



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**  
**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
ZARAGOZA**

*INGENIERÍA QUÍMICA*

**“DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE  
DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL  
CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS”**

**TESIS**

*PARA OBTENER EL TÍTULO DE:*

**INGENIERO QUÍMICO**

*PRESENTA*

**JESSICA MUCIÑO CHÁVEZ**

**DANIEL RAMIRO CARMONA**

*ASESOR*

**Dr. NÉSTOR NOÉ LÓPEZ CASTILLO**



México D.F. 2016



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



## AGRADECIMIENTOS

Agradezco principalmente a mis papás Beatriz Chávez Contreras y Juan Carlos Muciño Vargas por siempre brindarme su apoyo, estar conmigo en las buenas y en las malas pero sobretodo les agradezco por no dejar que me rindiera por más difíciles que fueran las cosas.

A mi lindo bebé Chris por ser mi motivación para seguir adelante y nunca darme por vencida. Eres la más grande bendición que me dio la vida mi niño te amo.

A mi hermana por siempre estar ahí conmigo y más cuando estamos deprimidas.

A mi Dany le agradezco todos lo lindos momentos que pasamos durante toda la carrera, por motivarme a seguir superando y por darme todo su amor y estar a mi lado.

Al Dr. Néstor Noé López Castillo por ser el asesor de este trabajo, por todas sus enseñanzas y sobre todo por enseñarme que no importa cuántas veces te equivocas si no como te levantas.

A Carlos y Marco por que más que ms amigos siempre fueron como mis