible.

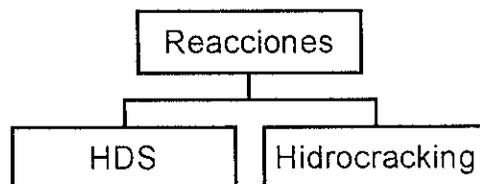
Otra parte del líquido de fondos se envía al Tanque de Balance FA-408, el cual tiene el propósito de otorgar mayor flexibilidad al envío de la nafta a la Planta Reformadora, aumentando el tiempo de residencia del líquido. El efluente de este tanque se divide en dos corrientes. La primera es enviada mediante la Bomba GA-405/RT hacia la Planta Reformadora, pasando previamente por el Primer Precalentador de Carga a Torre Desbutanizadora EA-405 A-B, en donde intercambia calor con el líquido proveniente del Tanque Separador de Producto Desulfurado FA-402.

ESQUEMAS DE REACCION

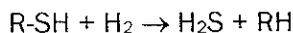
En el proceso de hidrodesulfuración de naftas (HDS) se utilizan catalizadores de Ni, Co, y Mo, soportados en γ -alúmina, por ser catalizadores de baja selectividad hacia la eliminación de compuestos con azufre, sobre la superficie de estos se dan numerosas reacciones que van a la par con la eliminación de compuestos de azufre. Las reacciones más comunes son: hidrocracking, hidrogenación de compuestos insaturados, eliminación de compuestos nitrogenados (HDN), hidrogenación de compuestos oxigenados (HDO), eliminación de compuestos con metales pesados. El estudio de estas reacciones secundarias toman un peso importante, entre otras cosas porque la eliminación de azufre (HDS) no justifica el consumo de hidrogeno que se da en el proceso real de HDS. En esta parte del trabajo se presentan brevemente los dos sistemas reaccionantes más importantes que se tomaron en cuenta: HDS, hidrocracking, con un especial énfasis en el estudio de el mecanismo de reacción para la eliminación de compuestos con azufre.

Las reacciones que se van a considerar se pueden dividir en dos grandes familias:

Figura 1. Reacciones involucradas

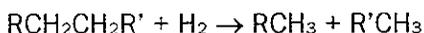


HDS, Consiste básicamente en el rompimiento molecular que ocurre en la separación del azufre de aquellas moléculas de hidrocarburo que lo contiene, para dar origen a H₂S y otro hidrocarburo con un peso molecular disminuido en una magnitud equivalente al peso molecular del azufre:



Esta reacción es la reacción de mayor interés en este trabajo, ya que en ella se logra en objetivo primordial de eliminación de azufre, que en el caso particular de las naftas es importante ya que el producto final de las naftas son las gasolinas comerciales, las cuales deben de cumplir con un contenido de azufre menor a 0.5 ppm.

Hidrocracking, con este nombre se conoce a las reacciones de hidrogenólisis de hidrocarburos donde moléculas de alto peso molecular se convierten en compuestos de menor peso molecular por medio de reacciones que implican la adición de hidrogeno:



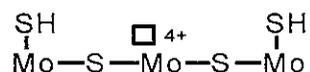
Estas reacciones forman o constituyen un sistema complejo en el sentido que el producto de una reacción a su vez puede servir como reactivo de otras reacciones, por lo que el hidrocracking es sucesivo hasta llega al metano, que es el hidrocarburo de menor peso molecular. Este tipo de reacciones son posibles en catalizadores como Co-Mo dado al carácter ácido que presenta este tipo de catalizadores. El estudio de estas reacciones ha cobrado gran importancia debido a la conversión de productos pesados (normalmente residuos de la destilación al vacío) en productos ligeros que son combustibles mas valiosos.

Mecanismo de reacción para HDS

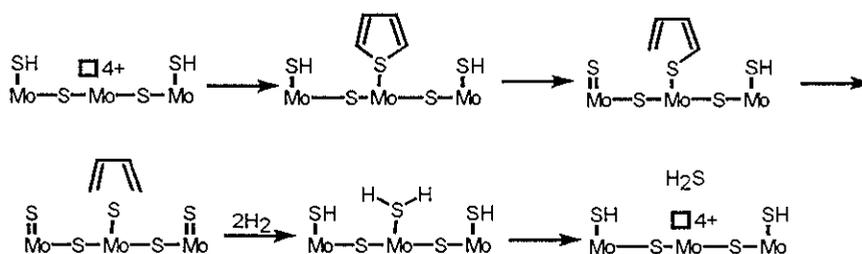
Los mecanismos de reacción para la hidrosulfuración han sido ampliamente estudiados mediante una gran experimentación; y es evidente que el conocimiento que se tiene de ella ha ido evolucionando por la gran cantidad de información experimental recabada. A continuación se presenta el modelo que sirvió de base a los modelos cinéticos para las reacción de HDS que se utilizó en este trabajo para simular el proceso de HDS.

El desarrollo del mecanismo de reacción para el tiofeno tiene como virtud la extrapolación a los dos compuestos de azufre que se manejan benzotiofeno y dibenzotiofeno, gracias a las propiedades intrínsecas que presenta los tres, las cuales son similares. Los tres compuestos presentan un anillo aromático que contiene azufre que es precisamente tiofeno por lo que vuelve al benzotiofeno y dibenzotiofeno compuestos similares con respecto a la interacción que tendrían con la superficie del catalizador. Esto no quiere decir que los mecanismos de reacción son iguales, pero si parecidos.

El mecanismo de mayor estudio para la hidrodesulfuración es tiofeno, el cual reacciona sobre catalizadores de Co-Mo impregnados sobre γ -alúmina previamente sulfurado. El sitio activo se asume es el metal libre de aniones en la superficie:



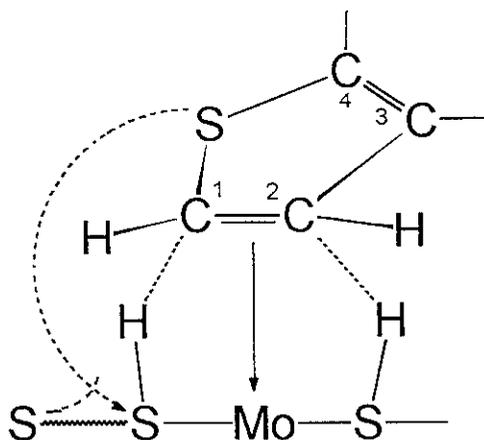
El primer mecanismo considera como etapa inicial la adsorción del tiofeno en la superficie del catalizador a través del átomo de azufre; este es el único elemento que experimenta interacción química con la superficie activa del catalizador; por este motivo, el mecanismo se identifica como "mecanismo de un solo punto". A continuación se presenta el mecanismo de reacción con interacción del catalizador:



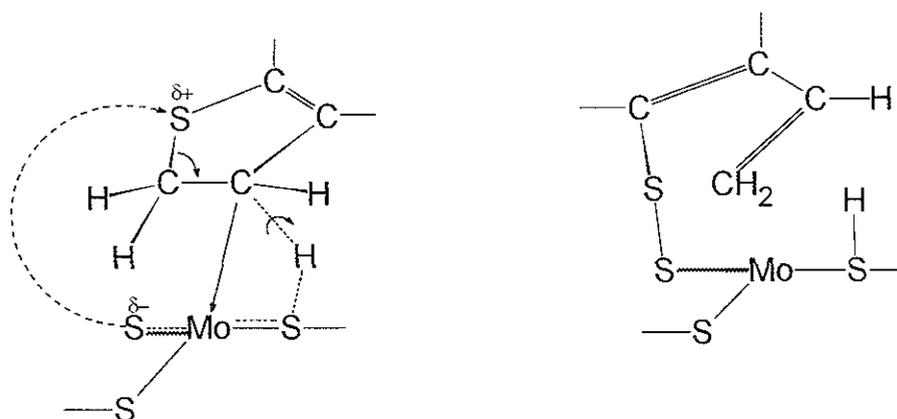
. Este mecanismo de reacción fue descartado por medio de probarlo con diferentes reactivos, como en el caso la desulfuración del dibenzotiofeno con relación a sus derivados metílicos en donde usando modelos ampliamente probados estiman diferencias de varios ordenes de magnitud entre sus velocidades de reacción. Sin embargo, la experimentación

señala que el 4-metil-dibenzotiofeno es solo 5 veces menos reactivo que el dibenzotiofeno y el 4-6 dimetil-dibenzotiofeno es solo dos veces menos reactivo que el anterior. Algo similar ocurre con el análisis de velocidades estimadas vs. las reales en el caso de los metil-derivados del benzotiofeno, encontrándose de nueva cuenta efectos estéricos mucho menores a los anticipados. Este conjunto de evidencias experimentales hicieron que el mecanismo de un punto fuera descartado.

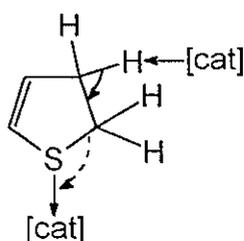
El mecanismo de mayor aceptación es el de multipunto en donde se sugiere que las moléculas tiofénicas se quimiadsorben de tal manera que la ligadura C₁-C₂ se coordinan con el metal libre de aniones en la superficie del catalizador, mientras que el azufre adyacente interactua con un azufre en la vecindad sobre la superficie. La unión del anillo tiofenico a través de la posición C₁-C₂ genera un cambio en la distribución electrónica, quedando el azufre con deficiencia de electrones, promoviéndose así su unión con un azufre de alta densidad electrónica sobre la superficie catalítica. Estos cambios facilitan la subsecuente adición de hidrogeno a los centros coordinados C₁-C₂ y la formación de dihidrotiofeno como producto intermedio.



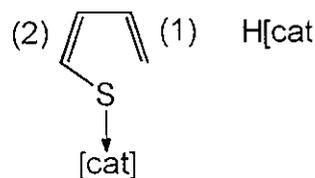
Con la figura anterior se pueden reconocer varias trayectorias alternas de formación de productos con referencia a los complejos formados por el reactivo-catalizador. Las líneas punteadas representan un grado incompleto de covalencia en las uniones y la línea ondulada representa una unión remota entre los centros. Si el átomo de C (1) se unió a un protón con una covalencia completa antes de que ocurra lo mismo con el átomo de C (2), esto es si se da una hidrogenación parcial en el doble enlace de los C (1-2), entonces la deslocalización electrónica por la covalencia parcial al protón en el C (2) (estructura A.2) puede llevar a la ruptura de la unión de S-(1) pasándose de la estructura A.2 a la A.3.



Si los protones parcialmente unidos de la fig. A se unen en verdadera unión covalente con los carbonos (1) y (2) el producto resultante es A.4 hidrotiofeno el cual ya no es aromático.



A.4



A.5

La estructura A.5 es altamente susceptible a una eliminación β térmica, que corresponde a la trayectoria ilustrada por las líneas punteadas, aparte de ser asistida por los centros electrofílicos de la superficie del catalizador a la que está unida por medio del azufre, el cual se ha vuelto nucleofílico al perderse la aromaticidad. El resultado neto es

equivalente a la trayectoria que involucra una transferencia no simultanea de hidrogeno al reactivo quemiasorbido en (A).

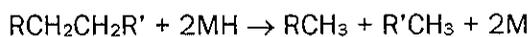
De la estructura A.5, la cual se presume tiene una unión fuerte con el catalizador, puede experimentar quemisorción de sus grupos olefínicos a Mo^{4+} en los sitios vacantes de aniones creados en su vecindad por hidrogenación y desorción de H_2S , y esto puede nuevamente conducir a la ruptura de la unión C-S. Al final, el proceso llevara a la liberación de butadieno, o si la doble ligadura (1) (mas remota de la unión C-S) se reduce antes de la reducción de la doble unión del sulfuro vinílico (2), se formara directamente buteno sin butadieno.

Mecanismos de reacción para hidrocracking

Dado que las reacciones de hidrocracking son reacciones de hidrogenólisis de hidrocarburos, las reacciones en general son similares que las reacciones de hidrogenólisis de compuestos organosulfurados; hidrocracking va dirigido a hidrocarburos saturados los cuales se van a descomponer en compuestos con menor peso molecular. Las reacciones se dan sobre la superficie del catalizador de Co-Mo soportados en γ -alúmina, el cual tiene como función iniciar la reacción con la molécula de hidrogeno al hacerla activa adsorbiéndola sobre su superficie.



En base al carácter ácido del catalizador de $CoMo/\gamma-Al_2O_3$ [acido de Lewis], tiene la funcionalidad de romper el enlace carbono-carbono simple, para luego ser acompañada por la hidrogenación del hidrocarburo:



Aunque el catalizador de $CoMo/\gamma-Al_2O_3$ no presenta gran reactividad a las reacciones de hidrogenólisis de hidrocarburos estas pueden ser consideraran para representar la desaparición de los compuestos pesados de la nafta, la cual en base a la literatura consultada es posible bajo las condiciones de reacción presentes en la zona del reacción.

MODELOS CINETICOS

Los modelos cinéticos que se presentaran a continuación son los correspondientes a

- i. Hidrodesulfuración de tiofeno, benzotiofeno, dibenzotiofeno
- ii. Hidrocracking

La representación de los compuestos de azufre por medio de compuestos puros como el tiofeno y benzotiofeno se hizo por sus propiedades intrínsecas de punto de ebullición y peso molecular (tiofeno PM: 84.136 , punto ebullición normal: 183.29 °F; benzotiofeno PM: 106.17, punto ebullición normal: 227.16 °F) los cuales se encuentran dentro del rango de la curva de caracterización TBP.

Tiofeno

La eliminación de compuestos con azufre de las corrientes de hidrocarburos por hidrogenólisis en catalizadores de Co-Mo ha sido estudiado extensamente. La caracterización fisicoquímica de los catalizadores y sus propiedades estudiadas por Schuit y Gates (1973), Schuman y Shalit (1970) y Delmon (1979), mientras los aspectos cinéticos fueron revisados por Vrinat y de Mourgues (1983), con la mayoría de los estudios cinéticos hechos en condiciones lejos de las utilizadas en operación industrial y con un corto rango de variación de variables.

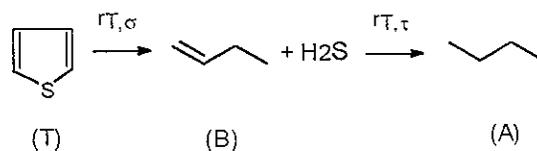
La cinética que se utilizo y que se describe a continuación fue para la hidrogenólisis del tiofeno y fue desarrollada por Van Parijs y Froment (1986). Estos investigadores utilizaron un catalizador comercial CoMo/ γ -Al₂O₃ fijo en un reactor tubular; las condiciones de operación a las cuales se obtuvieron las cinéticas de reacción se variaron en el rango siguiente: presión total, 2-30 bar; temperatura 533-623 K; relación de hidrogeno/hidrocarburo 4-9, con estas condiciones los autores consideran que no existe limitaciones de transporte de masa en la intrafase.

Las condiciones a las cuales se realizaron las cinéticas de reacción son de gran importancia ya que estas deben ser similares a las condiciones de operación de la planta, para que las ecuaciones y constantes sean confiables para el uso en la simulación del reactor de HDS.

Esquema de reacción

El esquema de reacción se puede basar en la cantidad de productos de la hidrogenólisis, en este caso del tiofeno. Los autores encontraron cantidades medibles de H_2S , n-butano, 1-buteno, cis-2-buteno y trans-2-buteno y por otro lado no se encontraron los compuestos de tetrahidrotiofeno y 1,3-butadieno por lo que se propuso que estos compuestos son hidrogenados rápidamente para formar los tres butenos. Por la forma sigmodial del perfil para el n-butano permitió considerar que se forma mediante una reacción subsecuente. Con base a estos resultados fue propuesto el siguiente modelo consecutivo para la hidrogenólisis del tiofeno (T) a H_2S , buteno (B) y butano (A).

Figura 2. Esquema de reacción para tiofeno

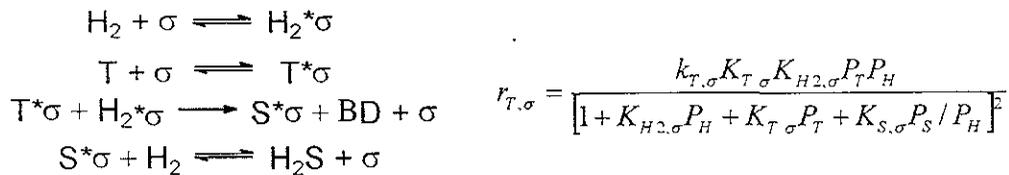


La hidrogenólisis del tiofeno en buteno y la hidrogenación de buteno en butano se considera que se dan en diferentes tipos de sitios activos, σ y τ . La existencia de dos diferentes tipos de sitios en catalizadores de Co-Mo bajo condiciones de HDS fue publicado por Owens y Ambreg (1962) y Delmon (1979).

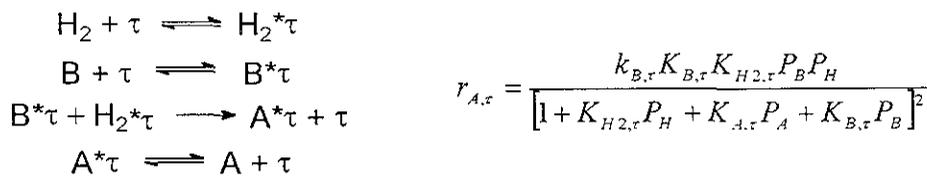
En la construcción de los posibles mecanismos de reacción de tipo Hougen-Watson [ref. 51, 52], se distinguió entre los sitios activos para la hidrogenólisis, σ y la hidrogenación, τ . La adsorción de los reactivos, la reacción superficial entre las especies adsorbidas o la desorción de los productos de la reacción fueron procesos considerados como pasos controlantes de la rapidez de reacción. Las variaciones entre los mecanismos de reacción para $r_{T,\sigma}$ y $r_{T,\tau}$ planteados cambiaban en cuanto al tipo de sitio activo (σ o τ) y la forma de adsorción del hidrogeno.

Se plantearon dos pares de mecanismo de reacción: el primero esta basado en que la reacción sobre la superficie entre tiofeno e hidrogeno adsorbido molecularmente es el paso determinante en la rapidez de reacción tanto para la hidrogenólisis y la hidrogenación.

a) Hidrogenólisis del tiofeno en sitios σ :

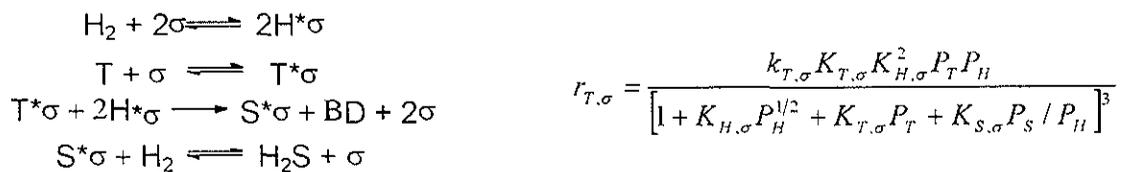


b) Formación de butano vía la hidrogenación de buteno en sitios τ :

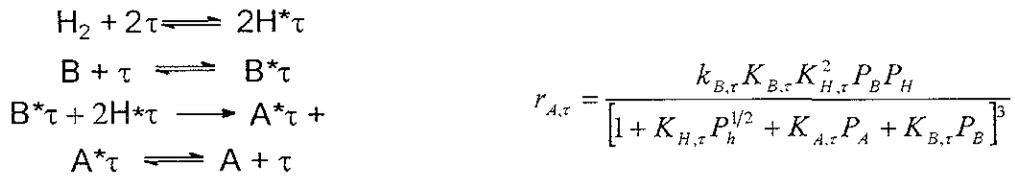


El segundo modelo tiene la diferencia con respecto al primero en que el hidrogeno esta adsorbido atómicamente. El mecanismo de reacción y las ecuaciones de velocidad de reacción que resultan son las siguientes:

a) Para la hidrogenólisis del tiofeno en sitios σ :



b) formación de butano a partir de la hidrogenación de buteno en sitios τ :



Después de haber calculado los valores para las constantes, los dos modelos entran un rango de 95% de confiabilidad lo cual se explica por el número relativamente grande de parámetros que tienen. Para este trabajo se utilizaron el segundo par de ecuaciones de rapidez de reacción ya que tienen mayor similitud con respecto a las ecuaciones de rapidez de reacción para el benzotiofeno en donde el hidrógeno es adsorbido atómicamente. Por lo tanto las ecuaciones de rapidez de reacción para el tiofeno, buteno y butano que se utilizaron son las siguientes:

a) Para la hidrogenólisis del tiofeno en sitios σ :

$$r_{T,\sigma} = \frac{k_{T,\sigma} K_{T,\sigma} K_{H,\sigma}^2 P_T P_H}{\left[1 + K_{H,\sigma} P_H^{1/2} + K_{T,\sigma} P_T + K_{S,\sigma} P_S / P_H\right]^3}$$

Donde:

$r_{T,\sigma}$ = rapidez de reacción, (gmol/(g de catalizador s))

$k_{T,\sigma}$ = constante de velocidad de reacción, (gmol/(g de catalizador s))

$K_{T,\sigma}$ = constante de adsorción de tiofeno en sitios σ , (atm^{-1})

$K_{H,\sigma}$ = constante de adsorción de hidrógeno en sitios σ , (atm^{-1})

$K_{S,\sigma}$ = constante de adsorción de H_2S en sitios σ , (adimensional)

$P_{T,H,S}$ = presiones parciales de tiofeno (T), hidrógeno (H) y H_2S (S), (atm)

b) Para la formación de butano apartir de la hidrogenación de buteno en sitios τ :

$$r_{A,\tau} = \frac{k_{B,\tau} K_{B,\tau} K_H^2 P_B P_H}{\left[1 + K_{H,\tau} P_H^{1/2} + K_{A,\tau} P_A + K_{B,\tau} P_B\right]^3}$$

$r_{A,\tau}$ = rapidez de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

$k_{B,\tau}$ = constante de velocidad de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

$K_{B,\tau}$ = constante de adsorción de buteno en sitios τ , (atm⁻¹)

$K_{H,\tau}$ = constante de adsorción de hidrogeno en sitios τ , (atm⁻¹)

$K_{A,\tau}$ = constante de adsorción de butano en sitios τ , (atm⁻¹)

$P_{A,B,H}$ = presiones parciales de butano (A), hidrogeno (H) y buteno (B), (atm)

La siguiente tabla muestra los valores para las constantes de velocidad de reacción y de adsorción para las expresiones de rapidez de reacción. En algunas de ellas se considera la dependencia con respecto a la temperatura por medio de Arrhenius:

$$k = k' \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad , \quad K = K' \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)$$

Tabla 4. Parámetros cinéticos para tiofeno

	K' o k' ^a	E o (-ΔH) ^b
$K_{T,\sigma}$	5.22E7	29.9
$K_{T,\tau}$	5.60E-4	10.7
$K_{H,\sigma}$	0.536	
$K_{S,\sigma}$	91.2 ^c	
$k_{B,\tau}$	2.21E11	38.1
$K_{B,\tau}=K_{A,\tau}$	4.07E-4	10.6
$K_{H,\tau}$	8.88E-13	26.4

La justificación de la existencia de dos diferentes sitios catalíticos , σ y τ se puede observar en la diferencia en los valores de $K_{H,\sigma}$ y $K_{H,\tau}$. Se ha considerado que las constantes

^a K' (atm⁻¹) y k' (gmol/(g de catalizador*s))

^b (kcal/gmol)

^c adimensional

K_{H_σ} y K_{S_σ} son independientes de la temperatura y los coeficientes de adsorción para el butano y buteno son iguales.

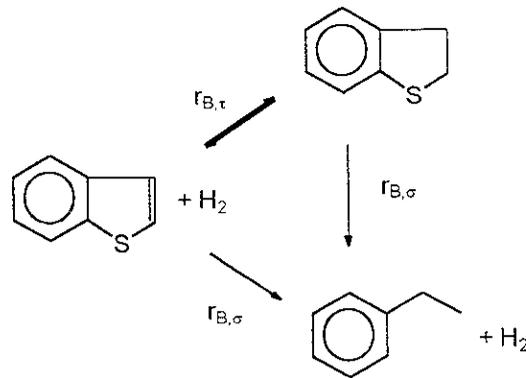
Benzotiofeno

Al igual que en el caso del tiofeno, la hidrodesulfuración en catalizadores de Co-Mo se han estudiado ampliamente. Ahora es bien aceptado pensar que la hidrogenólisis del benzotiofeno se lleva a cabo por medio de esquemas de reacciones paralelas, las cuales involucran el rompimiento de enlaces C-C y C-S cada una como reacciones principales. La cinética de hidrogenólisis de benzotiofeno presentada a continuación se realizó en un reactor tubular con un catalizador comercial de CoMo/ γ -Al₂O₃. Las condiciones de temperatura fueron de 513-573 K y una presión de 2-30 bar. Las variables principales consideradas por los autores fueron presión total, tiempo de residencia del reactor, relación hidrogeno/hidrocarburo y temperatura de reacción. Estas cinéticas fueron desarrolladas por Van Parijs y Froment (1986).

Esquema de reacción

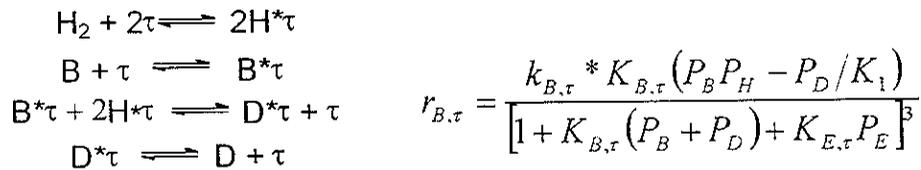
El sistema de reacción triangular planteado se basa en la hidrogenólisis del benzotiofeno (B) en etilbenceno (E) y H₂S (S). La hidrogenólisis y la hidrogenación se dan en sitios activos diferentes, σ y τ . En estas reacciones el estireno es un intermediario entre el benzotiofeno y etilbenceno pero no se detectó por lo que se puede deber a su gran rapidez de ser hidrogenado hacia etilbenceno. El esquema de reacción contempla dos mecanismos de reacción paralelos los cuales llegan al mismo resultado final; el primero considera como primer paso una hidrogenación del benzotiofeno para formar como producto intermedio al dihidrobenzotiofeno para luego este por medio de una hidrogenólisis formar al etilbenceno; el segundo esquema considera la hidrogenólisis del benzotiofeno para formar directamente al etilbenceno.

Figura 3. Esquema de reacción para benzotiofeno



El resultados al que llegaron Van Parijs y Froment después de haber utilizado modelos de minimización de experimentos para llega a la discriminación de modelos y estimación de parámetros fue que la reacción superficial es el paso determinante para ambos sitios catalíticos, así como la adsorción sobre la superficie del catalizador del hidrogeno se da de forma atómica. A continuación se dan los mecanismo de reacción y su rapidez de reacción correspondientes para el modelo final seleccionado.

- a) Para la hidrogenación del benzotiofeno (B) en dihidrobenzotiofeno (D) en sitios catalíticos τ es:



Donde $k_{B,\tau}^* = k_{B,\tau} K_{H,\tau}$

$r_{B,\tau}$ = rapidez de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

$k_{B,\tau}$ = constante de velocidad de reacción, (mol/(g*s))

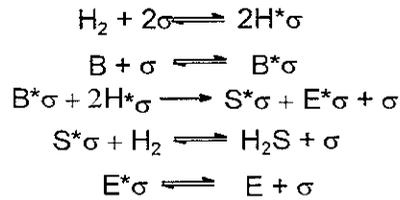
$K_{B,\tau}$ = constante de adsorción de benzotiofeno en sitios τ , (atm⁻¹)

$K_{H,\tau}$ = constante de adsorción de hidrogeno en sitios τ , (atm⁻¹)

$K_{E,\tau}$ = constante de adsorción de etilbenceno en sitios τ , (atm⁻¹)

$P_{A H E D}$ = presiones parciales de benzotiofeno (B), hidrogeno (H) y etilbenceno (E), 1,2- dihidrobenzotiofeno, (atm)

b) Para la hidrogenólisis de benzotiofeno a etilbenceno (E) en sitios σ :



$$r_{B,\sigma} = \frac{k_{B,\sigma} K_{B,\sigma} K_{H,\sigma} P_B P_H}{\left[1 + (K_{H,\sigma} P_H)^{1/2} + K_{S,\sigma} P_S / P_H + K_{B,\sigma} (P_B + P_D) \right]^2}$$

$r_{B,\sigma}$ = rapidez de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

$k_{B,\sigma}$ = constante de velocidad de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

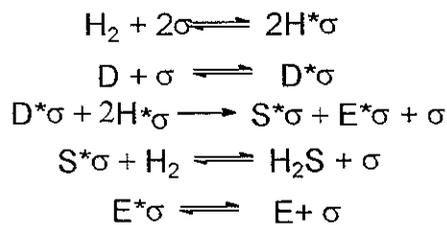
$K_{B,\sigma}$ = constante de adsorción de benzotiofeno en sitios σ , (atm^{-1})

$K_{H,\sigma}$ = constante de adsorción de hidrogeno en sitios σ , (atm^{-1})

$K_{S,\sigma}$ = constante de adsorción de H_2S en sitios σ , (adimensional)

$P_{B, D, H, S}$ = presiones parciales de benzotiofeno (B), 1,2-dihydrobenzotiofeno (D), hidrogeno (H) y H_2S (S), (atm)

c) Para la hidrogenólisis del dihydrobenzotiofeno en etilbenceno (E) en sitios σ :



$$r_{D,\sigma} = \frac{k_{D,\sigma} K_{B,\sigma} K_{H,\sigma} P_D P_H}{\left[1 + (K_{H,\sigma} P_H)^{1/2} + K_{S,\sigma} P_S / P_H + K_{B,\sigma} (P_B + P_D) \right]^2}$$

$r_{D,\sigma}$ = rapidez de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

$K_{D\sigma}$ = constante de velocidad de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

$K_{B\sigma}$ = constante de adsorción de benzotiofeno en sitios σ , (atm⁻¹)

$K_{H\sigma}$ = constante de adsorción de hidrogeno en sitios σ , (atm⁻¹)

$K_{S\sigma}$ = constante de adsorción de H₂S en sitios σ , (adimensional)

$P_{B\ D\ H\ S}$ = presiones parciales de benzotiofeno (B), 1,2-dihidrobenzotiofeno (D), hidrogeno (H) y H₂S (S), (atm)

La siguiente tabla muestra los valores para las constantes de velocidad de reacción y de adsorción para las expresiones de rapidez de reacción del benzotiofeno, para este caso solo las constantes de velocidad de reacción están reportadas en función de la temperatura, las constantes de adsorción son valores independientes a la temperatura.

$$k = k' \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

Tabla 5. Parámetros cinéticos para benzotiofeno

	$K' \text{ o } k' ^a$	$E ^b$
$K_{B\tau}$	8.84E4	24.1
$K_{B\sigma}$	9.4E2	17.6
$K_{D\sigma}$	2.01E8	31.3
$K_{B,\tau}$	2.05	
$K_{E,\tau}$	294	
$K_{B\sigma}$	19.3	
$K_{H\sigma}$	0.358	
$K_{S,\sigma}$	211 ^c	

^a K' (atm⁻¹) y k' (gmol/(g de catalizador*s))

^b (kcal/gmol)

^c adimensional

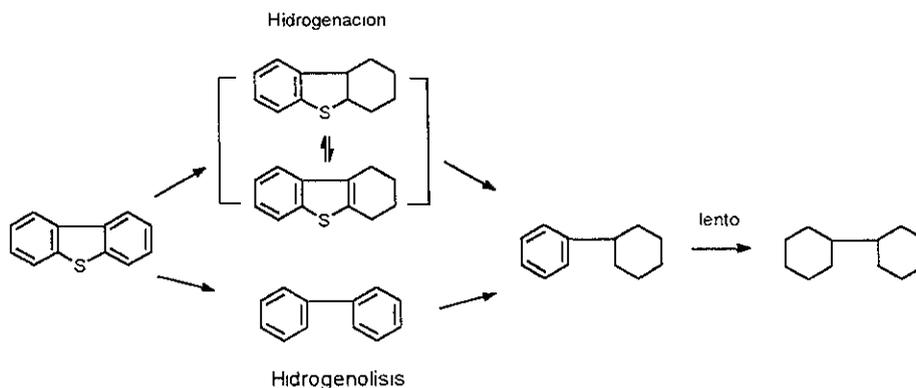
Dibenzotiofeno

La hidrogenólisis del benzotiofeno fue estudiada por G.E. Broderick y B.C. Gates (1981) en un rango de temperatura de 548-598 K y una presión de 18MP, sobre catalizadores comerciales de $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. El resultado de este estudio dio las expresiones de velocidad de reacción para las dos reacciones paralelas del dibenzotiofeno para convertirse en biciclohexano. Al igual que en el caso de tiofeno y benzotiofeno se proponen dos sitios activos uno para la hidrogenólisis y otro para la hidrogenación, que el H_2S es un inhibidor a la reacción y las velocidades de reacción consideran que el paso de reacción determinante es la reacción en la superficie pero contradice la teoría de que el hidrogeno es adsorbido atómicamente, si se ve desde el punto de los mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. Este estudio tiene el inconveniente de que la presión a la cual se realizó es muy alta para nuestro caso, pero esta reactivo solo es para demostrar que compuestos tan pesados como este son poco probables encontrarlos en mezcla de naftas.

Esquema de reacción

El esquema de reacción contempla dos series en paralelo las cuales parten del dibenzotiofeno para llegar al ciclohexilbenceno. A la ruta en donde ocurre primero el rompimiento de los enlaces C-S se le llama ruta de hidrogenólisis y a la ruta en donde primero se hidrogena al anillo bencénico se llama de hidrogenación.

Figura 4. Esquema de reacción para dibenzotiofeno



Con el mecanismo de reacción propuesto a continuación se presentan las expresiones de rapidez de reacción para las dos vías de reacción:

a) Ruta de hidrogenólisis del dibenzotiofeno:

$$r_{HY} = \frac{kK_{DT}K_{H_2}C_{DT}C_{H_2}}{(1 + K_{DT}C_{DT} + K_{H_2S}C_{H_2S})^2(1 + K_{H_2}C_{H_2})}$$

r_{HY} = rapidez de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

k = constante de velocidad de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

K_{DT} = constante de adsorción de dibenzotiofeno, (L/gmol)

K_{H_2} = constante de adsorción de hidrogeno, (L/gmol)

K_{H_2S} = constante de adsorción de H_2S , (L/gmol)

C_{DT} , C_{H_2} , C_{H_2S} = Concentración de las especies dibenzotiofeno (DT), hidrogeno (H) y H_2S (gmol/L)

b) Ruta de hidrogenación de dibenzotiofeno:

$$r_{HD} = \frac{k_{HD}K'_{DT}C_{DT}C_{H_2}}{1 + K'_{DT}C_{DT}}$$

$$k_{HD} = k'K'_{H_2}$$

r_{HD} = rapidez de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

k_{HD} = constante de velocidad de reacción, (mol/(g de catalizador *s))

K'_{DT} = constante de adsorción de dibenzotiofeno, (L/gmol)

K'_{H_2} = constante de adsorción de hidrogeno, (L/gmol)

C_{DT} , C_{H_2} = Concentración de las especies dibenzotiofeno (DT), hidrogeno (H), (gmol/L)

La siguiente tabla muestra los valores para las constantes de rapidez de reacción y de adsorción para el dibenzotiofeno, todas las constantes fueron dadas en función de la temperatura de reacción por medio de la ecuación Arrhenius:

$$k = k' \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad , \quad K = K' \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)$$

Tabla 6. Parámetros cinéticos para dibenzotiofeno

	K' o k' ^a	E o (-ΔH) ^b
k	7.87e5	30.1
K _{DT}	0.18	4.5
K _{H2}	4E3	-8.4
K _{H2S}	0.70	-5.3
K _{HD}	4.22e4	27.7
K' _{DT}	2.0	1.4

Hidrocracking

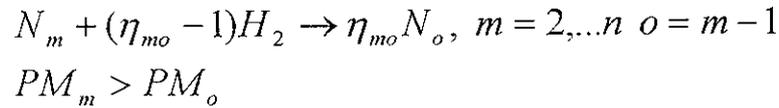
Las reacciones de hidrocracking en la simulación de la planta de HDS pueden ser explicadas considerando dos aspectos: uno, en las condiciones de operación del reactor el catalizador CoMo/γ-Al₂O₃ no solo promueve reacciones de HDS sino también presenta actividad con respecto a los hidrocarburos, facilitando la ruptura de enlaces de C-C, teniendo como consecuencia la desaparición de hidrocarburos pesados y la aparición de hidrocarburos ligeros; el otro aspecto consiste en el alto consumo de hidrógeno el cual las reacciones de HDS por si solas no pueden explicar.

En el modelado del hidrocracking se hace uso de pseudocomponentes, es decir de compuestos que representan a los compuestos reales que se encuentran en la mezcla, y que son una gama de compuestos con características similares (PM, propiedades termodinámicas,...etc.) representados por un solo pseudocomponente en la simulación. A este proceso se le denomina lumping (en ingles). Esto se hace para facilitar los cálculos y disminuir la cantidad de compuestos que se manejan en una mezcla de hidrocarburos. Por lo consiguiente no se puede buscar un esquema de reacción y cinética específica para un componente bien definido.

^a K' (L/gmol) y k' (gmol/(g de catalizador*s))

^b (kcal/gmol)

Consecuentemente, para modelar las reacciones de hidrocracking se utilizó esquema de reacción simplificado en donde un reactivo solamente puede descomponerse en un solo producto, que es precisamente el de menor peso molecular que le sigue,



Las expresiones de velocidad de reacción se proponen de primer orden con respecto al reactivo y una dependencia del tipo Arrhenius.

$$r_{ij} = k_{i,j} C_i \quad k_{i,j} = A_{i,j} e^{\left(-\frac{E_{i,j}}{RT} \right)}$$

Para el valor de los parámetros cinéticos de $E_{i,j}$ se utilizó una ecuación reportada en la literatura [ref. 6] la cual es una función de los pesos moleculares de los hidrocarburos reaccionantes y del hidrocarburo resultante. La función es la siguiente:

$$E_{i,j} = b_0 + b_1 \left(\frac{PM_i}{PM_j} \right)^{b_2}$$

Con los siguientes valores para las constantes:

Tabla 7. Parámetros de ajuste para la energía de activación en hidrocracking.

b0	2.37E+04
b1	3.99E+02
b2	0.1437

Para los valores del factor preexponencial se fueron ajustando para obtener las conversiones deseadas. Los valores de los parámetros cinéticos y los esquemas de reacción para estas reacciones de hidrocracking son totalmente empíricos, no tienen ningún significado mas allá de permitir hacer un modelamiento de los datos obtenidos por PEMEX. Por parte de la literatura consultada existen dos referencias [ref.6, 12] las cuales hacen un procedimiento parecido; la primera propone un esquema de reacción mas complejo y la

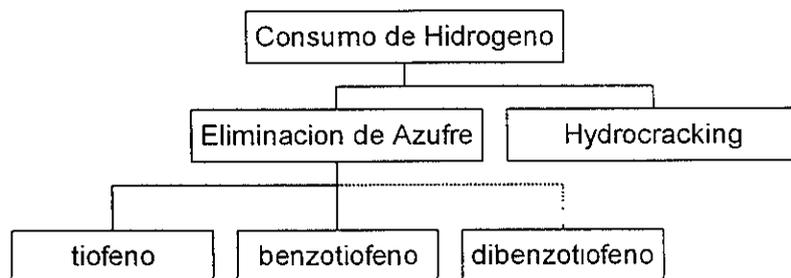
energía de activación como el factor preexponencial son función de los hidrocarburos reaccionantes, este estudio se hizo para una mezcla de hidrocarburos mas pesada (diesel). La segunda referencia hace el estudio completo para una mezcla ligera pero no reporta todos los parámetros cinéticos obtenidos por lo tanto su aplicación no es posible. La función que describe a las energías de activación se extrajo de la primera referencia. Por parte de los factores preexponenciales estos se tuvieron que ajustar para conseguir un ajuste a los datos reportados por PEMEX. En la Tabla 8 se presentan los utilizados para modelar a las reacciones de hidrocracking.

Tabla 8. Energías de activación y coeficientes preexponenciales para hidrocracking.

Reaccion	Eij (kcal/gmol)	Aij (m ³ /gcat*s)
C2-C1	24.18	1.14E+01
C3-C2	24.17	2.53E+01
C4-C3	24.16	3.37E+01
C5-C4	24.16	1.81E+00
C6-C5	24.15	4.22E+00
nbp189-C6	24.15	2.89E+00
nbp235-nbp189	24.15	4.58E+00
nbp271-nbp235	24.15	2.29E+00
nbp306-nbp271	24.15	1.69E+00
nbp341-nbp306	24.15	1.14E+00
nbp377-nbp341	24.15	5.42E-01

En la Figura 5 se presenta el diagrama de consumo de hidrogeno desglosando los elementos que los componen.

Figura 5. Esquema para consumo de hidrogeno.



REACTOR DE “FLUJO TAPON” (PFR)

Las reacciones de la planta de HDS de naftas ocurren en un reactor de lecho empacado. Este lecho empacado contiene al catalizador de $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ en forma de esferas, el cual cataliza a las reacciones de HDS e hidrocracking, para evitar problemas de transferencia de masa dentro del reactor el tamaño de las esferas es pequeño ($d_s = 5.2 \times 10^{-3}$ ft.) comparado a la longitud del reactor ($z = 21$ ft.). La corriente de alimentación al reactor es precalentada por un tren de precalentamiento el cual intercambia calor con el efluente del reactor después pasa a un horno de calentamiento a fuego directo el cual tiene como objetivo evaporizar completamente a la nafta y llevarla a la temperatura de reacción (596°F). La evaporización total de la nafta tiene por objetivo evitar problemas de transferencia de masa en la interfase y solo manejar dos fases dentro del sistema de reacción, estas dos fases consisten en la fase gaseosa y el catalizador sólido empacado. Para el modelamiento del reactor se plantearán las ecuaciones para un reactor de flujo tapón pseudohomogeneo, no adiabático. Estas dos características nos llevan a plantear las ecuaciones de balance de materia, las cuales van a estar aunadas al balance de energía. El resultado de este conjunto de ecuaciones son los perfiles de composición de cada compuesto reaccionante y el perfil de temperatura de reacción.

Este modelo considera que los transportes de energía y materia se dan por procesos convectivos en la dirección axial. El único mecanismo de transporte que está operando es el convectivo con un perfil de velocidades plano. En condiciones de estado estacionario las ecuaciones de balance de materia tienen la forma siguiente:

$$-u_s \frac{dC_A}{dz} = \rho_B \sum_{j=1}^m r_{j,A}$$

$$C_A = C_{A,0} \quad @ \quad z = 0$$

donde, de la ecuación general de conservación de masa se consideran los términos de reacción y convección. Los otros dos términos involucrados en la ecuación general de conservación de masa son despreciados por las razones que el análisis se está haciendo a estado estacionario y el término de difusión es despreciable con respecto a los términos de

reacción y de convección. Se debe de plantear un balance de conservación de materia por cada compuesto presente en la mezcla.

La ecuación de conservación de energía correspondiente para reactor pseudohomogeneo no adiabático de flujo tapón es de la siguiente forma:

$$\rho_g u_s C_p \frac{dT}{dz} = \rho_B \sum_{j=1}^m (-\Delta H_j) r_{j,A} - 4 \frac{U}{d_t} (T - T_r)$$

$$T = T_0 \quad @ \quad z = 0$$

donde considera la existencia de tres términos importantes. Contiene el termino de arrastre de energía por medio de convección en el sentido axial, el termino de generación de energía debido a la existencia de una reacción química y el termino de disipación de energía por el medio que rodea al sistema (enfriamiento por la paredes) el cual obedece la ley de enfriamiento de Newton.

Por parte de las resistencias en la inter/intra fase de masa y energía se pudieron haber considerado para el modelamiento del reactor PFR-100 con la finalidad de tener un modelo mas realista con respecto a los fenómenos que ocurren en la vecindad de la partícula catalítica que se encuentra empacada en el reactor, pero para la simplificación de la solución matemática y al reducción del tiempo de calculo estas resistencias fueron consideradas despreciables ($\eta=1$). Carberry [ref. 5] hace un análisis a través de números adimensionales (Bi_m, Bi_h) en donde sugiere para sistemas gas-sólido: (1) la mayor parte de los problemas de transferencia de energía se encontrara en la interfase (fase fluida), mientras (2) los mayores problemas de transferencia de masa se encontraran en la intrafase (fase sólida). Este análisis esta en acuerdo con lo publicado por Gates [Chemistry of Catalytic Proceses] donde afirma que no hay problemas de transferencia de masa en la parte fluida para varias mezclas de hidrocarburos bajos condiciones de operación en el proceso de hidrodesulfuración y por parte de la resistencia de energía en la fase fluida es despreciable ya que los tiempos de residencia son muy pequeños haciendo que la capa limite sea pequeña. Pero en contraste con la resistencia dentro de la partícula catalítica (intrafase) los efectos si son importantes para mezclas de hidrocarburos de destilados ligeros hasta pesados; esto se debe al bajo flux de moléculas de hidrógeno o compuestos sulfurados a los sitios cataliticos comparado con la rapidez de las reacciones. Adlington y Thompson

estimaron factores de efectividad de 0.6 para un proceso de hidrodesulfurización a 415°C y 35 atm. Esto significa que la corrección en el término de reacción estaría multiplicado por un factor de 0.6.

En el simulador HYSYS las ecuaciones de balance de materia y energía para un reactor de tipo PFR ya están consideradas, en estas ecuaciones el usuario introduce las expresiones de cinéticas que se quieren modelar sin tener que programar una subrutina que resuelva las ecuaciones diferenciales por medio de algún método numérico. Para la solución de las ecuaciones diferenciales las condiciones de frontera utilizadas son los valores de la corriente que alimenta al reactor PFR-100. Los datos físicos del reactor también son necesarios para la solución de las ecuaciones diferenciales resultantes, estos datos al igual que todos los utilizados en el modelamiento de PHN vienen reportados por PEMEX y en la pg. 50 están reportados los datos utilizados para el modelamiento del reactor.

Con respecto a los datos reportados en el reactor PRF-100 existe una diferencia de temperaturas negativa ($T_{\text{salida}} - T_{\text{entrada}}$) de 10° F; pero todas las reacciones involucradas son exotérmicas. Por lo que se considera que el reactor es no adiabático y que existen pérdidas de energía. HYSYS para resolver un reactor no adiabático requiere de otro parámetro, el cual puede ser la cantidad total de calor transferido o la temperatura de salida del reactor. Esta condición adicional que requiere se debe a que aunado a los balances de materia y energía para el reactor también resuelve el perfil de temperatura de la corriente de enfriamiento. Cuando HYSYS se le alimenta el dato de temperatura de salida del reactor, el programa considera que existe un perfil lineal de temperatura entre la alimentación y el efluente y resuelve para la temperatura de enfriamiento la cual dependería de la posición axial con un coeficiente de transferencia de energía (U) constante. Esta consideración de tener un perfil lineal en nuestro sistema no es mala ya que las reacciones no son muy exotérmicas y existe solo un $\Delta T = 10^\circ \text{F}$. Por otro lado si se le alimenta la cantidad total de calor sustraído, HYSYS considera que la cantidad de calor sustraído es constante en toda la dirección axial. En cualquiera de las dos modalidades los resultados son muy parecidos. Con respecto a la presión HYSYS requiere también que se le alimente la presión de salida del reactor o la diferencia de presiones del reactor (ΔP); para cualquiera caso propone un perfil lineal con respecto al eje axial del reactor y para cada punto calcula las propiedades de la mezcla (viscosidad, densidad, factor z ... etc.).

DESARROLLO DEL ESQUEMA DE SIMULACION

La simulación de procesos a grandes rasgos se divide en dos grandes bloques: el primero es la declaración de los compuestos y las ecuaciones de estado que se van a utilizar para el cálculo de las diferentes propiedades termodinámicas; y el segundo es la declaración de la secuencia de operaciones unitarias a las cuales se van a someter a los compuestos declarados. Con estas dos bloques definidos se puede generar un esquema de simulación de procesos. HYSYS como simulador de procesos es bastante flexible, ya que se puede declarar el esquema de simulación y después declarar los compuestos o viceversa. Otra herramienta importante es el cálculo inmediato de los equipos sin esperar a que todo el esquema de simulación este declarado. En este capítulo se presenta la secuencia de pasos que se siguieron para desarrollar el esquema de simulación para la planta de HDS de nafta de Tula, Hidalgo. Los esquemas de simulación se presentan al final de este capítulo.

La secuencia que se siguió para generar el esquema de simulación se divide en tres bloques:

- 1) declaración de la ecuación de estado, componentes y pseudocomponentes que se encuentran en la mezcla de naftas [Ecuación de estado, compuestos y pseudocomponentes].
- 2) generación de la secuencia del esquema de simulación definiendo los parámetros de operación y de diseño de cada etapa [Esquema de Simulación].
- 3) adaptar las ecuaciones cinéticas utilizadas para simular el comportamiento de las reacciones que se dan en el reactor de HDS [Ecuaciones cinéticas].

La secuencia de generación del esquema de simulación es la manera en la cual se van a introducir los datos al simulador HYSYS. Los datos que se van a introducir serán los de diseño de la planta, los cuales están completos. A continuación se presentan la información impresa que HYSYS ofrece para cada operación unitaria, la información que se presentara a continuación lleva la secuencia con la que se genero el esquema de simulación. Esta información o datos están en ingles porque es el lenguaje que utiliza el simulador. Estos

datos son por operación unitaria por lo tanto se puede visualizar los datos que fueron introducidos para la especificación de cada operación unitaria.

1. Ecuación de estado, compuestos y pseudocomponentes

- 1.1. La ecuación de estado que se utilizó para la simulación de naftas fue la de Peng-Robinson-Stryjek-Vera PRSV, Esta ecuación que es la modificación de la ecuación original de Peng-Robinson para ser utilizada en sistemas altamente no-ideales. En nuestro caso el sistema es relativamente sencillo ya que son hidrocarburos ligeros a condiciones moderadas de temperatura y presión pero al estar utilizando compuestos con azufre se recomienda utilizar PRSV, para este tipo de simulaciones ya que arroja mejores resultados.
- 1.2. HYSYS contiene una serie de librerías compuestos puros, los cuales ya tienen todas sus propiedades definidas. De esta lista de compuestos se seleccionaron los compuestos ligeros y los compuestos con azufre, los compuestos que se seleccionaron fueron los siguientes: metano, etano, propano, butano, pentano, hexano, hidrogeno, H₂S, tiofeno, benzotiofeno, 1-buteno, etilbenceno. Como HYSYS no contiene todos los compuestos existentes y para nuestro caso el compuesto dihidrobenzotiofeno interviene en la reacción de benzotiofeno y no estaba dentro de los compuestos puros declarados se tuvo que generar un pseudocomponente con las propiedades de este compuesto al cual se llamo " thiophane* ".
- 1.3. Para la generación de los compuestos pesados se utilizó los datos de curva compuesta (TBP), peso molecular promedio, grados API y la composición de los ligeros por lo que HYSYS tiene la opción de utilizar estos datos también. Estos datos se utilizan para generar una mezcla (Assay), la cual será luego dividida en el número de cortes que se requieren o necesiten. Estos cortes son el número de pseudocomponentes que se quieren utilizar para simular los datos de curva compuesta. La curva compuesta son pruebas que se utilizan para caracterizar a una mezcla de compuestos. Para nuestro caso se utilizaron 6 pseudocomponentes (NBP[0]189*, NBP[0]235*, NBP[0]271*, NBP[0]306*, NBP[0]341*, NBP[0]377*) los cuales fueron generados en base a los datos anteriores. Todos los datos

mencionados con anterioridad corresponden a la corriente de hidrocarburos de alimentación a la planta, por lo tanto se declara la corriente de alimentación en base a estos datos. A continuación se presenta los datos que fueron introducidos al simulador:

Basic Specs sheet (Component List: Basis-1)

Name Basis-1

Property Package: PRSV
 Enthalpy Calculation Method Equation of State

Current Component List

Hydrogen	H2S	Methane
Ethane	Propane	n-Butane
n-Pentane	n-Hexane	Thiophene
1-Butene	ThioNaphtene	Thiophane*
E-Benzene	NBP[0]189*	NBP[0]235*
NBP[0]271*	NBP[0]306*	NBP[0]341*
NBP[0]377*		

General Specs sheet (Assay: Assay-1)

HYSYS Assay Oil Characterization Specs sheet
 Assay-1

Data Type. TBP

Basis LiquidVolume %
 Vacuum Distillation. Disabled
 Light Ends Status : Input Composition
 Percentage of Light Ends in Assay : 41 33
 Composition Basis : Mole %
 Light Ends Input Composition Table

Light Ends	Percent
Hydrogen	0.0000
H2S	0.0000
Methane	0 05500
Ethane	0.03700
Propane	0 2700
n-Butane	1.368
n-Pentane	24 87
n-Hexane	14.46
Thiophene	0 1500
1-Butene	0.0000
ThioNaphtene	0.10000
E-Benzene	0.0000

Bulk Properties Input Data

Molecular Weight 101.4 100.0
 Standar Density 43.18 lb/ft3

Boiling Temperature Table

Assay Percent	Temperature (F)
0.0000	25.00
10.00	86.00
30.00	155.0
50.00	201.0
70.00	261.0
90.00	340.0
100.0	395.0

Correlation Set: Default Set

Low Temp (F)	High Temp (F)	Molecular Weight	Specific Gravity
-459.7	2192	Two critical correlation 1983	Katz_Firoozabadi

General Specs sheet (Blend: Blend-1)

HYSYS Blend Specs sheet
 Blend-1

Cut Ranges. User Points
 Number of Cuts. 6

Correlations. Default Set

Low End T (°F)	High End T (°F)	Tc	Pc	W	Cp
-459.67	2192.00	Lee_Kesler	Lee_Kesler	Lee_Kesler	Lee_Kesler

Component Properties: Blend-1

Comp Name	NBP (°F)	Mol Wt.	Density (lb/ft3)	Viscosity 1 (cP)
NBP_189	189.47	99.17	42.82	0.18823
NBP_235	235.41	113.06	44.29	0.22819
NBP_271	270.93	124.64	45.26	0.26529
NBP_306	305.88	136.85	46.11	0.30786
NBP_341	341.15	150.20	46.87	0.35802
NBP_377	376.60	164.75	47.56	0.41666

Comp Name	Critical Temp (F)	Critical Press (psig*)	Accentric Fac	Watson K
NBP_189	493.26	396.11	0.31694	12.624
NBP_235	544.47	370.55	0.36152	12.486
NBP_271	582.47	349.57	0.39767	12.422
NBP_306	618.57	328.75	0.43497	12.385
NBP_341	653.83	307.97	0.47445	12.369
NBP_377	688.19	287.68	0.51599	12.368

Molar Compositions

	Blend-1
Hydrogen	0.0000
H2S	0 0000
Methane	0.000548
Ethane	0 000368
Propane	0.00269
n-Butane	0.0136
n-Pentane	0.2480
n-Hexane	0 1442
Thiophene	0.0015
1-Butene	0 0000
ThioNaphtene	0.0010
E-Benzene	0.0000
DiBZThiophene	0 0000
BiCycloHexyl	0.0000
NBP_189	0 16865
NBP_235	0.0929
NBP_271	0 0916
NBP_306	0.0859
NBP_341	0.0795
NBP_377	0.0692

*NOTA: esta es la composición de la corriente de alimentación a la planta (1) y (2)

2. Esquema de Simulación. [esquema de simulación 1]

En el esquema de simulación se deben de declarar ciertas variables indispensables para generar el esquema de simulación. En esta parte se indicarán la declaración y secuencia de estas variables, enfatizando en las mas importantes.

2.1. Corrientes de alimentación: La declaración de las corrientes de alimentación fue el primer paso; las corrientes de alimentación son las corrientes de hidrocarburos (1) y (2) y la corriente de reposición de hidrogeno.

2.1.1. Después de establecer la composición de la corriente de alimentación a la planta esta composición se asigna a cierta corriente; para nuestro caso son las corriente 1 y 2

Oil Install Information

Oil Name	Calculation Status	Install Status	Stream Name
Biend-1	Ready	Install	1,2

2.1.2. De las mismas corrientes (1) y (2) se declara la temperatura, presión y flujo de alimentación.

Basic Stream Specsheel (Material Stream: 1)

FEED TO
MIX-100 Mixer

Temperature: (°F) 100.0 Pressure: (psig*) 71.08 Molar Flow (lbmole/hr) 3600

General Stream Specsheel (Material Stream: 2)

FEED TO
MIX-100 Mixer:

Temperature: (°F) 120.0 Pressure: (psig*) 45.50 Molar Flow (lbmole/hr) 50.00

2.1.3. La corriente de alimentación de reposicion de hidrogeno (3) se declara T, P, flujo y composicion.

Full Stream Specsheel (Material Stream: 3)

FEED TO
MIX-101 Mixer

Temperature: (F) 145.9
Pressure: (psig*) 526.0
Molar Flow (lbmole/hr) 389.6

COMPONENT DATA

COMPONENTS	MOLE FRACTION		
Hydrogen	0.7835	Thiophane*	0.0000
H2S	0.0000	E-Benzene	0.0000
Methane	0.08470	DiBZThiphene	0.0000
Ethane	0.07137	BiCycloHexyl	0.0000
Propane	0.04383	NBP[0]189*	0.0000
n-Butane	0.01664	NBP[0]235*	0.0000
n-Pentane	0.0000	NBP[0]271*	0.0000
n-Hexane	0.0000	NBP[0]306*	0.0000
Thiophene	0.0000	NBP[0]341*	0.0000
1-Butene	0.0000	NBP[0]377*	0.0000
ThioNaphtene	0.0000	Total	1.0000

2.2. Sección de preparación: Se prepara la mezcla para la sección de reacción calentándola e introduciendo la cantidad de hidrogeno necesario.

2.2.1. Mezclador MIX100 y tanque acumulador de carga FA-401

General SpecsHEET (Mixer: MIX-100)

Inlet NAME	FROM OPER	Outlet NAME	TO OPER
1		10	FA-401 Tank:
2			

Basic SpecsHEET (Tank: FA-401)

Inlet NAME	FROM OPER	Outlet NAME	TO OPER
10	MIX-100 Mixer.	10/1	GA-401/R Pump

Physical Parameters
 Pressure Drop: 0.0000 psi

2.2.2. Se especifica la bomba de carga GA-401/RT y el mezclador MIX101 los cuales llevan a la mezcla al tren de precalentamiento. De la bomba se especifica la ΔP ;

Basic SpecsHEET (Pump: GA-401/R)

Inlet NAME	FROM OPER	Outlet NAME	TO OPER	Energy NAME
10/1	FA-401 Tank:	11	MIX-101 Mixer.	WGA-401

Parameters
 Adiabatic Efficiency (%). 75.00 Delta P: 493.5 psi

General SpecsHEET (Mixer: MIX-101)

Inlet NAME	FROM OPER	Outlet NAME	TO OPER
11	GA-401/R Pump	12	EA-401/AD Heat Exchanger
3			
24r	rcy Recycle		

2.2.3. Tren de precalentamiento: Consiste de dos intercambiadores de proceso y un horno, entre el intercambiador EA-401/AD y EA-402/AD existe una corriente de corte (13, 13re)

2.2.3.1. El primero en ser declarado es el EA-401/AD, se especifican las caídas de presión y el coeficiente de transefencia de calor global (UA):

Basic Specs sheet (Heat Exchanger: EA-401/AD)

Tube Side

Inlet		Outlet	
Name	17	Name	18
From Op.	EA-402/AD Heat Exchanger	To Op.	EA-403/AB Heat Exchanger

Shell Side

Inlet		Outlet	
Name	12	Name	13
From Op.	MIX-101 Mixer	To Op.	RCY-1 Recycle

Specifications

Exchanger Parameters: End Point
 Tube Side DeltaP: 10.00 psi Shell Side DeltaP: 20.00 psi Passes: Counter Current
 UA: 3.369e+05 Btu/F-hr Tolerance: 1.0000e-04

2.2.3.2 Luego el intercambiador de calor de proceso EA-402/ AD, con las mismas especificaciones que el pasado;

Basic Specs sheet (Heat Exchanger: EA-402/AD)

Tube Side

Inlet		Outlet	
Name	16r	Name	17
From Op.	PFR-100 Plug Flow Reactor	To Op.	EA-401/AD Heat Exchanger

Shell Side

Inlet		Outlet	
Name	13re	Name	14
From Op.	RCY-1 Recycle	To Op.	BA-401 Heater

Specifications

Exchanger Parameters: End Point
 Tube Side DeltaP: 10.00 psi Shell Side DeltaP: 20.00 psi Passes: Counter Current
 UA: 1.380e+06 Btu/F-hr Tolerance: 1.0000e-04

2.2.3.3. Para el horno BA-401 se especifica la caída de presión y la temperatura de salida del horno;

General Heater Specsheet (Heater: BA-401)

Inlet		Outlet		Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER	NAME
14	EA-402/AD Heat Exchanger:	15	PFR-100 Plug Flow Reactor:	QBA-401

Parameters
 Pressure Drop: 62.00 psi
 Final Temperature: 596 F

2.3. Reactor: Al reactor PFR-100 se tiene que especificar la caída de presión el grupo de reacciones involucradas y algunos parámetro físicos que se necesitan, estas especificaciones y las reacciones se explicaran mas adelante.

General Specsheet (Plug Flow Reactor: PFR-100)

Inlet		Outlet		Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER	NAME
15	BA-401 Heater:	16r	EA-402/AD Heat Exchanger:	Reactor

Physical Parameters
 Pressure Drop: 29.00 psi
 Heat Transfer : Cooling Type : Direct Q Value
 Energy Stream : Reactor

Dimensions
 Total Volume: 1425 ft³ Length: 21.00 ft Diameter: 9.295 ft Number of
 Tubes 1
 Wall Thickness: 0.01640 ft Void Fraction: 0.7400

Reaction Info
 Reaction Set: Global Rxn Set Initialize From: Previous

Integration Information
 Number of Segments: 20 Minimum Step Fraction: 1.0e-06 Minimum Step Length: 2.1e-05 ft

Catalyst Data
 Particle Diameter: 0.005217 ft Particle Sphericity: 1.000 Solid Density: 51.80 lb/ft³
 Bulk Density: 13.47 lb/ft³ Solid Heat Capacity: 59.71 Btu/lb-F

2.4. Sección de recirculación: Después de haber reaccionado la mezcla de hidrocarburos e hidrogeno se separa para recircular el hidrogeno y enviar a las naftas a la sección de fraccionamiento.

2.4.1. Se especifica el intercambiador de proceso EA 403/AB y el intercambiador EA 404/AD de servicio los cuales tienen por objetivo disminuir la temperatura. Del EA 403/AB se especifica las caídas de presión y el coeficiente de transferencia global (UA); para EA 404/AD se da a caída de presión y la temperatura de salida.

General Specsheat (Heat Exchanger: EA-403/AB)

Tube Side

Inlet		Outlet	
Name	18	Name	19
From Op.	EA-401/AD Heat Exchanger	To Op.	EA-404/AD Cooler

Shell Side

Inlet		Outlet	
Name	25	Name	26
From Op.	FA-402 Separator	To Op.	EA-405 Heat Exchanger

Specifications

Exchanger Parameters. End Point		
Tube Side DeltaP: 10.00 psi	Shell Side DeltaP: 10.00 psi	Passes: Counter Current
UA: 1.453e+05 Btu/F-hr	Tolerance: 1.0000e-04	

General Cooler Specsheat (Cooler: EA-404/AD)

Inlet		Outlet	Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER
19	EA-403/AB Heat Exchanger:	20	FA-402 Separator:
			QEA-404/AD

Parameters

Pressure Drop:	18.61 psi
Final Temperature	110 0 F

2.4.2. Los siguientes separadores FA-402 y FA-403 de fases tienen por objetivo separar el hidrogeno que se va a recircular a el reactor PFR-100. Como solo son separadores solo se especifica la caída de presión.

General Specsheel (Separator: FA-402)

Inlet		Outlet	
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER
20	EA-404/AD Cooler	21	FA-403 Separator
		25	EA-403/AB Heat Exchanger

Physical Parameters

Vessel Pressure: 327.6 psig* Pressure Drop: 0.0000 psi

General Specsheel (Separator: FA-403)

Inlet		Outlet	
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER
21	FA-402 Separator	22/G	TEE-100 Tee
		22/I	MIX-102 Mixer

Physical Parameters

Vessel Pressure: 327.6 psig* Pressure Drop: 0.0000 psi

2.4.3. La corriente de vapor de salida FA-403 se divide el gas de purga y recirculación de hidrogeno. En el divisor se especifica el flujo molar para la recirculación (23) y para el compresor se especifica la presión de salida. A la salida del compresor se encuentra otra corriente de corte (24, 24r).

General Specsheel (Tee: TEE-100)

Inlet		Outlet	
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER
22/G	FA-403 Separator	23	GB-401 Compressor
		22	VLV-100 Valve

Parameters

Valve Control: Multiple Stream
Molar Flow of 23 (lbmole/hr) 1488

General Specsheel (Compressor: GB-401)

Inlet		Outlet		Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER	NAME
23	TEE-100 Tee	24	rcy Recycle	WGB-401

Parameters

Pressure of 24 (psig*) 507.17
Adiabatic Eff 75.00

2.5. Sección de estabilización y fraccionamiento: Consiste en separar los productos para cumplir con las especificaciones requeridas por los procesos siguientes. La corriente de hidrocarburo pasa por dos torres de destilación una desbutanizadora y la otra desisohexanizadora.

2.5.1. Apartir de aquí se considera la sección de estabilización y fraccionamiento. Para la corriente de líquidos de salida del separador FA-402 intercambian calor en EA 403/AB el cual ya fue especificado, después intercambia calor en EA-405, el cual es de proceso ya que se combina con los fondos de la torre de destilación DA-402. Se especifican las caídas de presión y el coeficiente global de transferencia (UA).

General Specsheat (Heat Exchanger: EA-405)

Tube Side			
Inlet		Outlet	
Name	63	Name	5
From Op.	GA-405/R Pump	To Op.	
Shell Side			
Inlet		Outlet	
Name	26	Name	27
From Op	EA-403/AB Heat Exchanger	To Op.	RCY-2 Recycle

Specifications

Exchanger Parameters: End Point

Tube Side DeltaP: 10.00 psi

Shell Side DeltaP 10.00 psi

Passes: Counter Current

UA: 1.783e+05 Btu/F-hr

Tolerance: 1.0000e-04

2.5.2. A la salida del intercambiador EA-405 se tiene otra corriente de corte (27,27re), esta corriente se mezcla con los líquidos de el tanque separador FA-403 para convertirse en la corriente 28, pasa por un tanque separador el donde se suman las caídas de presión de la línea por lo que se especifica la ΔP . De aquí los vapores pasan por EA-406/AB el cual es un intercambiador de servicio al cual se le especifica la temperatura de salida y ΔP , para luego pasar otro separador FA-405 el cual no tiene caída de presión. A continuación se presentan al intercambiador EA-406/AB y la tanque FA-403;

Basic Specs sheet (Separator: FA-404)

Inlet		Outlet	
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER
28	MIX-102 Mixer.	29	EA-406/AB Cooler.
		30	GA-408/R Pump

Physical Parameters

Vessel Pressure 89.61 psig* Pressure Drop 218.1 psi

General Cooler Specs sheet (Cooler: EA-406/AB)

Inlet		Outlet		Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER	NAME
29	FA-404 Separator.	32	FA-405 Separator	QEA-406/AB

Parameters

Pressure Drop: 10.00 psi
 Final Temperature: 100.0 F

2.5.3. Los líquidos de los separadores FA-403 y FA-405 pasan por bombas que los llevan a la presión de entrada de la torre de destilación desbutanizadora DA-401, a continuación se presentan las dos bombas a las cuales se especifican la ΔP .

Basic Specs sheet (Pump: GA-408/R)

Inlet		Outlet		Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER	NAME
30	FA-404 Separator.	31	MIX-103 Mixer.	WGA-408/R

Parameters

Adiabatic Efficiency (%): 75.00 Delta P 152 psi

Basic Specs sheet (Pump: GA-409/R)

Inlet		Outlet		Energy
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER	NAME
35	FA-405 Separator.	36	MIX-103 Mixer:	WGA-
409/R				

Parameters

Adiabatic Efficiency (%) 75.00 Delta P 162.0 psi

2.5.4 Las corrientes de salida de las dos bombas anteriores se juntan para formar la corriente 37 la cual entra a la torre DA-401. En la parte inferior de la torre DA-401 el flujo se divide en dos antes de entrar al reevaporador parcial, esta división lleva a simular la torre de diferente manera ya que se tendrá que especificar una recirculación y el horno por separado y no la torre como un solo ente que contenga también el reevaporador. Para llevar a cabo esta tarea se utilizaron los subespacios de simulación los cuales se manejan como ventanas de la misma rutina de simulación. Dentro de la ventana de simulación se encuentran la columna un separador de flujo, el horno BA-402 y la recirculación la cual esta puesta antes de que el flujo entre a la columna. [esquema de simulación 2]

General Specs Sheet (Column Sub-Flowsheet: DA 401/1@TPL1)

Inlet			Outlet		
NAME	STAGE	FROM OPER	NAME	STAGE	TO OPER
37	15__DA 401 C	37 Material Stream:	47	28__DA 401 C	TE-100 Tee
49	28__DA 401 C	RCY-4 Recycle:	QEA-407 AB	FA 406	
			43/1	FA 406	43
			40/1	FA 406	40

General Parameters

Sub-Flow Sheet: DA 401/1 (COL3)

Number of Stages 28

Column Solving Algorithm: HYSIM Inside-Out

Solving Options

Maximum Iterations: 1.000e+04

Equilibrium Error Tolerance: 1.000e-05

Heat/Spec Error Tolerance: 0.0005000

Save Solutions as Initial Estimate: On

Super Critical Handling Model: Simple K

Trace Level: Low

Init from Ideal K's: Off

Initial Estimate Generator Parameters

Iterative IEG (Good for Chemicals): Off

Acceleration Parameters

Accelerate K Value & H Model Parameters: Off

Damping Parameters

Azeotrope Check: Off

Fixed Damping Factor: 1.000

Specifications Summary

	Specified	Active	Estimate
Reflux Ratio	3.500	On	On
Distillate Rate	64.76 lbmole/hr	Off	On
Reflux Rate	474.9 lbmole/hr	Off	On
Vap Prod Rate	70.95 lbmole/hr	Off	On
Btms Prod Rate	1.278e+04 lbmole/hr	Off	On
Temperature	100 O F	On	On

Sub-Flowsheet

ESQUEMA DE SIMULACION

Feed Streams			Product Streams		
Internal Stream	External Stream	Transfer Basis	Internal Stream	External Stream	Transfer
37	37 @TPL1	P-H Flash	47	47 @TPL1	P-H Flash
49	49 @TPL1	P-H Flash	QEA-407 AB	QEA407AB/1 @TPL1	None Req'd
			43/1	43 @TPL1	P-H Flash
			40/1	40 @TPL1	P-H Flash

2.5.5. Los fondos de la torre DA-401 pasan por una válvula de descompresión. A la válvula se define el ΔP .

General Specsheat (Valve: VLV-103)

Inlet		Outlet	
NAME	FROM OPER	NAME	TO OPER
50	DA-401 Column Sub-Flowsheet:	51	DA-402 Column Sub-Flowsheet:

Physical Properties
 Pressure Drop: 214.9 psi

2.5.6. Después de la válvula la corriente entra a la segunda torre de destilación desisohexanizadora DA-402, la cual tiene un condensador total. [esquema de simulación 3]

General Specsheat (Column Sub-Flowsheet: DA-402/1@TPL2)

Inlet			Outlet		
NAME	STAGE	FROM OPER	NAME	STAGE	TO OPER
59	32__DA402	RCY-5 Recycle:	56	32__DA402	TE-100 Tee:
51	26__DA402	51 Material Stream:	QEA-408AD	FA-407	
			8/1	FA-407	8/1

General Parameters
 Sub-Flow Sheet: DA-402/1 (COL4) Number of Stages: 32

Column Solving Algorithm: HYSIM Inside-Out

Solving Options
 Maximum Iterations: 1.000e+04
 Equilibrium Error Tolerance: 1.000e-05
 Heat/Spec Error Tolerance: 0.0005000
 Save Solutions as Initial Estimate: On
 Super Critical Handling Model: Simple K
 Trace Level: Low
 Init from Ideal K's: Off
 Initial Estimate Generator Parameters
 Iterative IEG (Good for Chemicals): Off

Acceleration Parameters
 Accelerate K Value & H Model Parameters: Off

Damping Parameters
 Azeotrope Check: Off
 Fixed Damping Factor: 1.000

Specifications Summary

ESQUEMA DE SIMULACION

	Specified Value	Active	Estimate
Reflux Ratio	2.000	Off	On
Distillate Rate	1580. lbmole/hr	Off	On
Reflux Rate	3156. lbmole/hr	Off	On
Btms Prod Rate	4130. lbmole/hr	On	On

Sub-Flowsheet

Feed Streams			Product Streams		
Internal Stream Basis	External Stream	Transfer Basis	Internal Stream	External Stream	Transfer
59	59 @TPL2	P-H Flash	56	56 @TPL2	P-H Flash
51	51 @TPL2	P-H Flash	QEA-408AD 8/1	QEA-408AD @TPL2 8/1 @TPL2	None Req'd P-H Flash

2.5.7. Después de la torre DA-402 el producto terminado es dividido y dependiendo a donde se manda serán las especificaciones de temperatura y presión. Los últimos equipos en ser especificados son 4 bombas y un intercambiador.

Basic Specsheat (Pump: GA-407/R)

Inlet NAME	FROM OPER	NAME	Outlet TO OPER	Energy NAME
8/1	DA-402 Column Sub-Flowsheet:	8/2	TEE-101 Tee	WGA-407/R

Parameters
Adiabatic Efficiency (%): 75.00 Delta P: 34.31 psi

Basic Specsheat (Pump: GA-406/R)

Inlet NAME	FROM OPER	NAME	Outlet TO OPER	Energy NAME
65/1	TEE-102 Tee	6y7		WGA-406/R

Parameters
Adiabatic Efficiency (%): 75.00 Delta P: 46.00 psi

Basic Specsheat (Pump: GA-405/R)

Inlet NAME	FROM OPER	NAME	Outlet TO OPER	Energy NAME
61/1	TEE-102 Tee:	63	EA-405 Heat Exchanger.	WGA-405/R

Parameters
Adiabatic Efficiency (%): 75.00 Delta P: 315.6 psi

 Basic Specsheat (Pump: GA-403/R)

Inlet NAME	FROM OPER	NAME	Outlet TO OPER	Energy NAME
44	E-100 Cooler	4		WGA-403/R

Parameters

Adiabatic Efficiency (%)	75.00	Delta P	95.39 psi
--------------------------	-------	---------	-----------

3. Ecuaciones cinéticas.

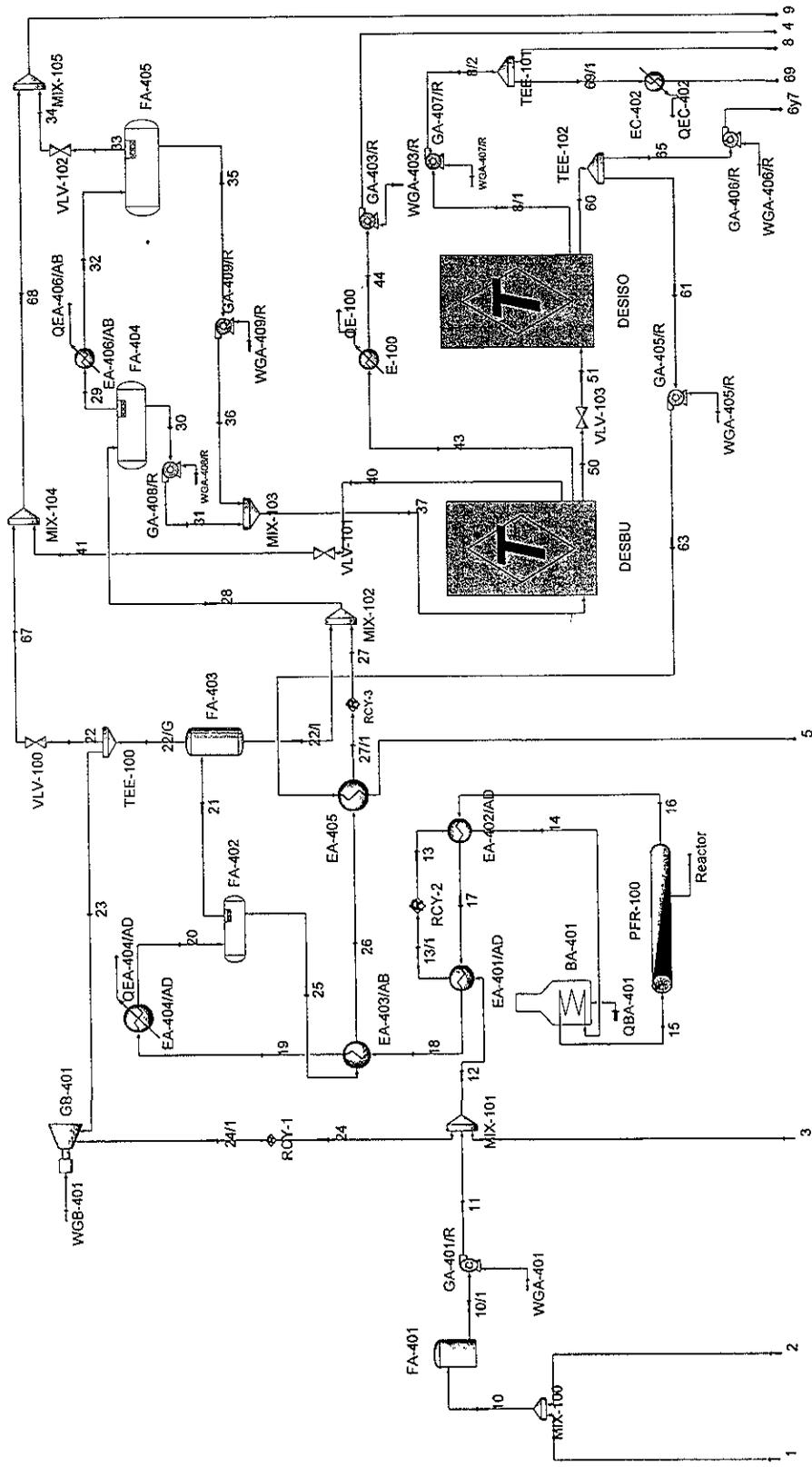
El siguiente desarrollo corresponde a la secuencia seguida para introducir las expresiones de rapidez de reacción que se desarrollaron en el capítulo de marco teórico para la simulación del reactor de HDS.

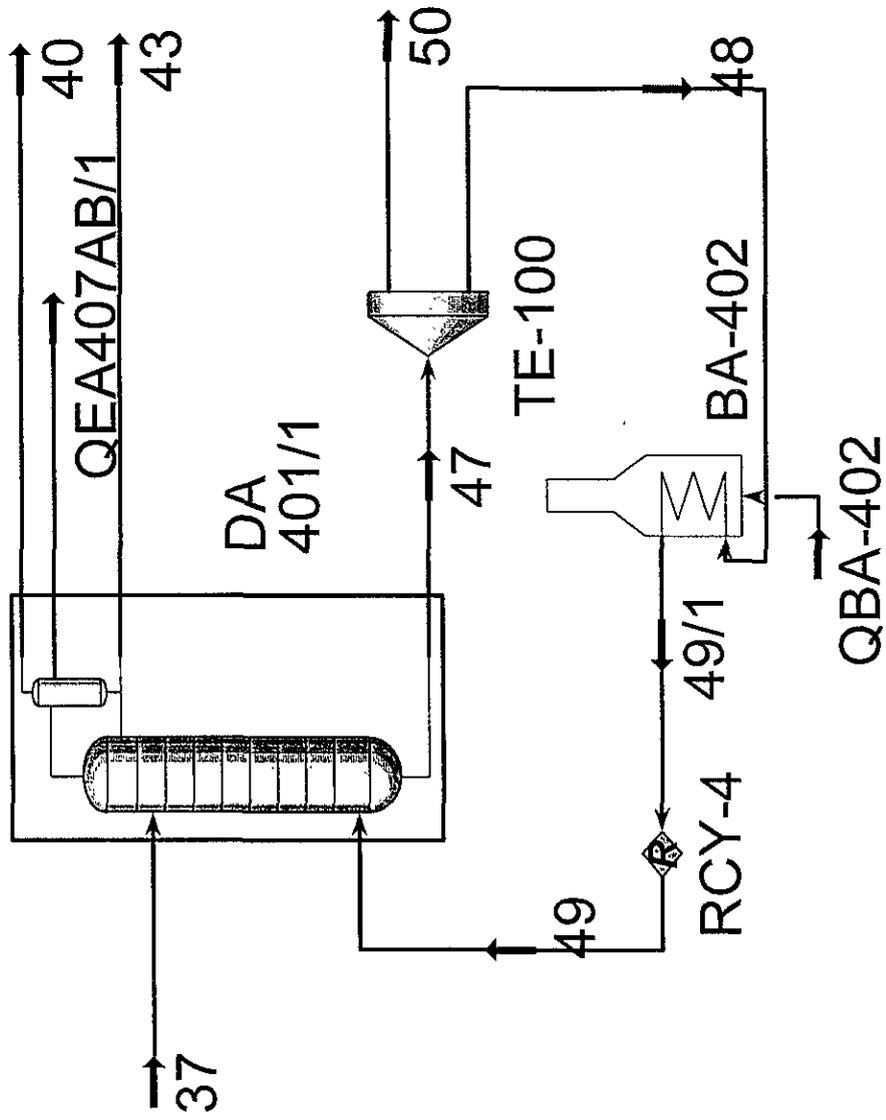
- 3.1. Para todas las reacciones de hidrocracking, por ser de primer orden, no tenían exigencia especial ya que este programa tiene módulos donde se introducen sistema de primer orden , a continuación se describen la forma general de adaptar una cinética de primer orden en HYSYS.
 - 3.1.1. Se definen los compuestos involucrados en la reacción; reactivos y productos
 - 3.1.2. Los compuestos seleccionados se les asigna el coeficiente estequiométrico correspondiente a cada uno. A los reactivos negativo y a los productos positivos.
 - 3.1.3. Del balance estequiométrico HYSYS calcula el calor de reacción
 - 3.1.4. De acuerdo con la expresión de velocidad de reacción, a cada compuesto se el puede asignar el orden que el corresponde. La reacción en general puede ser de n orden para nuestro caso los hidrocarburos reaccionantes se considero de $n=1$
 - 3.1.5. Se declaran las unidades de la rapidez de reacción, y las unidades de la concentración de los productos y reactivos.
 - 3.1.6. Para la constante de rapidez de reacción se proporciona el factor preexponencial y la energía de activación en las unidades convenientes.
 - 3.1.7. Al completar los datos necesarios HYSYS hace disponible la reacción para su uso en la simulación.
- 3.2. En las reacción de hidrosulfuración (HDS) se tuvieron que hacer extensiones al simulador HYSYS. Entre las expresiones cinéticas predispuestas por HYSYS están

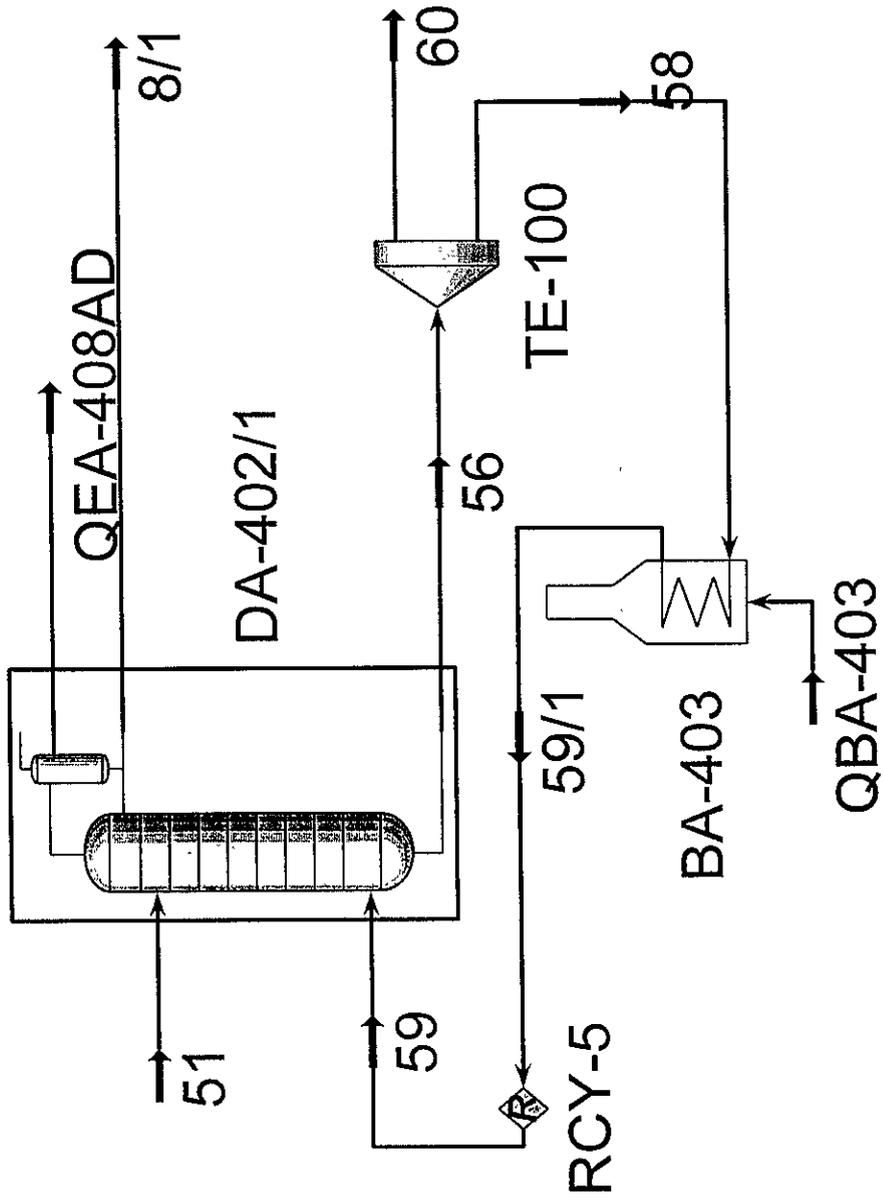
las de conversión, de equilibrio de n orden, irreversibles de n orden y Lagmuir-Hinshelwood. La expresión cinética de Lagmuir-Hinshelwood que esta considerada no tiene la opción de que el denominador este elevado a alguna potencia, tal cual sucede en las expresiones que se desarrollaron en el capítulo de marco teórico. Por este motivo se tuvieron que desarrollar programas en lenguaje Visual Basic las cuales permitieran el uso de expresiones cinéticas diferentes a las consideradas. En el apéndice A se anexa dos ejemplos de los programas realizados para generar extensiones en HYSYS; los dos ejemplos son para las reacciones que involucran al tiofeno. A continuación se da la secuencia para introducir extensiones en HYSYS.

- 3.2.1. Generación de listado en Visual Basic
- 3.2.2. Generación de archivo en Extension View Editor
- 3.2.3. Registro de extensión atravez de MS-DOS
- 3.2.4. Activación de la expresión cinética en esquema de simulación.

A continuación se presentan los esquemas de simulación que resultaron de llevar a cabo los pasos descritos anteriormente.







RESULTADOS

A continuación se presentan los resultados mas relevantes en el estudio de la planta de HDS. Aspectos importantes en este estudio fueron

- i. La identificación de los compuestos puros y pseudocomponentes presentes en la mezcla de hidrocarburos en la nafta (pg. 43-46)
- ii. La ecuación de estado que predijera de manera adecuada los equilibrios de las fases presentes en toda la planta de HDS(pg. 43)
- iii. La cinética que presentan estos compuestos a las condiciones de operación de la planta HDS (pg. 25-38)
- iv. El diagrama de flujo de la planta de HDS (pg. 60-62)

Con esta información se procedió a estructurar el modelo planteado para la simulación del sistema general. En las paginas siguientes se desglosan diferentes aspectos de importancia; tales como el comportamiento de los diferentes sistemas reaccionantes y la comparación de nuestro modelo con el conjunto de datos proporcionados por PEMEX.

Es conveniente enfatizar que para describir el sistema reaccionante se consideran dos diferentes tipos de reacciones: hidrodeshulfuración (HDS) e hidrocracking .

SISTEMA DE REACCION

El énfasis en el sistema de reacción se debe a que este es el paso limitante en la simulación de la planta de HDS. El sistema de reacción como se vio con anterioridad (pg. 19) es el proceso unitario con mas problemática ya que se presenta un gran numero de reacciones simultaneas las cuales en cierta medida no están definidas por completo. A continuación se desglosaran las reacciones que se tomaron en cuenta para simular el comportamiento que presenta el reactor (PFR-100) de la planta de HDS de Tula, Hidalgo.

HIDRODESULFURACIÓN

La hidrodesulfuración, HDS, considera a las reacciones que eliminan azufre de hidrocarburos. Como se vio con anterioridad (pg. 20) en estas reacciones se elimina el azufre de la cadena de hidrocarburo, para formar ácido sulfhídrico; uno de los reactivos de esta reacción es hidrogeno, el cual se consume en la formación tanto del ácido sulfhídrico y del hidrocarburo restante. Ya que los datos proporcionados por PEMEX no hacen referencia a los compuestos con azufre presentes en la nafta, se tuvo necesidad de escoger ciertos compuestos modelo para hacer la representación de los compuestos sulfurados. Los compuestos sulfurados tenían que cumplir con las características impuestas por la curva TBP (pg. 12); la cual corresponde a datos de un peso molecular y una temperatura de ebullición de la nafta; y también se debe satisfacer con las conversiones reportadas para el reactor (PRF-100) de la planta. Con tales restricciones, se utilizaron compuestos definidos: tiofeno y benzotiofeno, estos compuestos modelo fueron escogidos porque se ha comprobado que representan adecuadamente los compuestos sulfurados que existen en la nafta. En base a estos compuestos clave se encontraron las cinéticas correspondientes para tiofeno, benzotiofeno y dibenzotiofeno (pg. 25-36) que cumplieran con el tipo de catalizador que se esta utilizando en planta (Co-Mo/ γ -Al₂O₃) y el rango de temperatura a la cual estuviera reportada la cinética estuviera dentro del rango de temperatura de operación del reactor, con la finalidad de tener una cinética que pudiera predecir resultados de manera confiable. Se considera al dibenzotiofeno para la representación de los compuestos pesados de la nafta con azufre.

Para poder escoger cual(es) de los compuestos modelos se probaron las cinéticas de cada compuesto bajo las mismas condiciones de temperatura, presión y composición de operación del reactor PFR-100 (pg. 50) cada uno de ellos por separado. A continuación se presentan los resultados de dicha simulación (tablas 9-11) de cada compuesto; en dichas tablas están reportadas la cantidad de hidrogeno consumido, la producción de H₂S, el flujo de entrada y salida de los compuestos sulfurados y la concentración de azufre en partes por millón (ppm) en la corriente de entrada y salida del reactor.

Tabla 9. Selección de compuestos modelo. Compuesto: tiofeno. Consumo de H₂, producción de H₂S y flujos de entrada y salida para escoger a compuestos modelo en HDS.

Tiofeno	lbmol/h	ppm de S
Consumo de H ₂	36.169	-
Producción de H ₂ S	9.125	-
Entrada	9.126	800
Salida	0.001	0.026

Tabla 10. Selección de compuestos modelo. Compuesto: benzotiofeno. Consumo de H₂, producción de H₂S y flujos de entrada y salida para escoger a compuestos modelo en HDS.

Benzotiofeno	lbmol/h	ppm de S
Consumo de H ₂	27.400	-
Producción de H ₂ S	9.124	-
Entrada	9.126	800
Salida	0.002	0.366

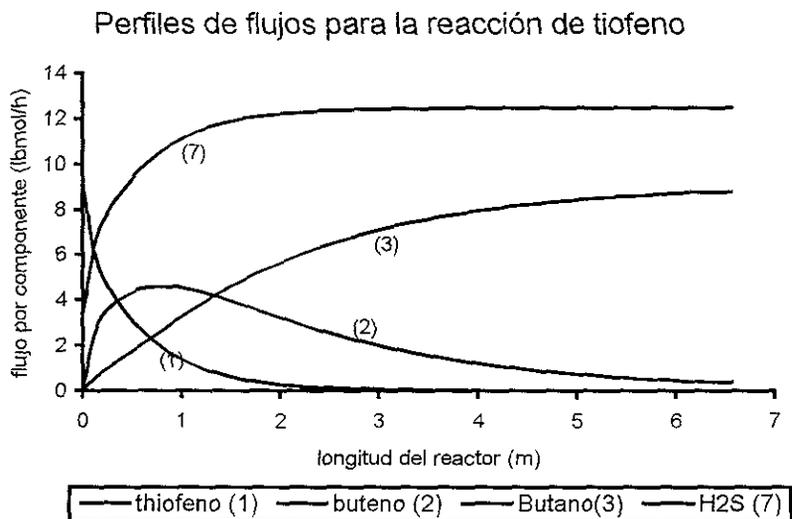
Tabla 11. Selección de compuestos modelo. Compuesto: dibenzotiofeno. Consumo de H₂, producción de H₂S y flujos de entrada y salida para escoger a compuestos modelo en HDS.

Dibenzotiofeno	lb mol/h	ppm de S
Consumo de H ₂	0.316	-
Producción de H ₂ S	0.039	-
Entrada	9.126	800
Salida	9.087	760

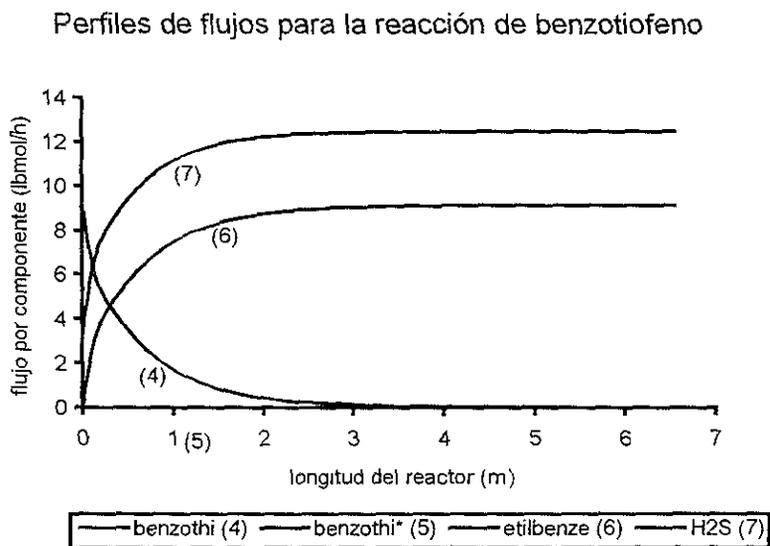
Con base a estos resultados se puede concluir que el tiofeno y el dibenzotiofeno son buenos compuestos modelo para representar a los compuestos sulfurados ya que están dentro de la curva TBP de la mezcla de nafta y reaccionan en gran medida bajo las condiciones del reactor PFR-100. No es el caso con el dibenzotiofeno esto debe a dos razones principales; la primera el grado tan pequeño de reacción que presenta bajo las condiciones de reacción del reactor PFR-100 y el segundo por el alto punto de ebullición a condiciones normales (628 °F) que presenta. Este compuesto se utiliza en mayor frecuencia para representar a los cortes más pesados (diesel) de las fracciones de petróleo.

En las gráficas siguientes se muestran los perfiles de los principales compuestos de la HDS de tiofeno (Gráfica 1) y benzotiofeno (Gráfica 2) en términos del flujo molar (lbmol/h) de cada componente en función de la posición del reactor (longitud, m).

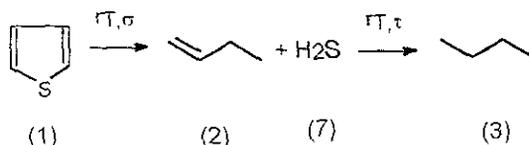
Gráfica 1. Perfiles de flujo para compuestos que se involucran en la reacción de HDS de tiofeno.



Gráfica 2. Perfiles de flujo para compuestos que se involucran en la reacción de HDS de benzotiofeno.

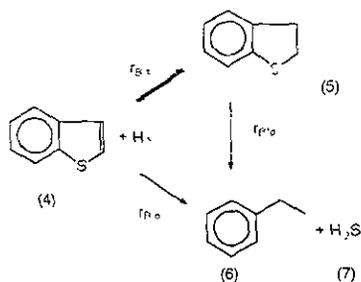


Para el caso del tiofeno (gráfica 1), la reacción que sufre el tiofeno en presencia del catalizador e hidrógeno es la siguiente.



en dicha gráfica se puede observar la tendencia de la formación de un producto intermedio (buteno), enseguida de su eliminación para la formación del producto final (butano); también se puede ver que la tendencia de eliminación de tiofeno es alta porque el 95% de su eliminación se da en los primeros 2 metros de longitud del reactor el cual tiene una longitud total de 6.5 m. También es claro que en las condiciones de reacción simuladas las dos velocidades de reacción: $r_{T,\sigma}$ $r_{T,\tau}$ son semejantes, ya que se observa la formación del producto intermedio (buteno).

Por lo que respecta a la reacción que sufre el benzotiofeno, el esquema de reacción generalmente reportado es el siguiente:



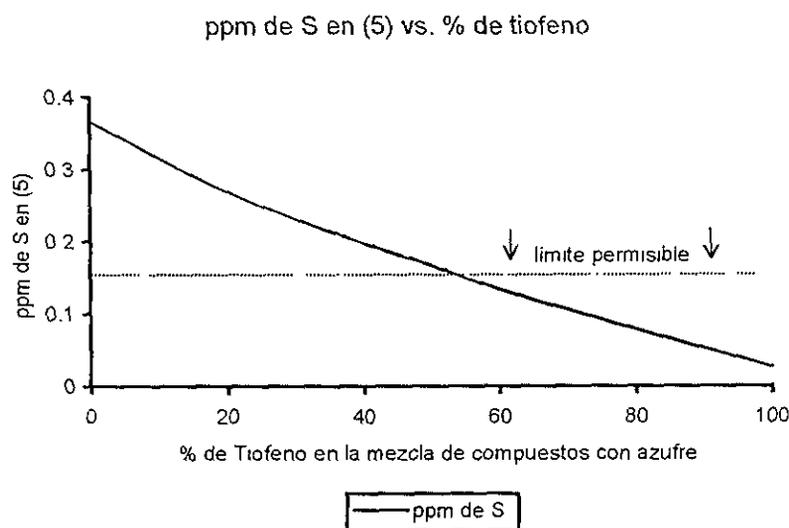
De acuerdo con este esquema y la Gráfica 2, se puede observar que la mayor parte de la reacción se da por la vía de formación directa ((4)-(6)), con una mínima presencia del componente (5). El componente (5) no se llega a observar en la gráfica porque es 3 ordenes de magnitud menor.

Estos resultados permiten concluir que tanto tiofeno como benzotiofeno pueden utilizarse como compuestos modelos para simular a los compuestos sulfurados de la mezcla de nafta que maneja la planta de HDS de Tula, Hidalgo; ya que satisfacen las dos

restricciones propuestas: 1) que tuvieran una alta conversión bajo las condiciones de operación del reactor PFR-100; y 2) que cumplieran con la curva TBP de la nafta. Ahora resta especificar que porcentaje se utilizara para representar a los compuestos sulfurados, para utilizar una mezcla de ambos para representar los compuestos sulfurados.

Como criterio de selección para escoger el porcentaje de tiofeno y benzotiofeno se utilizara un parámetro de calidad que debe de cumplir el producto de la planta: a la salida de la planta la cantidad de azufre debe ser < 0.15 ppm de azufre. Este es el parámetro de calidad que debe tener en la corriente (5), ver diagrama de proceso pg. 60. Con base a esta restricción, se simuló la planta de HDS considerando diferentes mezclas de tiofeno y benzotiofeno en la corriente de entrada (1) para ver cual de ellas cumplía con el requisito de proporcionar 0.15ppm de azufre en la corriente de salida (5). En la gráfica 3 se presentan los resultados de dichas simulaciones en términos de la cantidad de azufre en la corriente (5) en ppm de azufre en función del porcentaje de tiofeno en mezcla de entrada (0% significa que todos los compuestos sulfurados están representados por benzotiofeno y 100 % se refiere que todos los compuestos sulfurados están representados por tiofeno). Adicionalmente, en la Gráfica 3 se incluye una línea horizontal para representar el limite permisible de cantidad de azufre en la corriente (5).

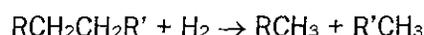
Gráfica 3. Porcentaje de tiofeno en la mezcla de compuestos sulfurados.



De los resultados anteriores se puede observar que una mezcla de tiofeno-dibenzotiofeno a porcentajes de tiofeno (> 60%), cumple con los parámetros de calidad propuestos para el producto de la nafta en la salida de la planta. Por lo tanto para modelar los compuestos de azufre de la corriente (1) se considero una mezcla de 40% benzotiofeno y 60% tiofeno.

HIDROCRACKING

Cuando se hace referencia a hidrocracking, se consideran reacciones donde se da la ruptura de un hidrocarburo para formar otros hidrocarburos de menor peso molecular (hidrogenolisis de hidrocarburos) (pg. 15) con la adición de hidrogeno; por ejemplo:



En este trabajo, las reacciones de hidrocracking tienen como objetivo simular el comportamiento de la mezcla de hidrocarburos bajo las condiciones de operación del reactor PRF-100. Como se mencionó anteriormente (pg. 36) la cinética para representar las reacciones de hidrocracking serán modeladas junto con un modelo de reactor de flujo tapón (pg. 39) no adiabático, no isotérmico.

Para la mezcla de nafta en cuestión se utilizaron 12 compuestos modelo para representar la gama de hidrocarburos reales. Estos compuestos se dividen en dos grupos: los ligeros representados por compuestos bien definidos: metano, etano, propano, butano pentano, hexano; y los compuestos pesados, representados por pseudocomponentes, correspondientes a cortes que se generan en base a la curva TBP, y que en este caso son 6: NBP[0]189*, NBP[0]235*, NBP[0]271*, NBP[0]306*, NBP[0]341*, NBP[0]377* (pg. 45).

Para modelar las reacciones de hidrocracking en un reactor de flujo tapón, no isotérmico no adiabático (PFR-100) se utilizó la cinética con las características siguientes:

- i. cinética de primer orden para el hidrocarburo reaccionante
- ii. La energía de activación y el factor preexponencial ajustados para obtener conversiones deseadas.

Para analizar los esquemas de reacción y sus modelos cinéticos correspondientes planteados se utilizaron los dos parámetros siguientes:

1. Conversión por componente. La conversión por componente se define en función de los flujos de entrada y salida por componente. Es conveniente mencionar que la mayoría de los compuestos (C2-n341) tienen la dualidad de reactivo/producto, dependiendo de la reacción que se considere en el esquema cinético planteado.

Por lo tanto la conversión se definió como:

$$x_i = abs \left(1 - \frac{F_i}{F_{0,i}} \right)$$

x_i = conversión del compuesto i

F_i = flujo molar del compuesto i (lbmol/h)

$F_{0,i}$ = flujo molar del compuesto i a la entrada del reactor (lbmol/h)

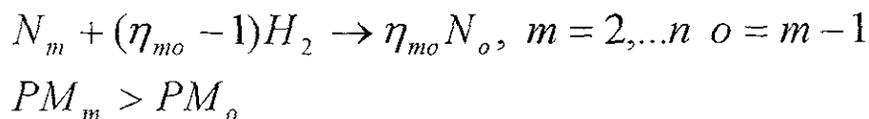
abs = valor absoluto

2. Error por conversión. Como se menciona anteriormente (pg. 6, 9), se utilizó como punto de referencia los datos que se tienen de la Planta de Tula, Hidalgo, para evaluar la capacidad de cada uno de los modelos propuestos para "reproducir" los datos reales. Con este propósito se definió el parámetro de por ciento de error definido de la manera siguiente:

$$\% \text{ de error} = abs \left(\frac{\%Conversion_{reportado,i} - \%Conversion_{mod clo i}}{\%Conversion_{reportado,i}} \right) * 100$$

A continuación se presentan los resultados para la representación de las reacciones de hidrocracking. Se evalúan en términos de su capacidad para proporcionar el mejor ajuste a los datos reportados por PEMEX es decir el conjunto de valores que obtenemos el mejor % de error.

El esquema de reacción es muy simplificado,



según el cual el hidrocarburo reaccionante solo se descompone en el correspondiente hidrocarburo de menor peso molecular; por ejemplo: pentano se descompone en butano, y butano solo en propano.

Como se menciona anteriormente (pg. 37), las ecuaciones de velocidad de reacción correspondientes a cada una de estas reacciones son de primer orden con respecto a el hidrocarburo reaccionante. La energía de activación es una función del peso molecular de los hidrocarburos reaccionantes (pg. 37) con los parámetros correspondientes a los reportados por la fuente consultada (ref. 6); y factor preexponencial se ajusto para obtener las conversiones deseadas. En la tabla 12 se presentan los valores utilizados para cada una de las energías de activación y factores preexponenciales para las diferentes reacciones.

Tabla 12. Energías de activación y coeficientes preexponenciales utilizados para hidrocracking.

Reaccion	Eij (kcal/gmol)	Aij (m ³ /gcat*s)
C2-C1	24.18	1.14E+01
C3-C2	24.17	2.53E+01
C4-C3	24.16	3.37E+01
C5-C4	24.16	1.81E+00
C6-C5	24.15	4.22E+00
nbp189-C6	24.15	2.89E+00
nbp235-nbp189	24.15	4.58E+00
nbp271-nbp235	24.15	2.29E+00
nbp306-nbp271	24.15	1.69E+00
nbp341-nbp306	24.15	1.14E+00
nbp377-nbp341	24.15	5.42E-01

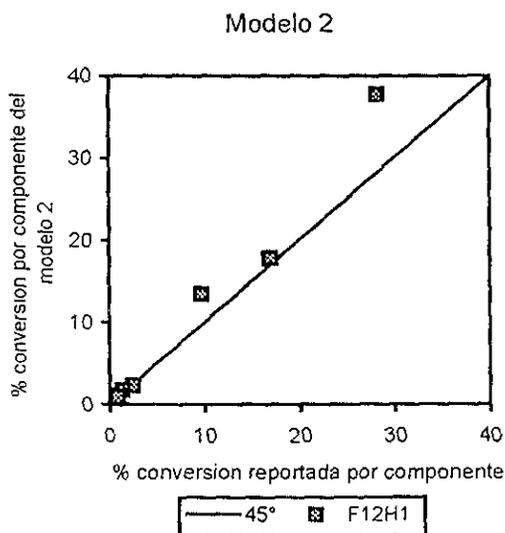
En la tabla 13 se presenta los resultados que se obtienen al aplicar el modelo

Tabla 13. Por ciento de error por conversión para hidrocracking.

Compuesto	% error por componente
C1	6.33
C2	4.61
C3	33.53
N-c4	39.06
N-c5	27.75
n-Hexane	20.09
nbp189	2.41
nbp235	12.25
nbp271	7.92
nbp306	2.46
nbp341	0.26
nbp377	1.35
error promedio global	13.17

Los resultados de la tabla 13 se complementaran con la gráfica 4 la cual presenta en la abscisa la conversión reportada por PEMEX para cada compuesto y en la ordenada está la conversión resultante del modelo planteado para cada compuesto. Si el modelo planteado es bueno los puntos resultantes deben de aparecer sobre la diagonal del de 45° ya que se esta comparando los resultados obtenidos y los datos reportados.

Gráfica 4. Comparación de la conversión por componente del modelo vs. conversión reportada por PEMEX para hidrocracking.



Los resultados de la simulación del hidrocracking se presentan en términos del % de error por componente, y las conversiones predichas vs. las reportadas por PEMEX, Tabla 13 y Grafica 4, respectivamente.

Se observa que el modelo planteado presenta en en 7 componentes errores menores al 10%, y solamente en dos exhibe un error mayor al 30%. Este modelo se ajusta muy bien para la desaparición de los compuestos pesados ($PM_i > C6$) y con un mayor error para los compuestos ligeros. El resultado de este modelo en general para hidrocracking tiene por inconveniente el hecho que el factor preexponencial no tiene una tendencia específica que se puede llegar a correlacionar a una ecuación que este en función del peso molecular esto se puede deber a la gran cantidad de compuestos presentes los cuales dan un carácter complejo a cada corte (pseudocomponente).

CONSUMO DE HIDRÓGENO

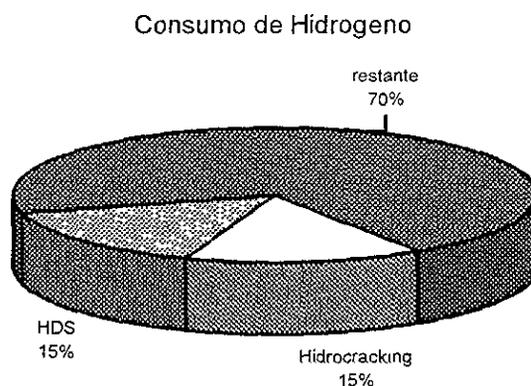
Una de las variables importantes en el proceso de hidrodesulfuración de naftas es el consumo de hidrógeno que existe en la PHN. Este consumo de hidrógeno se debe a las múltiples reacciones que se dan en el reactor de PHN tal como fue descrito anteriormente (pg. 19) y a las pérdidas por fugas en todo el proceso. Con lo que respecta a la reacciones que se dan dentro de la sección de reacción de PHN todas involucran un consumo de hidrógeno, el cual afecta al balance de materia y energía de PHN; por otro lado las pérdidas por fugas no están reportadas pero por ser un gas tan ligero y de bajo peso molecular las fugas son inevitables. En los datos proporcionados por PEMEX reportan un consumo general de hidrógeno en el reactor PFR-100 sin dar alguna explicación de las diferentes reacciones posibles. A continuación se presenta el flujo de hidrógeno consumido por los diferentes conjuntos de reacciones consideradas para modelar el comportamiento general del reactor de PHN, así como también la cantidad reportada del flujo de hidrógeno consumido en el reactor PFR-100.

Tabla 14. Consumo de hidrogeno por parte de las reacciones de HDS e hidrocracking.

Consumo de Hidrógeno (lbmol/h)		
HDS	Hidrocracking	Proceso
33 69	32.26	192 37

En la tabla anterior las dos primeras columnas representan al flujo de hidrógeno consumido por los dos conjuntos de reacciones que se utilizaron para modelar al comportamiento que tendría la nafta bajo las condiciones de reacción. La última columna presenta el consumo de hidrógeno reportado por PEMEX. Como se puede analizar la suma de las dos primeras columnas no llegan a ser iguales a la tercera por lo que podemos inferir que existe una cantidad de hidrógeno no consumido el cual el modelo no predice. Los objetivos logrados de las reacciones de HDS y de hidrocracking son los de poder describir de manera adecuada el balance de materia por parte de los hidrocarburos (naftas) pero también poder inferir la cantidad de hidrógeno consumido por este conjunto de reacciones propuestas. Estos dos conjuntos de reacciones justifican el 30 % del consumo de hidrógeno reportado por PEMEX pero dan una muy buena estimación del balance de materia dentro del reactor PHN. A continuación se presenta el porcentaje que representa cada conjunto de reacciones consideradas con respecto a la cantidad reportada de hidrógeno consumido:

Figura 6. Consumo de hidrogeno por parte de los tres grupos reaccionante



Como se puede observar la cantidad de hidrógeno justificado por los dos conjuntos de reacciones propuestas es apenas del 30%. Se podría aumentar la cantidad de reacciones involucradas para justificar el consumo de hidrógeno; considerando reacciones de hidrogenación de insaturados, eliminación de compuestos nitrogenados (HDN), hidrogenación de compuestos oxigenados y muchas mas pero para modelar estas reacciones se tendría que tener valores reportados de la concentración de estos

compuestos en la nafta y esos valores no vienen reportados por PEMEX. Una estimación podría ser válida en base de alguna otra mezcla de naftas pero estos valores varían mucho y podría no ser representativo de la realidad. Por lo tanto solo se escogieron las reacciones que pudieran ser desarrolladas con algún fundamento sin tener que estimar otros valores para la realización del modelamiento. Este resultado también afecta en el modelamiento de las reacciones de hidrosulfuración, ya que el modelo dará un mayor cantidad de consumo de compuestos con azufre dado que la expresión de rapidez de reacción depende directamente de la presión parcial de hidrógeno.

Se probó representar con reacciones de hidrogenación de pseudocomponentes el consumo de hidrógeno restante, obteniendo buenos resultados pero con poca consistencia por lo que se determinó solo representar reacciones de HDS y de hidrocracking. La cantidad de hidrógeno consumido sin justificación se puede deber a reacciones secundarias como las mencionadas en la pg. 20 y también en gran medida a las fugas que se tienen durante el manejo de hidrógeno en todo el proceso.

EFFECTOS DE VARIABLES DE PROCESO EN EL REACTOR PFR-100

El objetivo de estudiar los efectos que tendrían algunas variables del proceso sobre el reactor PFR-100 es para poder explicar el comportamiento del reactor no solo a las condiciones de operación reportadas si no también cuando exista un cambio y para explorar la posibilidades de poder hacer una mejora al proceso en base a estas variables de proceso.

Para modelar un sistema de reacción se buscan tres factores importantes:

- 1) Conocer los compuestos y catalizadores que se involucran en el sistema reaccionante para poder plantear los esquemas de reacción y los modelos cinéticos pertinentes.
- 2) Plantear un modelo de reactor adecuado para modelar al sistema cinético, así como las condiciones de reacción.
- 3) Estudiar el impacto que tendrían ciertas variables de proceso sobre el modelo de reactor planteado.

Con estos tres elementos se hace un análisis global del comportamiento de un reactor. En base a los resultados presentados anteriormente a continuación se estudiara el efecto

que tendrían algunas variables importantes en los sistemas reaccionantes planteados anteriormente.

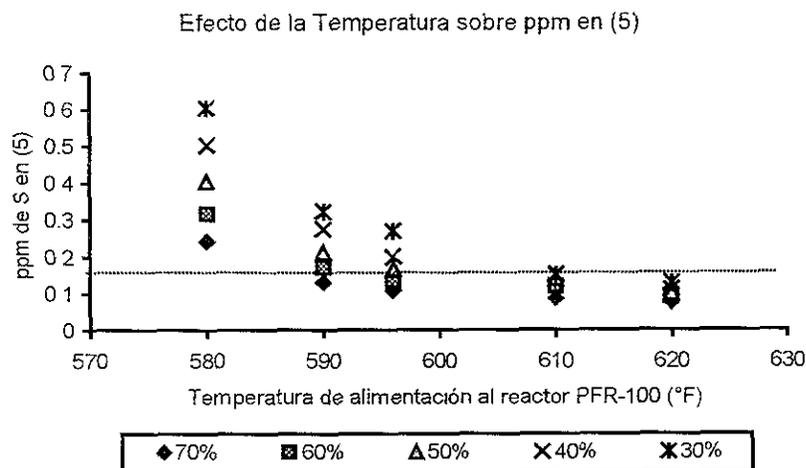
Las variables analizadas serán la presión y temperatura de entrada al reactor así como la recirculación de hidrogeno. Estos parámetros fueron seleccionados debido a su importancia dentro de la sección de reacción, la cual es el paso determinante del proceso de hidrodesulfuración de naftas.

Efecto de la Temperatura

El efecto que tendría la temperatura se puede ver en todas las ecuaciones de rapidez de reacción ya que el coeficiente de rapidez de reacción de todos los modelos cinéticos utilizados están en función de la temperatura (pg. 29, 33, 37); por lo que haciendo un análisis previo se puede suponer de manera correcta que al aumentar la temperatura, la velocidad de reacción aumentaría y los reactivos desaparecerían en mayor cantidad para cada reactivo que se alimentaría al reactor. Para hacer un análisis de manera adecuada se escogen los parámetros de mayor importancia, los cuales son: la concentración de salida de los compuestos con azufre y la cantidad de hidrogeno consumido para los tres conjunto de reacciones. Estos parámetros se seleccionaron gracias al impacto que tienen; el hidrogeno por ser reactivo de gran valor monetario y mientras mas se consuma sin cumplir con su objetivo principal el cual es la eliminación de azufre, tiene como consecuencia una perdida monetaria; y por parte de la concentración de hidrocarburos sulfurados tiene consecuencias en la calidad del hidrocarburos producidos por la planta.

A continuación se presenta la Gráfica 7 en donde en la abscisa se encuentra la temperatura de entrada al reactor y en la ordenada la concentración en ppm. de azufre que hay en la corriente de salida de la planta (5). Esta gráfica se hizo para diferentes composiciones de la mezcla de hidrocarburos sulfurados considerando que están representados por los compuestos de tiofeno y benzotiofeno; el porcentaje se refiere al porcentaje de tiofeno que existe en la mezcla de hidrocarburos sulfurados. Adicionalmente se gráfica una línea horizontal la cual indica en limite permisible de azufre en la corriente (5).

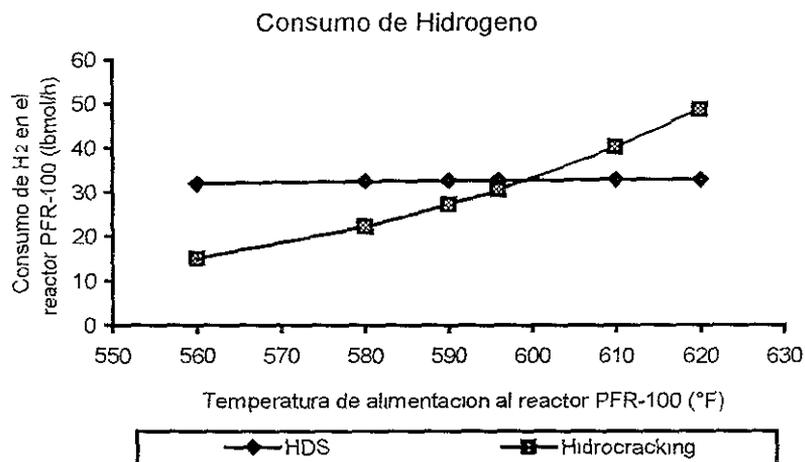
Gráfica 5 Efecto de la temperatura de entrada al reactor PFR-100 sobre la concentración de compuestos sulfurados en la corriente (5).



Con base a la Gráfica 5 se puede observar que a medida que va aumentando la temperatura de entrada al reactor PFR-100 la concentración de hidrocarburos sulfurados en la corriente de salida de la planta (5) va disminuyendo lentamente. En los datos del proceso la concentración de compuestos sulfurados en la corriente (5) debe ser ≤ 0.15 ppm por lo que se puede observar que a una temperatura < 590 °F a la entrada del reactor, la cantidad de azufre en la corriente (5) no cumpliría con el control de calidad propuesto. La temperatura de entrada al reactor PFR-100 reportada por PEMEX es de 596 °F y para una mezcla de 60% tiofeno y 40% benzotiofeno cumple con los requisitos de calidad de producto propuestos. A temperaturas mayores a 596 °F la eliminación de hidrocarburos sulfurados comparativamente no es mucho mayor a lo que se está eliminando; por lo que un aumento en la temperatura de alimentación tendría poca repercusión en la eliminación de compuestos sulfurados.

En la Gráfica 6 se presenta el consumo de hidrogeno en función de la temperatura de alimentación al reactor. Este consumo se dividirá de acuerdo a los tres sistemas reaccionantes que se dan en el reactor PFR-100. Para construir la Gráfica 6 se fue variando la temperatura de alimentación al reactor, todas las demás variables del proceso permanecieron iguales.

Gráfica 6. Efecto de la temperatura de entrada al reactor PFR-100 sobre el consumo de hidrogeno.



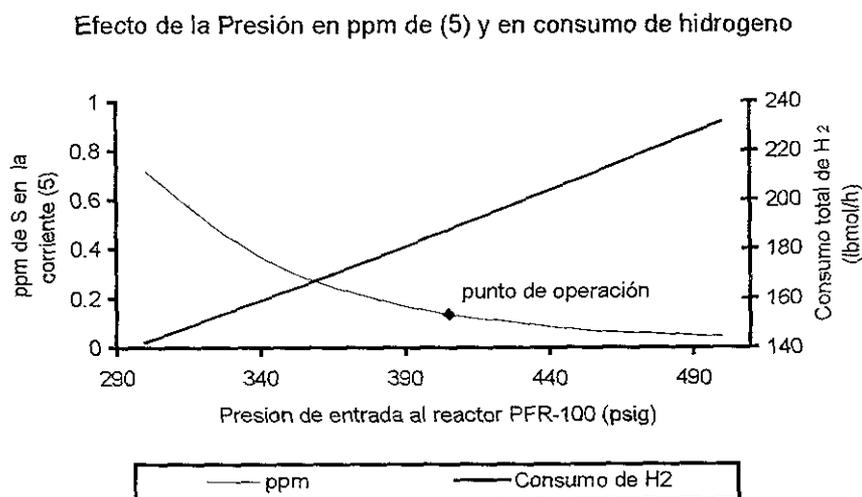
Con base en las Gráficas 5 y 6 podemos concluir según el modelo planteado que al aumentar la temperatura de alimentación al reactor PFR-100 se observaría un aumento en el consumo de hidrogeno y una disminución pequeña en la cantidad de hidrocarburos sulfurados en la corriente de salida (5) de la planta. Este aumento en el consumo de hidrogeno es contrario a una premisa planteada, la cual es eliminar la mayor cantidad de azufre consumiendo la menor cantidad de hidrogeno.

Efecto de la Presión

El análisis de los efectos de la presión se hizo con los mismos parámetros que en el caso de la temperatura ya que como se ha venido repitiendo son parámetros de importancia de esta simulación. La dependencia de la aparición o desaparición de compuestos se encuentra en las expresiones cinéticas de velocidad de reacción las cuales están en función de la presión (pg. 27-37).

En la Gráfica 7 se representa la dependencia de las reacciones de eliminación de azufre (HDS) con respecto a la presión de entrada al reactor, al igual que en el caso de los efectos de la temperatura de entrada al reactor la concentración de hidrocarburos sulfurados se vera en la corriente de salida de la planta (5). Para realizar este diagrama solo se fue cambiando la presión de entrada al reactor dejando las demás variables del proceso iguales a las reportadas por PEMEX.

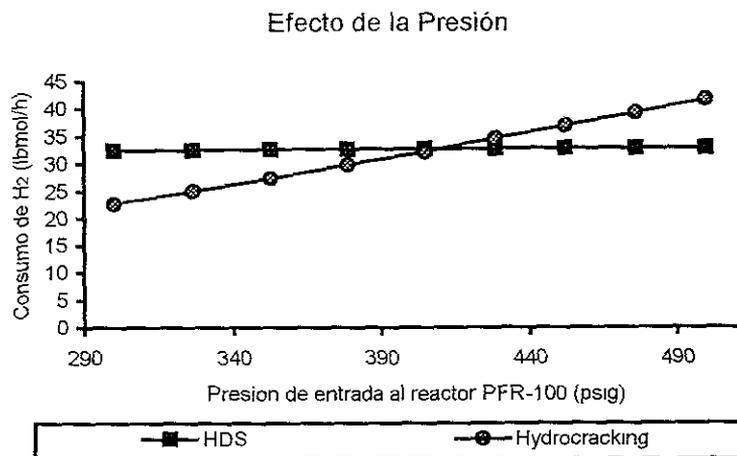
Gráfica 7. Efecto de la presión de entrada al reactor PFR-100 sobre la concentración de compuestos sulfurados en la corriente (5) y sobre el consumo de hidrogeno general.



Como conclusión de la Gráfica 7 el aumento en al presión de alimentación al reactor daría un disminución en la cantidad de azufre pero a la vez daría un mayor consumo de hidrogeno por lo que no seria conveniente aumentar mas la presión porque son mayores las perdidas por consumo de hidrogeno que ganancias por eliminación de azufre. Para poder visualizar mejor este efecto a continuación se presenta la Gráfica 8 donde se divide el consumo de hidrogeno en los dos grupos principales de reacción HDS e hidrocracking en función de la presión de entrada al reactor.

ESTA TESIS NO SALE DE LA BIBLIOTECA

Gráfica 8. Efecto de la presión de entrada al reactor PFR-100 sobre el consumo de hidrogeno para los tres sistemas reaccionantes.

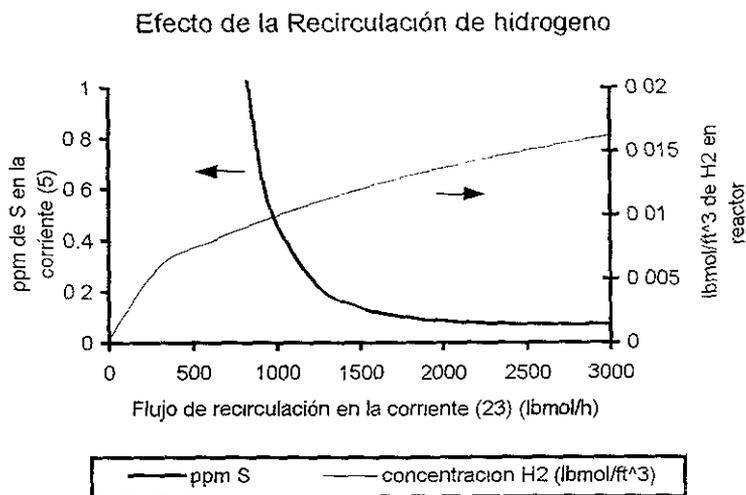


En la Gráfica 8 se puede visualizar que la cantidad de hidrogeno consumido por HDS se mantiene casi constante con respecto a la variación de la presión de alimentación al reactor, contrario a lo que pasa con los otros dos sistemas reaccionantes los cuales aumentan directamente proporcional al aumento en la presión estos resultados concuerdan con los publicados por Gates.

Efecto de la recirculación de hidrogeno

La recirculación de hidrogeno se refiere a la cantidad de hidrogeno que no reacciona y se recircula al reactor. La importancia de tener una gran cantidad de hidrogeno en la alimentación al reactor a que en las expresiones de velocidades de reacción utilizadas para HDS dependen directamente de la concentración de hidrogeno (pg. 29). En la gráfica 9 esta la dependencia de las ppm de azufre en la corriente (5) con respecto a la cantidad de hidrogeno recirculado por la corriente (23) (pg. 60). En la misma gráfica se encuentra la dependencia de la concentración de hidrogeno en la corriente de alimentación al reactor con respecto a la cantidad de hidrogeno recirculado.

Gráfica 9. Efecto de la recirculación de hidrogeno sobre la concentración de hidrocarburos sulfurados en la corriente (5).



Con la gráfica anterior se puede observar que la cantidad de azufre que se elimina depende en gran medida con la cantidad de hidrogeno que se recircula. Esta dependencia se ve en mayor parte para las recirculaciones de menor tamaño, tanto que si la recirculación no existiera la concentración de azufre en 5 sería de 300 ppm lo cual es un valor bastante grande considerando que se necesita tener una concentración de 0.15 ppm de S como máximo. En tanto para recirculaciones grandes (> 1500 lbmol/h) ya no existe gran variación en la cantidad de S que se elimina por lo que en términos monetarios aumentar la recirculación conduciría a elevar la energía que necesitaría el compresor de recirculación para cumplir con las especificaciones necesarias sin llegar a tener un gran impacto en la variable de importancia por lo que se puede concluir que la cantidad de recirculación en operación (1488 lbmol/h) es correcta.

Desde el punto de vista cinético de las reacciones de hidrosulfuración la recirculación de hidrógeno influye en la presión parcial de hidrógeno, la cual es directamente proporcional a la rapidez de reacción en todas las cinéticas de reacción propuestas para el modelamiento de los compuestos claves de azufre presente en la mezcla (pg. 25-36). En base a que el consumo de la cantidad de hidrógeno consumido en el reactor PFR-100 no es del todo correcto, esta variable influirá también en la cantidad de azufre consumido propuesto por el modelo.

ESQUEMA DE SIMULACION

La presentación de los resultados del esquema de simulación se hará comparándolos con los datos reportados por PEMEX. Esta comparación se hace con la finalidad de tener una referencia fija sobre los resultados obtenidos por el esquema de simulación general y poder predecir un error que pudiera tener el esquema de simulación desarrollado, el error que se maneja fue con respecto a las variables globales de importancia como son temperatura presión y flujo de cada corriente.

Los pasos para generar el esquema de simulación son los mencionados en el capítulo de desarrollo del esquema de simulación, en donde se describe paso por paso la metodología que se implementó para especificar cada uno de los equipos involucrados en el esquema de simulación. En el apéndice B se presentan los resultados para cada corriente dando los parámetros generales: flujo molar, temperatura, presión. El error global por corriente es con referencia a los parámetros de referencia antes mencionados. La simulación realizada tiene como comparación los datos reportados por PEMEX, por lo tanto se puede hacer una comparación entre estos datos y los resultados obtenidos. De esta comparación se recolecta un error global de simulación, el cual está calculado tomando en cuenta los parámetros generales por corriente como son: temperatura, presión y flujo molar. El promedio de errores por corriente de la planta en general es de 4.8%, cayendo dentro de un rango de confiabilidad bueno, ya que un error $< 10\%$ se considera "bueno".

Haciendo un análisis más detallado para encontrar las diferencias entre las simulaciones realizadas; para la presión, en algunas corrientes son diferentes porque consideran la presión a la salida del proceso unitario y no a la entrada del próximo equipo por eso del mayor grado de diferencia entre simulaciones, esta diferencia no es de gran importancia ya que no se analiza las caídas de presiones entre equipos sino solo los efectos entre ellos mismos por lo tanto el parámetro importante es la presión a la cual se encuentran los equipos y estas son muy similares. Para la temperatura la mayor diferencia son a la salida de las bombas ya que HYSYS calcula una variación en la temperatura de salida, mientras la simulación del IMP considera una operación a temperatura constante, otra variación es a la salida de las torres de destilación, esta variación se debe a el grado de

separación impuesto el cual es calculado a diferentes temperaturas pero dentro de un error del 3%.

Los resultados generales de la simulación realizada se encuentra en el Apéndice C donde se encontraran los flujos molares por componente, flujo molar, máscicos y volumétricos totales, temperatura, presión, peso molecular promedio, densidad, fracción liquido-vapor, viscosidad, conductividad térmica, factor Z, tensión superficial , entalpía y entropía molar para cada corriente de la planta de HDS para naftas de Tula, Hidalgo.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se desarrolló el esquema de simulación para la planta de HDS de naftas de Tula, Hidalgo. Para la realización del esquema de simulación se utilizaron dos *conjuntos de esquemas de reacción para representar el comportamiento de la mezcla de hidrocarburos* y se realizó un esquema de simulación general el cual modeló a la PHN con un 5 % de error con respecto a los datos proporcionados por PEMEX.

La eliminación de azufre se representó por medio de 2 componentes claves: tiofeno y benzotiofeno, los cuales fueron seleccionados gracias a sus características intrínsecas y su comportamiento bajo las condiciones de reacción. También se encontró la relación de composición entre el tiofeno y benzotiofeno que se podría utilizar para representar a los hidrocarburos con azufre; por lo tanto encontrándose de manera general una forma de representar a la gama de compuestos con azufre por medio de dos compuestos claves los cuales presentan características parecidas a la gama de compuestos presentes en la mezcla de hidrocarburos. Dado que las expresiones cinéticas del tiofeno y benzotiofeno publicadas son de forma compleja se complementó al simulador con extensiones que permitieran el uso de estas expresiones cinéticas como subrutinas en el reactor de HDS o en cualquier otra simulación.

El otro conjunto de reacciones consideradas para el modelamiento del reactor de PHN fueron para reacciones de eliminación de compuesto pesados o hidrocracking. Dado que este comportamiento ha sido poco estudiado se desarrolló un esquema de reacción el cual pudiera predecir el comportamiento de estos compuesto bajo las condiciones de reacción. Aparte de este esquema de reacción se utilizaron otros sin dar mejores resultados. Este conjunto de esquemas y constantes de reacción no tienen significado teórico ya que fue una herramienta para poder modelar el comportamiento reportado por PEMEX. Este estudio sería complementado con un estudio experimental de tipo cinético para la mezcla de naftas

utilizada en la PHN en donde se buscaría los esquemas y constantes de reacción que modelarían el comportamiento real de los hidrocarburos bajo las condiciones de reacción.

En base a los dos conjuntos de reacciones planteadas para el modelamiento del reactor de PHN se calculo el consumo de hidrógeno que tendrían estas reacciones. El consumo de hidrógeno calculado fue de 30% del consumo reportado por PEMEX, aunque es un porcentaje bajo representa en buena manera el consumo de hidrógeno que tendrían estas reacciones. El otro 70% del consumo de hidrógeno se cree que se deba principalmente a dos fenómenos: a las perdidas por fugas que se presentan durante todo el proceso y a las reacciones secundarias mencionadas anteriormente talos como hidrogenación de insaturados, eliminación de compuestos nitrogenados (HDN) , hidrogenación de compuestos oxigenados (HDO) y eliminación de metales pesados entre muchas otras. Estas reacciones podrían ser consideradas en el modelamiento del reactor de PHN si los datos necesarios estuvieran reportados para esta mezcla de nafta. Como se menciona con anterioridad se podría utilizar una estimación en base a otra mezcla de nafta pero seria una estimación precaria.

Los efectos que tendrían las variables mas importantes de proceso sobre el funcionamiento del reactor también fueron estudiados. Las variables importantes de proceso que fueron estudiadas fueron: temperatura y presión a la entrada del reactor de PHN y relación de recirculación de hidrógeno. Estas tres variables de proceso fueron seleccionadas dado que fueron las que mostraron el mayor impacto sobre el parámetro de calidad el cual es la concentración de azufre en el efluente de la PHN. De las tres variables estudiadas la temperatura a la entrada del reactor y la relación de recirculación de hidrógeno fueron las que mas impacto tienen sobre el grado de eliminación de compuestos de azufre el cual es de gran importancia porque de ahí depende el funcionamiento general de la planta; la concentración de azufre en la corriente de hidrocarburo es el parámetro de pureza que depende del funcionamiento a régimen permanente del sistema.

El esquema de simulación general contiene las secciones de reacción y separación de productos. El desarrollo del esquema de simulación se realiza sobre la base de los datos

reportados por PEMEX y se comparan los resultados obtenidos por el modelamiento contra los datos reportados con la finalidad de visualizar la capacidad de reproducción de los datos reportados por medio del modelo planteado. Dentro de la comparación realizada se encontró un por ciento de error general del 5 % debido a diferencias pequeñas con algunas corrientes de proceso. Este parámetro indica una realización buena para la simulación de la planta en general.

Sobre la base de los resultados y conclusiones expuestos con anterioridad podemos concluir que los objetivos fueron realizados, así como la explicación de los temas importantes que se atendieron en la realización de este trabajo. Como recomendaciones a la ampliación de este trabajo sería fundamental un estudio experimental a fondo de los compuestos de hidrocarburos reales que se encuentran en la mezcla de naftas, así como también conocer los compuestos de hidrocarburos con azufre, nitrógeno, oxígeno, etc... . La realización de este estudio aunado al comportamiento de estos compuestos bajo las condiciones de reacción que se dan en planta (temperatura, presión, cantidad de hidrogeno y catalizador) daría una precisión mayor para entender de manera específica las reacciones involucradas y el efecto intercalado entre ellas en el proceso de HDS. Este estudio ampliaría el entendimiento en la sección de reacción la cual es la mas problemática y ayudaría para generar un esquema de simulación mas detallado.

BIBLOGRAFIA

1. Anabtawi J.A., Ali S.A., *Effects of Catalytic Hydrotreating on Light Cycle Oil Fuel Quality*, Ind. Eng. Chem. Res. , 1991, 30, 2586-2592.
2. Bergem H., Blekkan E.A., Holmen A., *Aromatics Hydrogenation over Supported Platinum Catalysts: The Influence of Sulfur on the Kinetics of Toluene Hydrogenation over Pt/Y-zeolite catalysts*. Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 391-401.
3. Bird. R.B., Steward W.E., Lightfoot E.N., *Transport Phenomena*, Third Edition, Wiley International Edition, 1960.
4. Capellos C., Bielski B.H.J, *Kinetics Systems: Mathematical Description of Chemical Kinetics in Solution*, Wiley-Interscience, 1972.
5. Carberry J.J., *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, McGraw-Hill Book Company, 1976.
6. Castellanos M.A., *Estudio de la cinetica de la reacciones de hidrosulfuración de diesel, análisis de modelos termodinamicos, simulación y optimización del proceso*, Tesis UNAM, 1998.
7. Cheng-Lie Li, Zi-ren Xu, *Catalytic Hydroprocessing of SCR-II Heavy Distillate Fractions. 4. Hydrodeoxygenation of Phenolic Compounds in the Acidic Fractions*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1985, 24, 92-97.
8. Chia-I Chu, Wang I., *Kinetic Study on Hydrotreating* Ind. Eng. Chem. Res. , 1982, 21, 338-344.

9. Dassori C.G., Fernandez N., *Trickle-Bed reactor Modeling for Middle-Distillates Hydrotreatment*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 443-447.
10. Demirel B., Wisler W.H., *Production of High octane gasoline components by hydroprocessing of coal-derived aromatic hydrocarbons*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 469-478.
11. Diaz-Real R.A., Mann R.S., Sambhi I.S., *Hydrotreatment of Athabasca Bitumen Derived Gas Oil over Ni-Mo, Ni-W, and Co-Mo Catalysts*, Ind. Eng. Chem. Res., 1993, 32, 1354-1358.
12. Debrabandere B., Froment G.F., *Influence of the Hydrocarbon chain length on the kinetics of the hydroisomerization and hydrocracking of n-paraffins*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 379-389.
13. Dieterich E., Sorescu G., Eigenberger G., *Numerical Methods for the Simulation of Chemical Engineering Process*, International Chemical Engineering, Vol 34 No. 4, October 1994, pp. 455-468.
14. Froment G.F., Bischoff K.B., *Chemical Reactor Analysis and Design*, John Wiley & Sons, 1979.
15. Froment G.F., Depauw G.A., Vanrysselberghe V., *Kinetics Modeling and Reactor Simulation in Hydrodesulfurization of Oil Fractions*, Ind. Eng. Chem. Res., 1994, 33, 2975-2988.
16. Frost A.A., Pearson R.G., *Kinetics and Mechanism; A Study of Homogeneous Chemical Reactions*, John Wiley & Sons Inc. 1961.
17. Girgis M.J., Gates B.C., *Reactivities Reaction Networks and Kinetics in High-Pressure Catalytic Hydroprocessing*, Ind. Eng. Chem. Res., 1991, 30, 2021-2058.

18. Henley E.J., Seader J.D., *Operaciones de Separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*, Editorial Reverte S.A., 1990.
19. Herrera M.A., *Síntesis y caracterización de polibutadienos estrellados y funcionalizados obtenidos via polimerización aniónica en solución*, Tesis UNAM, 1997.
20. Hill C.G. Jr., *An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design*, John Wiley & Sons., 1997.
21. Hienemann H., Carberry J.J., *Catalysis Reviews; Science and Engineering*, vol 12, Marcel Dekker, 1976.
22. Houalla M., Broderick D.H., Sapre A.V., *Hydrodesulfurization of Methyl-Substituted Dibenzothiophenes Catalyzed by CoMo/ γ -Al₂O₃*. *Journal of Catalysis*, 61, 523-527 (1980).
23. Iannibello A., Marengo S., Burgio G., *Modelling the Hydrotreating of a Heavy Residual Oil in a Pilot Trickle-Bed Reactor*, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 1985, 24, 531-537.
24. Instituto Mexicano del Petroleo, *Bases de Diseño para la Modificación al diseño original Unidad hidrodesulfuradora de Naftas No. 2 Tula, Hidalgo*. Mayo 1991.
25. Kabe T., Ishihara A., Zhang Q., *Deep desulfurization of light oil. Part 2: hydrodesulfurization of dibenzothiophene, 4-methyldibenzothiophene and 4,6-dimethyldebenzothiophene*, Elsevier Science Publishers, *Applied Catalysis A: General*, 97, pp L1-L9.
26. Kokayeff P., Antos G.J., *Saturation of Aromatics in Diesel Fuels: The Catalytic Toxicities of Sulfur and Nitrogen Compounds*, *Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997* Elsevier Science Publishers B.V., 463-468.
27. Larkins R.P., White R.R., *Two Phase Concurrent Flow in Packed Beds*, *A.I.Ch.E. Journal*, Vol. 7, No.2, pp 231-238, June 1961.

-
28. Lawrence R.C., McKinley D.H., Wood M.A., *Process Developments in Gasoil Hydrotreating*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 479-483.
29. Le Page J.F., *Applied Heterogeneous Catalysis; Design Manufacture Use of Solid Catalysts*, Editions Technip 1978.
30. Letourneur D., Vrinat M., Bacaud R., *Hydrodesulfurization of Dibenzothiophene in a Micro Bed Reactor*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 491-497.
31. Levenspiel O., *Chemical Reaction Engineering*, John Wiley & Sons., 1972.
32. Mann R.S., Sambhi I.S., Khulbe K.C., *Catalytic Hydrofining of Heavy Gas Oil*, Ind. Eng. Chem. Res., 1987, 26, 410-414.
33. Marquez-Alvarez C., Claridge J.B., York A.P., *Benzene Hydrogenation over Transition Metal Carbides*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science B.V., 485-490.
34. Magnabosco L.M., *A Mathematical Model for Catalytic Hydrogenation of Aromatics in Petroleum Refining Feedstocks*, Catalysts in Petroleum Refining 1990 Elsevier Science Publishers B.V., 481-496.
35. McMurry J., *Química Organica*, Grupo Editorial Iberoamericana, 1992.
36. Mystad R., Rosvoll J.S., Grande K., Blekkan E.A., *Hydrotreating of Gas-Oils: A Comparison of Trickle-Bed and Upflow Fixed Bed Lab Scale Reactors*, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 437-441.
37. Nag N.K., Sapre A.V., *Hydrodesulfurization of Polycyclic Aromatic Catalyzed by Sulfided CoO-MoO₃/γ-Al₂O₃: The Relative Reactivities*. Journal of Catalysis, 57, 509-512, (1979).

-
38. Nagai M., Masunaga T., Hana-Oka N., *Selectivity of Molybdenum Catalyst in Hydrodenitrogenation, Hydrodesulfurization and Hydrodeoxygenation: Effects on Sulfur and Oxygen Compounds on Acridine Hydrodenitrogenation*, Journal of Catalysis, 101, 284-292, 1986.
39. O'Brien W.S., Chen J.W., Nayak R.V., Carr G.S., *Catalytic Hydrodesulfurization of Dibenzothiophene and a Coal-Derived Liquid*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1986, 25, 221-229.
40. Petrakis L., Raffaele G.R., Young D.C., *Hydroprocessing of SCR-II Heavy Distillate Fractions. 1. Preparation of the Fraction by Liquid Chromatography*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1983, 22, 292-298.
41. Rase H.F., *Chemical Reactor Design for Process Plants Vol. II Case Studies & Design Data*, Wiley-Interscience Publication, 1977.
42. Reid R.C., Prausnitz J.M., Sherwood T.K., *The Properties of Gases and Liquids*, Third Edition, Mc.Graw-Hill Book Company, 1977.
43. Sakornwimon W., *Hydrodesulfurization in Trickle Bed Reactors*, University of Tulsa. 1981
44. Satterfield C.N., Roberts G.W., *Kinetics of Thiophene Hydrogenolysis on a cobalt molybdate catalyst*, AIChE Journal, Vol 14 No. 1, pp. 159-163. 1968
45. Satterfield C.N., Modell M., Wilkens J.A., *Simultaneous Catalytic Hydrodenitrogenation of Pyridine and Hydrodesulfurization of Thiophene*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1980, 19, 154-160.
46. Satterfield C.N., *Heterogeneous Catalysis in Practice*, McGraw-Hill Book Company, 1980.
47. Sau M., Narasimhan C.S.L., Verma R.P., *A Kinetic Model for Hydrodesulfurization, Hydrotreatment and Hydrocracking of Oil Fractions* 1997 Elsevier Science Publishers B.V., 421-435.

-
48. Skala D.U., Saban M.D., Volker W.D., *Hydrotreating of Used Oil: Prediction of Industrial Trickle-Bed Operation from Pilot-Plant Data*, Ind. Eng. Chem. Res. , 1991, 30, 2059-2065.
49. Squires R.G., Andersen P.K., Reklaitis G.V., *Multimedia-Based Educational Applications of Computer Simulation of Chemical Engineering Processes*, Amoco Corporation.
50. Thomas C.L., *Catalytic Processes and Proven Catalysts*, Academic Press, 1970.
51. Van Parijs I.A., Froment G.F., *Kinetics of Hydrodesulfurization on a CoMo/ γ -Al₂O₃ Catalyst. 1. Kinetics of the Hydrogenolysis of Thiophene*. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1986, 25, 431-436.
52. Van Parijs I.A., Hosten L.H., Froment G.F., *Kinetics of Hydrodesulfurization on a CoMo/ γ -Al₂O₃ Catalyst. 2. Kinetics of the Hydrogenolysis of Benzothiophene*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1986, 25, 437-443.
53. Wammes W.J.A., Mechielsen S.J.. *The Transition between Trickle Flow and Pulse Flow in a Cocurrent Gas-Liquid Trickle-Bed Reactor at Elevated Pressures*, Chemical Engineering Science, Vol. 45, No. 10. Pp. 3149-3158, 1990.

APENICE A

Listados para la generación de las extensiones realizados en Visual Basic:

1. Para el reactivo tiofeno

1.1. Reacción de tiofeno a buteno

Option Explicit

Dim hyContainer As Object

Dim hyBulkDens As Object

'Initialize is called when the extension is first added to the simulation or when a
' simulation case containing the extension is loaded

Public Function Initialize(ByVal Container As Object, ByVal IsRecalling As Boolean) As Long

'Enable error trapping

On Error GoTo ErrorTrap

'Declare local HYSYS objects

Dim hyReactant As Reactant

'Reference the current HYSYS version

Initialize = extnCurrentVersion

'Reference the Container object which called the extension

'This reference will let the extension interact with HYSYS through the extension container

'The ExtnKineticReactionContainer object is the container Methods from the

'ExtensionObject object are also available

Set hyContainer = Container

'Set an object reference to the BulkDens variable in the EDF

Set hyBulkDens = hyContainer FindVariable("BulkDens").Variable

```

'IsRecalling is only False when the extension is first added to the simulation
If IsRecalling = False Then
'Default values for BulkDens (83000 g catalyst/m3 reactor volume)
hyBulkDens.Value = 83000

'Reaction properties
hyContainer.Phase = ptVapourPhase 'Vapour phase reaction
hyContainer.ReactionBasis = rbPartialPressBasis 'Partial pressure reaction

'Remove all reactants
hyContainer.Reactants.RemoveAll

'Add desired reactants and set their stoichiometric value
Set hyReactant = hyContainer.Reactants.Add("Hydrogen")
hyReactant.StoichiometricCoefficientValue = -3
hyContainer.BaseReactant = hyReactant 'Set Hydrogen as the base reactant used in the rate
equation
Set hyReactant = hyContainer.Reactants.Add("Thiophene")
hyReactant.StoichiometricCoefficientValue = -1
Set hyReactant = hyContainer.Reactants.Add("H2S")
hyReactant.StoichiometricCoefficientValue = 1
Set hyReactant = hyContainer.Reactants.Add("1-Butene")
hyReactant.StoichiometricCoefficientValue = 1

'Set BasisConversion units
hyContainer.BasisConversion = "atm"
'Leave the RateConversion in HYSYS internal units of kgmole/m3-s

'Set the property state as calculated so that they cannot be modified
'The With statement is used for efficiency since each line uses the
'SetReactionPropertyState method of the hyContainer object
With hyContainer
    .SetReactionPropertyState rpReactants, vsCalculated
    .SetReactionPropertyState rpStoichiometricCoefficients, vsCalculated
    .SetReactionPropertyState rpMinTemperature, vsCalculated
    .SetReactionPropertyState rpMaxTemperature, vsCalculated
    .SetReactionPropertyState rpReactionBasis, vsCalculated

```

```

        .SetReactionPropertyState rpReactionPhase, vsCalculated
        SetReactionPropertyState rpBaseReactant, vsCalculated
        .SetReactionPropertyState rpBasisConversion, vsCalculated
        .SetReactionPropertyState rpRateConversion, vsCalculated
    End With

End If

'Line to which the On Error statment branches if an error occurs
ErrorTrap

End Function

'Reactionrate is called whenever the extension is executed
Public Function ReactionRate(ByVal Fluid As Object, ByVal RxnTemperatureInC As Double, ByVal
RxnVolumeInKmolPerM3 As Double, rate As Double) As Boolean

'Enable error trapping
On Error GoTo ErrorTrap

'Declare local variables
Dim TotalPressure As Double
Dim RxnTemperatureinK As Double
Dim HydrogenIndex As Integer
Dim H2SIndex As Integer
Dim ThiopheneIndex As Integer
Dim Butene1Index As Integer
Dim ComponentFrac As Variant
Dim HydrogenPP As Double
Dim ThiophenePP As Double
Dim H2SPP As Double
Dim Butene1PP As Double
Dim k1 As Double, k2 As Double, k3 As Double, k4 As Double
Dim rate1 As Double, rate2 As Double

'Check hyBulkDens, if <=0 then set to default value of 83000 g catalyst/m3 reactor volume
If hyBulkDens Value <= 0 Then hyBulkDens Value = 83000

```

```

'Get the overall pressure in atm at which the reaction is occurring
TotalPressure = Fluid.Pressure GetValue("atm")

'Get the reaction temperature in K
RxnTemperatureinK = RxnTemperatureInC + 273.15

'Get component index numbers
HydrogenIndex = Fluid.Components.Index("Hydrogen")
ThiopheneIndex = Fluid.Components.Index("Thiophene")
H2SIndex = Fluid.Components.Index("H2S")
Butene1Index = Fluid.Components.Index("1-Butene")

'Set ComponentFrac equal to the component molar fractions of the fluid
ComponentFrac = Fluid.MolarFractionsValue

'Get partial pressure of components in PSIA by multiplying component mole fraction by total pressure
'(Smith and Van Ness, p.300)
ThiophenePP = ComponentFrac(ThiopheneIndex) * TotalPressure
HydrogenPP = ComponentFrac(HydrogenIndex) * TotalPressure
H2SPP = ComponentFrac(H2SIndex) * TotalPressure
Butene1PP = ComponentFrac(Butene1Index) * TotalPressure

'Calculate the rate
'(Girgis M.J., Gates B.C., Reactivities Reaction Networks and Kinetics in High-Pressure Catalytic
Hydroprocessing, Ind. Eng. Chem. Res., 1991, 30, 2021-2058.)
'rate is in gmol thiophene consumed/s-g catalyst
k1 = 52200000# * Exp(-29.9 / (0.001987 * RxnTemperatureinK))
k2 = .00056 * Exp(10.7 / (0.001987 * RxnTemperatureinK))
k3 = 0.536
k4 = 91.2
rate1 = k1 * k2 * k3 * ThiophenePP * HydrogenPP * hyBulkDens Value
rate2 = (1 + (k3 * HydrogenPP) ^ (1 / 2) + k2 * ThiophenePP + k4 * H2SPP / HydrogenPP) ^ 3
rate = rate1 / rate2

'Convert to the units required by HYSYS (kgmole/m3-s)
'Divide by 1000 gmol/kgmol
rate = rate / 1000

```

'Tell HYSYS that the calculation worked as expected

ReactionRate = True

Exit Function

'Line to which the On Error statment branches if an error occurs

ErrorTrap

'Tell HYSYS that the calculation did not work as expected'

ReactionRate = False

End Function

1.2. Reacción de buteno a butano

Option Explicit

Dim hyContainer As Object

Dim hyBulkDens As Object

'Initialize is called when the extension is first added to the simulation or when a simulation

'case containing the extension is loaded

Public Function Initialize(ByVal Container As Object, ByVal IsRecalling As Boolean) As Long

'Enable error trapping

On Error GoTo ErrorTrap

'Declare local HYSYS objects

Dim hyReactant As Reactant

'Reference the current HYSYS version

Initialize = extnCurrentVersion

'Reference the Container object which called the extension

'This reference will let the extension interact with HYSYS through the extension container

'The ExtnKineticReactionContainer object is the container Methods from the

'ExtensionObject object are also available

Set hyContainer = Container

'Set an object reference to the BulkDens variable in the EDF

Set hyBulkDens = hyContainer FindVariable("BulkDens").Variable

'IsRecalling is only False when the extension is first added to the simulation

If IsRecalling = False Then

'Default values for BulkDens (83000 g catalyst/m³ reactor volume)

hyBulkDens Value = 83000

'Reaction properties

hyContainer.Phase = ptVapourPhase 'Vapour phase reaction

hyContainer ReactionBasis = rbPartialPressBasis 'Partial pressure reaction

'Remove all reactants

hyContainer.Reactants.RemoveAll

'Add desired reactants and set their stoichiometric value

Set hyReactant = hyContainer.Reactants Add("Hydrogen")

hyReactant.StoichiometricCoefficientValue = -1

hyContainer.BaseReactant = hyReactant 'Set Hydrogen as the base reactant used in the rate equation

Set hyReactant = hyContainer.Reactants.Add("n-Butane")

hyReactant StoichiometricCoefficientValue = 1

Set hyReactant = hyContainer.Reactants Add("1-Butene")

hyReactant StoichiometricCoefficientValue = -1

'Set BasisConversion units

hyContainer BasisConversion = "atm"

'Leave the RateConversion in HYSYS internal units of kgmole/m³-s

'Set the property state as calculated so that they cannot be modified

'The With statement is used for efficiency since each line uses the

'SetReactionPropertyState method of the hyContainer object

With hyContainer

SetReactionPropertyState rpReactants, vsCalculated

SetReactionPropertyState rpStoichiometricCoefficients, vsCalculated

```

        .SetReactionPropertyState rpMinTemperature, vsCalculated
        SetReactionPropertyState rpMaxTemperature, vsCalculated
        .SetReactionPropertyState rpReactionBasis, vsCalculated
        SetReactionPropertyState rpReactionPhase, vsCalculated
        .SetReactionPropertyState rpBaseReactant, vsCalculated
        SetReactionPropertyState rpBasisConversion, vsCalculated
        .SetReactionPropertyState rpRateConversion, vsCalculated
    End With

```

End If

'Line to which the On Error statment branches if an error occurs

ErrorTrap:

End Function

'Reactionrate is called whenever the extension is executed

```

Public Function ReactionRate(ByVal Fluid As Object, ByVal RxnTemperatureInC As Double, ByVal
RxnVolumeInKmolPerM3 As Double, rate As Double) As Boolean

```

'Enable error trapping

On Error GoTo ErrorTrap

'Declare local variables

Dim TotalPressure As Double

Dim RxnTemperatureinK As Double

Dim HydrogenIndex As Integer

Dim ButaneIndex As Integer

Dim Butene1Index As Integer

Dim ComponentFrac As Variant

Dim HydrogenPP As Double

Dim ButanePP As Double

Dim Butene1PP As Double

Dim k1 As Double, k2 As Double, k3 As Double

Dim rate1 As Double, rate2 As Double

'Check hyBulkDens, if <=0 then set to default value of 83000 g catalyst/m3 reactor volume

If hyBulkDens Value <= 0 Then hyBulkDens Value = 83000

'Get the overall pressure in atm at which the reaction is occurring

TotalPressure = Fluid.Pressure.GetValue("atm")

'Get the reaction temperature in K

RxnTemperatureinK = RxnTemperatureInC + 273.15

'Get component index numbers

HydrogenIndex = Fluid.Components.Index("Hydrogen")

ButaneIndex = Fluid.Components.Index("n-Butane")

Butene1Index = Fluid.Components.Index("1-Butene")

'Set ComponentFrac equal to the component molar fractions of the fluid

ComponentFrac = Fluid.MolarFractionsValue

'Get partial pressure of components in PSIA by multiplying component mole fraction by total pressure

'(Smith and Van Ness, p 300)

ButanePP = ComponentFrac(ButaneIndex) * TotalPressure

HydrogenPP = ComponentFrac(HydrogenIndex) * TotalPressure

Butene1PP = ComponentFrac(Butene1Index) * TotalPressure

'Calculate the rate

'(Girgis M.J., Gates B.C., *Reactivities Reaction Networks and Kinetics in High-Pressure Catalytic Hydroprocessing*, Ind. Eng. Chem. Res., 1991, 30, 2021-2058.)

'rate is in gmol butene consumed/s-g catalyst

k1 = 2210000000000# * Exp(-38.1 / (0.001987 * RxnTemperatureinK))

k2 = 0.000407 * Exp(10.6 / (0.001987 * RxnTemperatureinK))

k3 = 0.000000000000888 * Exp(26.4 / (0.001987 * RxnTemperatureinK))

rate1 = k1 * k2 * k3 * Butene1PP * HydrogenPP * hyBulkDens.Value

rate2 = (1 + (k3 * HydrogenPP) ^ (1 / 2) + k2 * ButanePP + k3 * Butene1PP) ^ 3

rate = rate1 / rate2

'Convert to the units required by HYSYS (kgmole/m3-s)

'Divide by 1000 gmol/kgmol

rate = rate / 1000

'Tell HYSYS that the calculation worked as expected

ReactionRate = True

Exit Function

'Line to which the On Error statment branches if an error occurs

ErrorTrap:

'Tell HYSYS that the calculation did not work as expected

ReactionRate = False

End Function

Apendice B

CORRIENTES DE INTERES

Name	1	2	3	4	5	6	7	8
Molar(lbmole/hr)	3599.8498	49.9988	389.617	64.75992	1997.994	0	0	704.1329
Temp. (F)	100	120	145.94	101.1249	224.9091	326.0309	326.0309	170.2837
Pres.(psig*)	71.078582	45.49523	526.0003	329.9639	336.0135	76.43804	76.43804	59.73955

Name	9	10	11	12	13	14	15	16
Molar(lbmole/hr)	242.95899	3649.849	3649.849	5527.466	5527.466	5527.466	5527.466	5382.46
Temp. (F)	91.030582	100.4163	103.2304	110.7751	225.1726	508.5392	596	586
Pres.(psig*)	43.985626	45.49523	538.887	507.1652	487.1704	467.1756	405.1917	376.1993

Name	17	18	19	20	21	22	23	24
Molar(lbmole/hr)	5382.4603	5382.46	5382.46	5382.46	1555.404	67.40421	1488	1488
Temp. (F)	299.94611	203.6675	171.1686	110	110	110	110	195.7215
Pres.(psig*)	366.20185	356.2044	346.207	327.6	327.6	327.6	327.6	507.1652

Name	25	26	27	28	29	30	31	32
Molar(lbmole/hr)	3827.056	3827.056	3827.056	3827.056	149.2298	3677.826	3677.826	149.2298
Temp. (F)	110	149.9171	221.5544	221.5544	219.7681	219.7681	220.9635	100
Pres.(psig*)	327.6	317.6026	307.6052	307.6052	89.60188	89.60188	241.5624	79.60448

Name	33	34	35	36	37	38	39	40
Molar(lbmole/hr)	102.17309	102.1731	47.05667	47.05667	3724.883	621.4319 *		77.49179
Temp. (F)	100	97.95232	100	101.1426	219.8118	173.4134 *		99.98427
Pres.(psig*)	79.604479	43.98563	79.60448	241.5624	241.5624	238.599 *		234.6

Name	41	42	43	44	45	46	47	48
Molar(lbmole/hr)	73.381692 *		64.74491	64.75992 *		479.1952	12784.65	9202
Temp. (F)	76.135726 *		99.98427	100 *		99.98427	428.6996	428.6996
Pres.(psig*)	43.985626 *		234.6	234.6 *		234.6	243.9	243.9

Name	49	50	51	52	53	54	55	56
Molar(lbmole/hr)	9202	3582.646	3586.741	4992.673 *		*	3403.925	4129.994
Temp. (F)	462.90548	428.6996	312.944	198.2638 *		*	169.9793	325.6085
Pres.(psig*)	244.89974	243.9	30.0556	28.43922 *		*	25.44	30.45

Name	57	58	59	60	61	62	63	64
Molar(lbmole/hr)	*	2132	2132	1997.994	1997.994 *		1997.994 *	
Temp. (F)	*	325.6086	353.0208	325.6087	325.6087 *		328.4313 *	
Pres.(psig*)	*	120	30.45	30.45	346 *		346.0109 *	

Name	65	66	67	68	69
Molar(lbmole/hr)	0 *		67.40421	140.7859	884.6147
Temp. (F)	325.60868 *		108.2154	85.63848	100
Pres.(psig*)	76 *		43.98563	43.98563	44.685

Appendix B

REFERENCIA

Name	1	2	3	4	5	6	7	8
Molar(lbmole/hr)	3590.157	49.863	389.6	64.763	1998	0	0	699.496
Temp. (F)	100	120	145.94	100.79	203.78	350.6	350.6	166.94
Pres.(psig*)	71.1	45.51	526.14	330	336.25	76.68	76.68	59.74

Name	9	10	11	12	13	14	15	16
Molar(lbmole/hr)	231.382	3640.021	3640.021	5518	5518.063	5518.063	5518.063	5360.954
Temp. (F)	92.27	100.42	100.42	108.63	225.2	502.74	596	586
Pres.(psig*)	44	39.83	539.03	499.4	478.4	468.4	405.83	376.83

Name	17	18	19	20	21	22	23	24
Molar(lbmole/hr)	5360.954	5360.954	5360.954	5360.954	1534.458	46.034	1488	1488
Temp. (F)	301.16	203.78	171.19	110	110	110	110	200.44
Pres.(psig*)	366.83	356.83	346.83	327.62	372.62	327.62	327.6	507.3

Name	25	26	27	28	29	30	31	32
Molar(lbmole/hr)	3826.494	3826.494	3826.494	3826.494	171.432	3655	3655	171.432
Temp. (F)	110	150.14	221.19	219.17	219.17	219.17	219.17	100
Pres.(psig*)	327.62	317.62	307.62	89.6	89.6	89.6	291.6	79.6

Name	33	34	35	36	37	38	39	40
Molar(lbmole/hr)	114.401	114.401	57.032	57.032	3712.094	610.57	610.57	70.947
Temp. (F)	100	98.31	100	100	217.34	184.31	100.79	100.78
Pres.(psig*)	79.6	44	79.6	290.1	240.1	238.7	234.7	234.7

Name	41	42	43	44	45	46	47	48
Molar(lbmole/hr)	70.947	539.623	64.763	64.763	474.86	474.86	12778	9202.036
Temp. (F)	78.82	100.79	100.79	100.79	100.75	100.79	409.76	409.76
Pres.(psig*)	44	234.7	234.7	351.31	234.7	273.7	243.7	331.9

Name	49	50	51	52	53	54	55	56
Molar(lbmole/hr)	9202.036	3576.426	3576.426	4734.204	4734.204	4734.204	3156.22	4130.422
Temp. (F)	439.72	409.76	295	193.89	167	167	166.94	310.03
Pres.(psig*)	245	243.7	30	28.45	25.45	83.16	88.16	30.45

Name	57	58	59	60	61	62	63	64
Molar(lbmole/hr)	2131.979	2131.979	2131.979	1998	1998.441	0.167	1998	1998
Temp. (F)	310.03	310.03	234.41	310.03	310.03	310.03	310.03	203.77
Pres.(psig*)	30.45	121	30.45	30.45	346.25	346.25	346.25	336.25

Name	65	66	67	68	69
Molar(lbmole/hr)	0	0	46.034	116.981	878.486
Temp. (F)	310.03	310.03	110.65	86.15	100
Pres.(psig*)	76.79	76.79	44	44	44.74

Appendice B

ERRORES POR TIPO									SUMA DE % ERRORES POR FILAS
Name	1	2	3	4	5	6	7	8	
Molar(lbmole/hr)	0.27	0.2723	0.00436	0.00475	0.00031	0	0	0.6629	1.214645764
Temp. (F)	0	0	0	0.33229	10.3686	7.00774	7.00774	2.00294	26.71928392
Pres.(psig*)	0.0301	0.0324	0.02655	0.01093	0.07033	0.31554	0.31554	0.00075	0.802210275
% Error	0.1	0.1016	0.0103	0.11599	3.47974	2.44109	2.44109	0.88886	
Name	9	10	11	12	13	14	15	16	
Molar(lbmole/hr)	5.0034	0.27	0.26999	0.17154	0.1704	0.1704	0.1704	0.40116	6.627283151
Temp. (F)	1.3433	0.0037	2.79862	1.97465	0.01217	1.15352	0	0	7.285925564
Pres.(psig*)	0.0327	14.224	0.02654	1.55491	1.83328	0.2614	0.15728	0.16738	18.25698688
% Error	2.1264	4.8324	1.03172	1.2337	0.67195	0.52844	0.10923	0.18952	
Name	17	18	19	20	21	22	23	24	
Molar(lbmole/hr)	0.4012	0.4012	0.40116	0.40116	1.36506	46.4227	0	0	49.39238095
Temp. (F)	0.4031	0.0552	0.01251	0	0	0	0	2.35406	2.8248437
Pres.(psig*)	0.1712	0.1753	0.17961	0.0061	12.082	0.0061	0	0.02657	12.64695375
% Error	0.3252	0.2106	0.19776	0.13576	4.48236	15.4763	0	0.79354	
Name	25	26	27	28	29	30	31	32	
Molar(lbmole/hr)	0.0147	0.0147	0.01469	0.01469	12.951	0.62452	0.62452	12.951	27.20988842
Temp. (F)	0	0.1485	0.16472	1.0879	0.2729	0.2729	0.81832	0	2.765224139
Pres.(psig*)	0.0061	0.0055	0.00481	243.309	0.0021	0.0021	17.1597	0.00563	260.4952713
% Error	0.0069	0.0562	0.06141	81.4707	4.40868	0.29984	6.20084	4.31889	
Name	33	34	35	36	37	38	39	40	
Molar(lbmole/hr)	10.689	10.689	17.4908	17.4908	0.34452	1.77899	*	9.2249	67.7071892
Temp. (F)	0	0.3638	0	1.14263	1.13727	5.9121	*	0.78957	9.345411724
Pres.(psig*)	0.0056	0.0327	0.00563	16.7313	0.60907	0.04233	*	0.04261	17.46927029
% Error	3.5648	3.695	5.83213	11.7882	0.69695	2.5778	0	3.35236	
Name	41	42	43	44	45	46	47	48	
Molar(lbmole/hr)	3.4317	*	0.02793	0.00475	*	0.91295	0.05201	0.00039	4.429737952
Temp. (F)	3.4056	*	0.79942	0.78381	*	0.79942	4.62212	4.62212	15.0324541
Pres.(psig*)	0.0327	*	0.04261	33.2214	*	14.2857	0.08207	26.514	74.17844045
% Error	2.29	0	0.28998	11.3366	0	5.33269	1.5854	10.3788	
Name	49	50	51	52	53	54	55	56	
Molar(lbmole/hr)	0.0004	0.1739	0.28843	5.45961	*	*	7.84817	0.01037	13.78088299
Temp. (F)	5.2728	4.6221	6.08271	2.2558	*	*	1.8206	5.02485	25.07885527
Pres.(psig*)	0.0409	0.0821	0.18533	0.03789	*	*	71.1434	0	71.48958836
% Error	1.7714	1.626	2.18549	2.58443	0	0	26.9374	1.67841	
Name	57	58	59	60	61	62	63	64	
Molar(lbmole/hr)	*	0.001	0.00099	0.00031	0.02238	*	0.00031	*	0.024973426
Temp. (F)	*	5.0249	50.5997	5.02489	5.02489	*	5.93534	*	71.60970538
Pres.(psig*)	*	0.8264	0	0	0.0722	*	0.06905	*	0.967697642
% Error	0	1.9508	16.8669	1.67507	1.70649	0	2.00157	0	
Name	65	66	67	68	69				
Molar(lbmole/hr)	0	*	46.4227	20.3494	0.69764				67.4696784
Temp. (F)	5.0249	*	2.20031	0.59376	0				7.818958756
Pres.(psig*)	1.0288	*	0.03267	0.03267	0.12294				1.217058113
% Error	2.0179	0	16.2185	6.99193	0.27353	% ERRORES POR TIPO			TOTALES
						Error por Flujo molar			237.8566603
						Error por Temp. (F)			168.4806626
						Error por Pres.(psig*)			457.5234771
						ERROR TOTAL			4.79923

Main: Streams

Apendice C

Name	1	2	3	4	5
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	0.0000 *	0.0000 *	305.2508 *	0.1305	0.0000
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	1.5145	0.0000
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	1.9754 *	0.0270 *	33.0003 *	0.8864	0.0000
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	1.3283 *	0.0180 *	27.8072 *	5.8406	0.0000
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	9.6949 *	0.1350 *	17.0772 *	15.3019	0.0000
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	49.1215 *	0.6821 *	6.4815 *	28.4868	0.0036
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	893.0263 *	12.4034 *	0.0000 *	0.0671	11.6095
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	519.1902 *	7.2116 *	0.0000 *	0.0000	99.6193
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	5.4000 *	0.0750 *	0.0000 *	0.0000	0.0003
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.1406	0.0000
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	3.6000 *	0.0500 *	0.0000 *	0.0000	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000	3.6523
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	607.1291 *	8.4326 *	0.0000 *	0.0000	366.2051
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	334.5165 *	4.6459 *	0.0000 *	0.0000	335.8854
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	330.0647 *	4.5839 *	0.0000 *	0.0000	331.6036
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	309.3457 *	4.2968 *	0.0000 *	0.0000	310.9638
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	286.2212 *	3.9758 *	0.0000 *	0.0000	287.7979
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	249.2361 *	3.4617 *	0.0000 *	0.0000	250.6361
Molar Flow (lbmole/hr)	3600. *	50.00 *	389.6 *	52.37	1998.
Mass Flow (lb/hr)	3.790e+05	5264.	3111.	2585	2.525e+05
Temperature (F)	100.0 *	120.0 *	145.9 *	101.2	224.0
Pressure (psig*)	71.08 *	45.50 *	526.0 *	330.0	336.0
Molecular Weight	105.3	105.3	7.984	49.36	126.4
Mass Density (lb/ft3)	42.40	41.77	0.6583	32.34	40.52
Liquid Volume Flow (barrel/day)	3.718e+04	516.3	1031.	328.8	2.380e+04
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
Viscosity (cP)	0.3686	0.3315	0.01169	0.1105	0.2611
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.06603	0.06432	0.07454	0.04935	0.06062
Z Factor	0.03407	0.02302	1.003	0.08655	0.1477
Surface Tension (dyne/cm)	17.94	16.85	---	7.587	14.05
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-55.06	-54.45	-4.261	-30.34	-59.77
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	40.41	42.36	20.93	21.04	65.33

Remarks

Date

Wed Sep 13 17 01:14 2000 | Version

HYSYS v1.5 (Build 1685) | Page No

1 Of

19

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	6y7	8	8/1	8/2	9
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	116.1426
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	7.6219
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	38.8007
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	34.2377
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0080	0.0180	0.0180	25.5727
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	0.0000	7.9581	17.9559	17.9559	16.3053
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	0.0000	398.4339	898.9935	898.9935	11.0323
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	0.0000	191.3538	431.7550	431.7550	1.3343
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0004	0.0009	0.0009	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0159	0.0358	0.0358	0.0921
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	0.0000	107.9328	243.5306	243.5306	0.5855
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0001	0.0002	0.0002	0.0776
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0261
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0087
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0029
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0009
Molar Flow (lbmole/hr)	0.0000	705.7	1592.	1592.	251.8
Mass Flow (lb/hr)	0.0000	5.641e+04	1.273e+05	1.273e+05	5207.
Temperature (F)	324.3	171.7	171.4	171.7	89.43
Pressure (psig*)	76.44	59.74	25.44	59.74	43.99
Molecular Weight	126.4	79.93	79.93	79.93	20.68
Mass Density (lb/ft3)	36.88	36.64	36.59	36.64	0.1962
Liquid Volume Flow (barrel/day)	0.0000	5953.	1.343e+04	1.343e+04	962.2
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Viscosity (cP)	0.1712	0.1682	0.1683	0.1682	0.01249
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.05174	0.05423	0.05426	0.05423	0.03545
Z Factor	0.03574	0.02287	—	0.02287	0.9890
Surface Tension (dyne/cm)	9.376	11.12	11.13	11.12	—
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-55.48	-42.12	-42.14	-42.12	-11.94
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	76.06	29.87	29.86	29.87	32.83

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name	10	10/1	11	12	13
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	1585.3878	1582.6696*
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	5.2978	5.3036*
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	2.0024	2.0024	2.0024	160.8644	163.3275*
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	1.3463	1.3463	1.3463	58.6802	58.9041*
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	9.8299	9.8299	9.8299	36.9164	36.9240*
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	49.8036	49.8036	49.8036	61.3709	61.3725*
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	905.4297	905.4297	905.4297	928.9816	928.9923*
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	526.4018	526.4018	526.4018	530.9982	531.0008*
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	5.4750	5.4750	5.4750	5.4750	5.4750*
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0248	0.0250*
Comp Molar Flow (ThioNaphthene) (lbmole/hr)	3.6500	3.6500	3.6500	3.6500	3.6500*
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000*
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0033	0.0033*
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	615.5618	615.5618	615.5618	618.3844	618.3863*
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	339.1624	339.1624	339.1624	339.7748	339.7753*
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	334.6486	334.6486	334.6486	334.9310	334.9313*
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	313.6425	313.6425	313.6425	313.7634	313.7635*
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	290.1970	290.1970	290.1970	290.2459	290.2459*
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	252.6978	252.6978	252.6978	252.7156	252.7156*
Molar Flow (lbmole/hr)	3650.	3650.	3650.	5527.	5527.*
Mass Flow (lb/hr)	3.843e+05	3.843e+05	3.843e+05	3.963e+05	3.964e+05
Temperature (F)	100.4	100.4	103.2	110.8	225.2*
Pressure (psig*)	45.50	45.50	538.9	507.2	487.2*
Molecular Weight	105.3	105.3	105.3	71.70	71.71
Mass Density (lb/ft3)	42.37	42.37	42.65	13.59	10.80
Liquid Volume Flow (barrel/day)	3.769e+04	3.769e+04	3.769e+04	4.226e+04	4.227e+04
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.3019	0.3291
Viscosity (cP)	0.3677	0.3677	0.3645	--	--
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.06599	0.06599	0.06575	--	--
Z Factor	0.02349	0.02349	0.2249	--	--
Surface Tension (dyne/cm)	17.91	17.91	17.76	--	--
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-55.05	-55.05	-54.89	-37.21	-34.39
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	40.46	40.46	40.60	33.70	41.86

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	13/1	14	15	16	17
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	1585.3878	1582.6696	1582.6696	1395.0407	1395.0407
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	5.2978	5.3036	5.3036	14.4353	14.4353
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	160.8644	163.3275	163.3275	166.8829	166.8829
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	58.6802	58.9041	58.9041	69.6281	69.6281
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	36.9164	36.9240	36.9240	50.9040	50.9040
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	61.3709	61.3725	61.3725	70.3313	70.3313
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	928.9816	928.9923	928.9923	945.2760	945.2760
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	530.9982	531.0008	531.0008	536.6296	536.6296
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	5.4750	5.4750	5.4750	0.0012	0.0012
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0248	0.0250	0.0250	0.2973	0.2973
Comp Molar Flow (ThioNaphhtene) (lbmole/hr)	3.6500	3.6500	3.6500	0.0035	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0033	0.0033	0.0033	3.6523	3.6523
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	618.3844	618.3883	618.3883	612.7968	612.7968
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	339.7748	339.7753	339.7753	336.2426	336.2426
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	334.9310	334.9313	334.9313	331.5833	331.5833
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	313.7634	313.7635	313.7635	310.7850	310.7850
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	290.2459	290.2459	290.2459	287.5642	287.5642
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	252.7156	252.7156	252.7156	250.4063	250.4063
Molar Flow (lb/hr)	5527.	5527.	5527.	5382.	5382.
Mass Flow (lb/hr)	3.963e+05	3.964e+05	3.964e+05	3.964e+05	3.964e+05
Temperature (F)	225.2	508.5	596.0	586.0	299.9
Pressure (psig*)	487.2	467.2	405.2	376.2	366.2
Molecular Weight	71.70	71.71	71.71	73.64	73.64
Mass Density (lb/ft3)	10.79	4.101	2.991	2.904	7.416
Liquid Volume Flow (barrel/day)	4.226e+04	4.227e+04	4.227e+04	4.205e+04	4.205e+04
Vapour Fraction	0.3282	1.0000	1.0000	1.0000	0.3886
Viscosity (cP)	--	0.01886	0.01955	0.01880	--
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	--	0.03543	0.03880	0.03680	--
Z Factor	--	0.8055	0.8817	0.8758	--
Surface Tension (dyne/cm)	--	--	--	--	--
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-34.38	-23.83	-21.25	-22.30	-33.15
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	41.85	64.76	69.58	70.67	48.73

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name	18	19	20	21	22
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	1395.0411	1395.0411	1395.0411	1336.6943	57.9264
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	14.4353	14.4353	14.4353	5.5389	0.2400
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	166.8829	166.8829	166.8829	132.9576	5.7618
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	69.6281	69.6281	69.6281	30.8883	1.3386
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	50.9040	50.9040	50.9040	10.4644	0.4535
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	70.3313	70.3313	70.3313	5.3171	0.2304
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	945.2759	945.2759	945.2759	24.6246	1.0671
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	536.6295	536.6295	536.6295	4.8061	0.2083
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0012	0.0012	0.0012	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.2973	0.2973	0.2973	0.0260	0.0011
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0035	0.0035	0.0035	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	3.6523	3.6523	3.6523	0.0035	0.0002
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	612.7967	612.7967	612.7967	2.9515	0.1279
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	336.2426	336.2426	336.2426	0.6404	0.0278
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	331.5833	331.5833	331.5833	0.2954	0.0128
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	310.7849	310.7849	310.7849	0.1264	0.0055
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	287.5641	287.5641	287.5641	0.0511	0.0022
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	250.4062	250.4062	250.4062	0.0186	0.0008
Molar Flow (lbmole/hr)	5382.	5382.	5382.	1555	67.40
Mass Flow (lb/hr)	3.964e+05	3.964e+05	3.964e+05	9339.	404.7
Temperature (F)	203.7	171.2	110.0	110.0	110.0
Pressure (psig)	356.2	346.2	327.6	327.6	327.6
Molecular Weight	73.64	73.64	73.64	6.004	6.004
Mass Density (lb/ft3)	9.375	9.817	10.59	0.3313	0.3313
Liquid Volume Flow (barrel/day)	4.205e+04	4.205e+04	4.205e+04	3701	160.4
Vapour Fraction	0.3131	0.3018	0.2890	1.0000	1.0000
Viscosity (cP)	---	---	---	0.01041	0.01041
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	---	---	---	0.08158	0.08158
Z Factor	---	---	---	1.005	1.005
Surface Tension (dyne/cm)	---	---	---	---	---
Molar Enthalpy (kcal/qmole)	-36.06	-36.92	-38.42	-2.885	-2.885
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	41.41	39.04	34.59	19.38	19.38

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name	22/G	22/I	23	24	24/I
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	1336.6943	0.0000	1278.7679	1280.1369 *	1278.7679
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	5.5389	0.0000	5.2989	5.2978 *	5.2989
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	132.9576	0.0000	127.1958	125.8617 *	127.1958
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	30.8883	0.0000	29.5497	29.5267 *	29.5497
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	10.4644	0.0000	10.0109	10.0093 *	10.0109
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	5.3171	0.0000	5.0867	5.0858 *	5.0867
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	24.6246	0.0000	23.5575	23.5519 *	23.5575
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	4.8061	0.0000	4.5978	4.5965 *	4.5978
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0260	0.0000	0.0249	0.0248 *	0.0249
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0035	0.0000	0.0033	0.0033 *	0.0033
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	2.9515	0.0000	2.8236	2.8226 *	2.8236
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	0.6404	0.0000	0.6126	0.6124 *	0.6126
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	0.2954	0.0000	0.2826	0.2825 *	0.2826
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	0.1264	0.0000	0.1210	0.1209 *	0.1210
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	0.0511	0.0000	0.0489	0.0489 *	0.0489
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	0.0186	0.0000	0.0178	0.0178 *	0.0178
Molar Flow (lbmole/hr)	1555.	0.0000	1488. *	1488. *	1488.
Mass Flow (lb/hr)	9339.	0.0000	8934.	8914.	8934.
Temperature (F)	110.0	110.0	110.0	195.7 *	195.7
Pressure (psig*)	327.6	327.6	327.6	507.2 *	507.2 *
Molecular Weight	6.004	101.1	6.004	5.990	6.004
Mass Density (lb/ft3)	0.3313	41.84	0.3313	0.4374	0.4384
Liquid Volume Flow (barrel/day)	3701.	0.0000	3541	3539	3541.
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Viscosity (cP)	0.01041	0.3306	0.01041	0.01160	0.01161
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.08158	0.06329	0.08158	0.09169	0.09157
Z Factor	1.005	0.1340	1.005	1.010	1.010
Surface Tension (dyne/cm)	--	16.62	--	--	--
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-2.885	-52.86	-2.885	-2.490	-2.506
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	19.38	40.77	19.38	19.62	19.65

Remarks:

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	25	26	27	27/1	28
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	58.3467	58.3467	58.3467	58.3467	58.3467
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	8.8964	8.8964	8.8964	8.8964	8.8964
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	33.9253	33.9253	33.9253	33.9253	33.9253
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	38.7398	38.7398	38.7398	38.7398	38.7398
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	40.4396	40.4396	40.4397	40.4396	40.4397
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	65.0143	65.0143	65.0143	65.0143	65.0143
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	920.6514	920.6514	920.6514	920.6514	920.6514
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	531.8234	531.8234	531.8234	531.8234	531.8234
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0012	0.0012	0.0012	0.0012	0.0012
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.2713	0.2713	0.2713	0.2713	0.2713
Comp Molar Flow (ThioNaphhtene) (lbmole/hr)	0.0035	0.0035	0.0035	0.0035	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	3.6488	3.6488	3.6488	3.6488	3.6488
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	609.8452	609.8452	609.8452	609.8452	609.8452
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	335.6022	335.6022	335.6022	335.6022	335.6022
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	331.2879	331.2879	331.2879	331.2879	331.2879
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	310.6585	310.6585	310.6585	310.6585	310.6585
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	287.5130	287.5130	287.5130	287.5130	287.5130
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	250.3876	250.3876	250.3876	250.3876	250.3876
Molar Flow (lbmole/hr)	3827.	3827.	3827.	3827.	3827.
Mass Flow (lb/hr)	3.870e+05	3.870e+05	3.870e+05	3.870e+05	3.870e+05
Temperature (F)	110.0	149.9	220.8	220.9	220.8
Pressure (psig)	327.6	317.6	307.6	307.6	307.6
Molecular Weight	101.1	101.1	101.1	101.1	101.1
Mass Density (lb/ft3)	41.84	40.56	38.11	38.11	38.11
Liquid Volume Flow (barrel/day)	3.835e+04	3.835e+04	3.835e+04	3.835e+04	3.835e+04
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Viscosity (cP)	0.3306	0.2717	0.1970	0.1970	0.1970
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.06329	0.05993	0.05357	0.05357	0.05357
Z Factor	0.1340	0.1254	0.1159	0.1159	0.1159
Surface Tension (dyne/cm)	16.62	14.54	11.01	11.00	11.01
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-52.86	-51.65	-49.34	-49.34	-49.34
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	40.77	44.48	50.91	50.92	50.91

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name	29	30	31	32	33
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	48.8071	9.5396	9.5396	48.8071	48.6972
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	2.4386	6.4578	6.4578	2.4386	2.2461
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	20.0215	13.9038	13.9038	20.0215	19.7432
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	12.0692	26.6706	26.6706	12.0692	11.2429
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	6.6513	33.7884	33.7884	6.6513	5.4123
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	5.0794	59.9349	59.9349	5.0794	2.9231
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	33.4807	887.1707	887.1707	33.4807	9.9517
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	9.0744	522.7490	522.7490	9.0744	1.1261
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0012	0.0012	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0237	0.2475	0.2475	0.0237	0.0144
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0035	0.0035	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0121	3.6367	3.6367	0.0121	0.0002
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	6.4293	603.4159	603.4159	6.4293	0.4376
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	1.8132	333.7889	333.7889	1.8132	0.0498
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	1.0334	330.2545	330.2545	1.0334	0.0133
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	0.5492	310.1093	310.1093	0.5492	0.0032
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	0.2786	287.2344	287.2344	0.2786	0.0007
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	0.1288	250.2588	250.2588	0.1288	0.0001
Molar Flow (lbmole/hr)	147.9	3679.	3679	147.9	101.9
Mass Flow (lb/hr)	5764.	3.813e+05	3.813e+05	5764.	2105.
Temperature (F)	219.1	219.1	220.3	100.0*	100.0
Pressure (psig*)	89.60	89.60	241.6	79.60	79.60
Molecular Weight	38.98	103.6	103.6	38.98	20.67
Mass Density (lb/ft3)	0.5623	38.28	38.44	0.8590	0.3182
Liquid Volume Flow (barrel/day)	773.3	3.758e+04	3.758e+04	773.3	385.9
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	0.6888	1.0000
Viscosity (cP)	0.01393	0.2041	0.2039	---	0.01300
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.03021	0.05471	0.05460	---	0.03764
Z Factor	0.9604	0.03751	0.09344	---	0.9835
Surface Tension (dyne/cm)	---	11.40	11.35	---	---
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-18.53	-50.58	-50.53	-21.85	-11.96
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	40.01	51.55	51.59	30.52	31.92

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name	34	35	36	37	38 @COL3
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	48.6972	0.1100	0.1100	9.6495	10.8264
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	2.2461	0.1925	0.1925	6.6503	20.3073
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	19.7432	0.2783	0.2783	14.1821	22.1750
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	11.2429	0.8264	0.8264	27.4970	80.1643
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	5.4123	1.2390	1.2390	35.0274	172.9925
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	2.9231	2.1563	2.1563	62.0912	298.5154
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	9.9517	23.5290	23.5290	910.6997	0.6860
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	1.1261	7.9484	7.9484	530.6974	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0012	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0144	0.0093	0.0093	0.2569	1.4850
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0035	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0002	0.0119	0.0119	3.6486	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	0.4376	5.9917	5.9917	609.4077	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	0.0498	1.7634	1.7634	335.5524	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	0.0133	1.0202	1.0202	331.2747	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	0.0032	0.5460	0.5460	310.6553	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	0.0007	0.2779	0.2779	287.5123	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	0.0001	0.1287	0.1287	250.3875	0.0000
Molar Flow (lbmole/hr)	101.9	46.03	46.03	3725.	607.2
Mass Flow (lb/hr)	2105.	3659.	3659.	3.849e+05	2.859e+04
Temperature (F)	97.96	100.0	101.1	219.1	170.8
Pressure (psig*)	43.99	79.60	241.6	241.6	238.6
Molecular Weight	20.67	79.49	79.49	103.3	47.09
Mass Density (lb/ft3)	0.1930	39.27	39.37	38.45	2.266
Liquid Volume Flow (barrel/day)	385.9	387.4	387.4	3.797e+04	3710.
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Viscosity (cP)	0.01290	0.2315	0.2309	0.2040	0.01082
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.03741	0.06006	0.05996	0.05462	0.01494
Z Factor	0.9898	0.03064	0.08485	0.09331	0.7677
Surface Tension (dyne/cm)	—	14.63	14.57	11.36	—
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-11.96	-43.71	-43.67	-50.44	-24.85
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	32.90	27.42	27.46	51.31	35.05

Remarks.

Main: Streams

Apendice C

Name	40	41	43	44	46 @COL3
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	9.5190	9.5190	0.1305	0.1305	1.1768
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	5.1357	5.1357	1.5145	1.5145	13.6570
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	13.2957	13.2957	0.8864	0.8864	7.9929
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	21.6563	21.6563	5.8406	5.8406	52.6674
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	19.7069	19.7069	15.3019	15.3019	137.9836
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	13.1518	13.1518	28.4868	28.4868	256.8767
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	0.0135	0.0135	0.0671	0.0671	0.6054
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0765	0.0765	0.1406	0.1406	1.2679
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Molar Flow (lbmole/hr)	82.56	82.56	52.37	52.37	472.2
Mass Flow (lb/hr)	2697.	2697.	2585.	2585	2.331e+04
Temperature (F)	99.99	74.59	99.99	100.0*	100.0
Pressure (psig*)	234.6	43.99*	234.6	234.6	234.6
Molecular Weight	32.67	32.67	49.36	49.36	49.36
Mass Density (lb/ft3)	1.557	0.3263	32.25	32.25	32.25
Liquid Volume Flow (barrel/day)	415.9	415.9	328.8	328.8	2965.
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Viscosity (cP)	0.01114	0.01006	0.1107	0.1107	0.1107
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.01797	0.01615	0.04950	0.04950	0.04950
Z Factor	—	0.9657	0.06268	—	0.06268
Surface Tension (dyne/cm)	—	—	7.654	7.654	7.654
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-19.31	-19.31	-30.36	-30.36	-30.36
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	36.46	39.20	21.02	21.02	21.02

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	47 @COL3	48 @TPL1	49 @TPL1	50	51
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	0.0001	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	0.0001	0.0001	0.0001 *	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	0.0640	0.0460	0.0454 *	0.0180	0.0180
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	63.9909	46.0313	43.5383 *	17.9596	17.9596
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	3244.1296	2333.6343	2333.5106 *	910.4953	910.4953
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	1892.7575	1361.5374	1362.0602 *	531.2201	531.2201
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0042	0.0030	0.0030 *	0.0012	0.0012
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.1275	0.0917	0.0878 *	0.0358	0.0358
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0125	0.0090	0.0090 *	0.0035	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000 *	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	13.0131	9.3608	9.3644 *	3.6522	3.6522
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	2173.4831	1563.4747	1564.0754 *	610.0084	610.0084
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	1196.7646	860.8814	861.2123 *	335.8832	335.8832
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	1181.5080	849.9067	850.2334 *	331.6013	331.6013
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	1107.9681	797.0065	797.3128 *	310.9616	310.9616
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	1025.4274	737.6316	737.9151 *	287.7958	287.7958
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	893.0197	642.3854	642.6322 *	250.6343	250.6343
Molar Flow (lbmole/hr)	1.279e+04	9202 *	9202 *	3590.	3590.
Mass Flow (lb/hr)	1.353e+06	9.734e+05	9.736e+05	3.798e+05	3.798e+05
Temperature (F)	428.3	428.3	462.6 *	428.3	314.0
Pressure (psig*)	243.9	243.9	244.9 *	243.9	30.96
Molecular Weight	105.8	105.8	105.8	105.8	105.8
Mass Density (lb/ft3)	29.21	29.21	6.755	29.21	0.7443
Liquid Volume Flow (barrel/day)	1.327e+05	9.543e+04	9.544e+04	3.723e+04	3.723e+04
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.5260	0.0000	0.7811
Viscosity (cP)	0.08697	0.08697	---	0.08697	---
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.01985	0.01985	---	0.01985	---
Z Factor	0.09702	---	---	---	---
Surface Tension (dyne/cm)	3.000	3.000	---	3.000	---
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-43.02	-43.02	-39.46	-43.02	-43.02
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	71.24	71.24	78.33	71.24	72.86

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name		52 @COL4	55 @COL4	56 @TPL2	58 @TPL2	59 @TPL2
Comp Molar Flow (Hydrogen)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (H2S)	(lbmole/hr)	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (Methane)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (Ethane)	(lbmole/hr)	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (Propane)	(lbmole/hr)	0.0538	0.0358	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (n-Butane)	(lbmole/hr)	53.8012	35.8453	0.0075	0.0039	0.0038 *
Comp Molar Flow (n-Pentane)	(lbmole/hr)	2693.6457	1794.6522	23.9978	12.3883	12.4960 *
Comp Molar Flow (n-Hexane)	(lbmole/hr)	1293.6635	861.9085	205.9209	106.3015	106.4558 *
Comp Molar Flow (Thiophene)	(lbmole/hr)	0.0027	0.0018	0.0006	0.0003	0.0003 *
Comp Molar Flow (1-Butene)	(lbmole/hr)	0.1072	0.0714	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (ThioNaphtene)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0073	0.0037	0.0037 *
Comp Molar Flow (Thiophane*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000 *
Comp Molar Flow (E-Benzene)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	7.5495	3.8972	3.8973 *
Comp Molar Flow (NBP[0]189*)	(lbmole/hr)	729.6885	486.1579	756.9743	390.7692	390.4966 *
Comp Molar Flow (NBP[0]235*)	(lbmole/hr)	0.0005	0.0004	694.3011	358.4157	358.4181 *
Comp Molar Flow (NBP[0]271*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	685.4504	353.8468	353.8491 *
Comp Molar Flow (NBP[0]306*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	642.7863	331.8225	331.8247 *
Comp Molar Flow (NBP[0]341*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	594.9005	307.1026	307.1047 *
Comp Molar Flow (NBP[0]377*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	518.0843	267.4482	267.4500 *
Molar Flow	(lbmole/hr)	4771.	3179.	4130.	2132.	2132. *
Mass Flow	(lb/hr)	3.813e+05	2.541e+05	5.220e+05	2.694e+05	2.694e+05
Temperature	(F)	199.2	171.4	323.9	323.9	348.0 *
Pressure	(psig*)	28.44	25.44	30.45	30.45	30.45 *
Molecular Weight		79.93	79.93	126.4	126.4	126.4
Mass Density	(lb/ft3)	0.4893	36.61	36.82	36.82	1.571
Liquid Volume Flow	(barrel/day)	4.024e+04	2.681e+04	4.920e+04	2.540e+04	2.540e+04
Vapour Fraction		1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4160
Viscosity	(cP)	0.007841	0.1683	0.1712	0.1712	—
Thermal Conductivity	(Btu/hr-ft-F)	0.01125	0.05426	0.05178	0.05178	—
Z Factor		0.9183	0.01185	0.01705	0.01705	—
Surface Tension	(dyne/cm)	—	11.13	9.395	9.395	—
Molar Enthalpy	(kcal/gmole)	-35.38	-42.14	-55.50	-55.50	-51.42
Molar Entropy	(Btu/lbmole-F)	48.64	29.86	76.05	76.05	85.26

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	60	61	63	65	67
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	57.9264
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2400
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	5.7618
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.3386
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4535
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	0.0036	0.0036	0.0036	0.0036	0.2304
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	11.6095	11.6095	11.6095	0.0000	1.0671
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	99.6193	99.6193	99.6193	0.0000	0.2083
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0003	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0011
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0035	0.0035	0.0035	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	3.6523	3.6523	3.6523	0.0000	0.0002
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	366.2051	366.2051	366.2051	0.0000	0.1279
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	335.8854	335.8854	335.8854	0.0000	0.0278
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	331.6036	331.6036	331.6036	0.0000	0.0128
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	310.9638	310.9638	310.9638	0.0000	0.0055
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	287.7979	287.7979	287.7979	0.0000	0.0022
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	250.6361	250.6361	250.6361	0.0000	0.0008
Molar Flow (lbmole/hr)	1998.	1998.	1998.	0.0000	67.40
Mass Flow (lb/hr)	2.525e+05	2.525e+05	2.525e+05	0.0000	404.7
Temperature (F)	323.9	323.9	326.7	323.9	108.2
Pressure (psig*)	30.45	30.45	346.0	30.45	43.99 *
Molecular Weight	126.4	126.4	126.4	126.4	6.004
Mass Density (lb/ft3)	36.81	36.81	37.28	36.81	0.05444
Liquid Volume Flow (barrel/day)	2.380e+04	2.380e+04	2.380e+04	0.0000	160.4
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Viscosity (cP)	0.1712	0.1712	0.1713	0.1712	0.01030
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.05178	0.05178	0.05151	0.05178	0.08074
Z Factor	---	---	0.1436	---	1.001
Surface Tension (dyne/cm)	9.395	9.395	9.299	9.395	---
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-55.50	-55.50	-55.35	-55.50	-2.885
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	76.05	76.05	76.14	76.05	22.99

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	68	69	69/1	40/1 @COL3	43/1 @COL3
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	67.4454	0.0000	0.0000	9.5190	0.1305
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	5.3758	0.0000	0.0000	5.1357	1.5145
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	19.0575	0.0000	0.0000	13.2957	0.8864
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	22.9949	0.0000	0.0000	21.6563	5.8406
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	20.1604	0.0100	0.0100	19.7069	15.3019
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	13.3823	9.9979	9.9979	13.1518	28.4868
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	1.0806	500.5596	500.5596	0.0135	0.0671
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	0.2083	240.4012	240.4012	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0005	0.0005	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0776	0.0199	0.0199	0.0765	0.1406
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	0.1279	135.5978	135.5978	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	0.0278	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	0.0128	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	0.0055	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Molar Flow (lbmole/hr)	150.0	886.6	886.6	82.56	52.37
Mass Flow (lb/hr)	3102.	7.086e+04	7.086e+04	2697.	2585
Temperature (F)	83.45	100.0*	171.7	100.0	100.0
Pressure (psig*)	43.99	44.68	59.74	234.6	234.6
Molecular Weight	20.69	79.93	79.93	32.67	49.36
Mass Density (lb/ft3)	0.1986	39.23	36.64	1.557	32.25
Liquid Volume Flow (barrel/day)	576.3	7479.	7479	415.9	328.8
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
Viscosity (cP)	0.01220	0.2309	0.1682	0.01114	0.1107
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	0.03415	0.06106	0.05423	0.01797	0.04950
Z Factor	0.9884	0.01899	0.02287	0.8594	0.06268
Surface Tension (dyne/cm)	---	15.19	11.12	---	7.654
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-11.93	-43.98	-42.12	-19.31	-30.36
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	32.63	24.26	29.87	36.46	21.02

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name	49 @COL3	8/1 @COL4	56 @COL4	59 @COL4	37 @TPL1
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	9.6495
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	6.6503
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	14.1821
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	27.4970
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	0.0454	0.0180	0.0000	0.0000	35.0274
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	43.5383	17.9559	0.0075	0.0038	62.0912
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	2333.5106	898.9935	23.9978	12.4980	910.6997
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	1362.0602	431.7550	205.9209	106.4558	530.6974
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	0.0030	0.0009	0.0006	0.0003	0.0012
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	0.0878	0.0358	0.0000	0.0000	0.2569
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	0.0090	0.0000	0.0073	0.0037	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	9.3644	0.0000	7.5495	3.8973	3.6486
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	1564.0754	243.5308	756.9743	390.4966	609.4077
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	861.2123	0.0002	694.3011	358.4181	335.5524
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	850.2334	0.0000	685.4504	353.8491	331.2747
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	797.3128	0.0000	642.7863	331.8247	310.6553
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	737.9151	0.0000	594.9005	307.1047	287.5123
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	642.6322	0.0000	518.0843	267.4500	250.3875
Molar Flow (lbmole/hr)	9202.	1592	4130.	2132.	3725
Mass Flow (lb/hr)	9.736e+05	1.273e+05	5.220e+05	2.694e+05	3.849e+05
Temperature (F)	462.6	171.4	323.9	348.0	219.1
Pressure (psig*)	244.9	25.44	30.45	30.45	241.6
Molecular Weight	105.8	79.93	126.4	126.4	103.3
Mass Density (lb/ft3)	6.755	36.61	36.82	1.571	38.45
Liquid Volume Flow (barrel/day)	9.544e+04	1.343e+04	4.920e+04	2.540e+04	3.797e+04
Vapour Fraction	0.5260	0.0000	0.0000	0.4160	0.0000
Viscosity (cP)	---	0.1683	0.1712	---	0.2040
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	---	0.05426	0.05178	---	0.05462
Z Factor	---	0.01185	0.01705	---	0.09331
Surface Tension (dyne/cm)	---	11.13	9.395	---	11.36
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	-39.46	-42.14	-55.50	-51.42	-50.44
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	78.33	29.86	76.05	85.26	51.31

Remarks.

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name		40 @TPL1	43 @TPL1	47 @TPL1	49/1 @TPL1	50 @TPL1
Comp Molar Flow (Hydrogen)	(lbmole/hr)	9.5190	0.1305	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (H2S)	(lbmole/hr)	5.1357	1.5145	0.0001	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Methane)	(lbmole/hr)	13.2957	0.8864	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (Ethane)	(lbmole/hr)	21.6563	5.8406	0.0001	0.0001	0.0000
Comp Molar Flow (Propane)	(lbmole/hr)	19.7069	15.3019	0.0640	0.0460	0.0180
Comp Molar Flow (n-Butane)	(lbmole/hr)	13.1518	28.4868	63.9909	46.0313	17.9596
Comp Molar Flow (n-Pentane)	(lbmole/hr)	0.0135	0.0671	3244.1296	2333.6343	910.4953
Comp Molar Flow (n-Hexane)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	1892.7575	1361.5374	531.2201
Comp Molar Flow (Thiophene)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0042	0.0030	0.0012
Comp Molar Flow (1-Butene)	(lbmole/hr)	0.0765	0.1406	0.1275	0.0917	0.0358
Comp Molar Flow (ThioNaphtene)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0125	0.0090	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	13.0131	9.3608	3.6522
Comp Molar Flow (NBPI[0]189*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	2173.4831	1563.4747	610.0084
Comp Molar Flow (NBPI[0]235*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	1196.7646	860.8814	335.8832
Comp Molar Flow (NBPI[0]271*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	1181.5080	849.9067	331.6013
Comp Molar Flow (NBPI[0]306*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	1107.9681	797.0065	310.9616
Comp Molar Flow (NBPI[0]341*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	1025.4274	737.6316	287.7958
Comp Molar Flow (NBPI[0]377*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	893.0197	642.3854	250.6343
Molar Flow	(lbmole/hr)	82.56	52.37	1.279e+04	9202.	3590.
Mass Flow	(lb/hr)	2697.	2585.	1.353e+06	9.734e+05	3.798e+05
Temperature	(F)	99.99	99.99	428.3	462.5	428.3
Pressure	(psig*)	234.6	234.6	243.9	244.9	243.9
Molecular Weight		32.67	49.36	105.8	105.8	105.8
Mass Density	(lb/ft3)	1.557	32.25	29.21	6.754	29.21
Liquid Volume Flow	(barrel/day)	415.9	328.8	1.327e+05	9.543e+04	3.723e+04
Vapour Fraction		1.0000	0.0000	0.0000	0.5260	0.0000
Viscosity	(cP)	0.01114	0.1107	0.08697	---	0.08697
Thermal Conductivity	(Btu/hr-ft-F)	0.01797	0.04950	0.01985	---	0.01985
Z Factor		---	0.06268	---	---	---
Surface Tension	(dyne/cm)	---	7.654	3.000	---	3.000
Molar Enthalpy	(kcal/gmole)	-19.31	-30.36	-43.02	-39.46	-43.02
Molar Entropy	(Btu/lbmole-F)	36.46	21.02	71.24	78.31	71.24

Remarks

* Specified by user

Main: Streams

Apendice C

Name		8/1 @TPL2	51 @TPL2	59/1 @TPL2	60 @TPL2	Boilup @COL1
Comp Molar Flow (Hydrogen)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (H2S)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (Methane)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (Ethane)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (Propane)	(lbmole/hr)	0.0180	0.0180	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (n-Butane)	(lbmole/hr)	17.9559	17.9596	0.0039	0.0036	---
Comp Molar Flow (n-Pentane)	(lbmole/hr)	898.9935	910.4953	12.3883	11.6095	---
Comp Molar Flow (n-Hexane)	(lbmole/hr)	431.7550	531.2201	106.3015	99.6193	---
Comp Molar Flow (Thiophene)	(lbmole/hr)	0.0009	0.0012	0.0003	0.0003	---
Comp Molar Flow (1-Butene)	(lbmole/hr)	0.0358	0.0358	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (ThioNaphtene)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0035	0.0037	0.0035	---
Comp Molar Flow (Thiophane*)	(lbmole/hr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	---
Comp Molar Flow (E-Benzene)	(lbmole/hr)	0.0000	3.6522	3.8972	3.6523	---
Comp Molar Flow (NBP[0]189*)	(lbmole/hr)	243.5306	610.0084	390.7692	366.2051	---
Comp Molar Flow (NBP[0]235*)	(lbmole/hr)	0.0002	335.8832	358.4157	335.8854	---
Comp Molar Flow (NBP[0]271*)	(lbmole/hr)	0.0000	331.6013	353.8468	331.6036	---
Comp Molar Flow (NBP[0]306*)	(lbmole/hr)	0.0000	310.9616	331.8225	310.9638	---
Comp Molar Flow (NBP[0]341*)	(lbmole/hr)	0.0000	287.7958	307.1026	287.7979	---
Comp Molar Flow (NBP[0]377*)	(lbmole/hr)	0.0000	250.6343	267.4482	250.6361	---
Molar Flow	(lbmole/hr)	1592.	3590.	2132.	1998.	---
Mass Flow	(lb/hr)	1.273e+05	3.798e+05	2.694e+05	2.525e+05	---
Temperature	(F)	171.4	314.0	348.0	323.9	---
Pressure	(psig*)	25.44	30.96	30.45	30.45	244.9
Molecular Weight		79.93	105.8	126.4	126.4	---
Mass Density	(lb/ft3)	36.59	0.7443	1.571	36.82	---
Liquid Volume Flow	(barrel/day)	1.343e+04	3.723e+04	2.540e+04	2.380e+04	---
Vapour Fraction		0.0000	0.7811	0.4160	0.0000	1.0000
Viscosity	(cP)	0.1683	---	---	0.1712	---
Thermal Conductivity	(Btu/hr-ft-F)	0.05426	---	---	0.05178	---
Z Factor		---	---	---	0.01705	-0.01043
Surface Tension	(dyne/cm)	11.13	---	---	9.395	---
Molar Enthalpy	(kcal/gmole)	-42.14	-43.02	-51.42	-55.50	---
Molar Entropy	(Btu/lbmole-F)	29.86	72.86	85.26	76.05	---

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name		Reflux @COL1	To Condenser @COL1	To Reboiler @COL1	Boilup @COL2	Reflux @COL2
Comp Molar Flow (Hydrogen)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (H2S)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (Methane)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (Ethane)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (Propane)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (n-Butane)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (n-Pentane)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (n-Hexane)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (Thiophene)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (1-Butene)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (ThioNaphtene)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (Thiophane*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (E-Benzene)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (NBP[0]189*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (NBP[0]235*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (NBP[0]271*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (NBP[0]306*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (NBP[0]341*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Comp Molar Flow (NBP[0]377*)	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Molar Flow	(lbmole/hr)	---	---	---	---	---
Mass Flow	(lb/hr)	---	---	---	---	---
Temperature	(F)	---	---	---	---	---
Pressure	(psig*)	234.6	---	---	30.69	25.44
Molecular Weight		---	---	---	---	---
Mass Density	(lb/ft3)	---	---	---	---	---
Liquid Volume Flow	(barrel/day)	---	---	---	---	---
Vapour Fraction		---	---	---	1.0000	---
Viscosity	(cP)	---	---	---	---	---
Thermal Conductivity	(Btu/hr-ft-F)	---	---	---	---	---
Z Factor		-0.0006023	---	---	-0.01250	-0.0001313
Surface Tension	(dyne/cm)	---	---	---	---	---
Molar Enthalpy	(kcal/gmole)	---	---	---	---	---
Molar Entropy	(Btu/lbmole-F)	---	---	---	---	---

Remarks

Main: Streams

Apendice C

Name	To Condenser @COL2	To Reboiler @COL2	51 @COL4	37 @COL3
Comp Molar Flow (Hydrogen) (lbmole/hr)	---	---	0.0000	9.6495
Comp Molar Flow (H2S) (lbmole/hr)	---	---	0.0000	6.6503
Comp Molar Flow (Methane) (lbmole/hr)	---	---	0.0000	14.1821
Comp Molar Flow (Ethane) (lbmole/hr)	---	---	0.0000	27.4970
Comp Molar Flow (Propane) (lbmole/hr)	---	---	0.0180	35.0274
Comp Molar Flow (n-Butane) (lbmole/hr)	---	---	17.9596	62.0912
Comp Molar Flow (n-Pentane) (lbmole/hr)	---	---	910.4953	910.6997
Comp Molar Flow (n-Hexane) (lbmole/hr)	---	---	531.2201	530.6974
Comp Molar Flow (Thiophene) (lbmole/hr)	---	---	0.0012	0.0012
Comp Molar Flow (1-Butene) (lbmole/hr)	---	---	0.0358	0.2569
Comp Molar Flow (ThioNaphtene) (lbmole/hr)	---	---	0.0035	0.0035
Comp Molar Flow (Thiophane*) (lbmole/hr)	---	---	0.0000	0.0000
Comp Molar Flow (E-Benzene) (lbmole/hr)	---	---	3.6522	3.6486
Comp Molar Flow (NBP[0]189*) (lbmole/hr)	---	---	610.0084	609.4077
Comp Molar Flow (NBP[0]235*) (lbmole/hr)	---	---	335.8832	335.5524
Comp Molar Flow (NBP[0]271*) (lbmole/hr)	---	---	331.6013	331.2747
Comp Molar Flow (NBP[0]306*) (lbmole/hr)	---	---	310.9616	310.6553
Comp Molar Flow (NBP[0]341*) (lbmole/hr)	---	---	287.7958	287.5123
Comp Molar Flow (NBP[0]377*) (lbmole/hr)	---	---	250.6343	250.3875
Molar Flow (lbmole/hr)	---	---	3590.	3725.
Mass Flow (lb/hr)	---	---	3.798e+05	3.849e+05
Temperature (F)	---	---	314.0	219.1
Pressure (psig*)	---	---	30.96	241.6
Molecular Weight	---	---	105.8	103.3
Mass Density (lb/ft3)	---	---	0.7443	38.45
Liquid Volume Flow (barrel/day)	---	---	3.723e+04	3.797e+04
Vapour Fraction	---	---	0.7811	0.0000
Viscosity (cP)	---	---	---	0.2040
Thermal Conductivity (Btu/hr-ft-F)	---	---	---	0.05462
Z Factor	---	---	---	0.09331
Surface Tension (dyne/cm)	---	---	---	11.36
Molar Enthalpy (kcal/gmole)	---	---	-43.02	-50.44
Molar Entropy (Btu/lbmole-F)	---	---	72.86	51.31

Remarks

* Specified by user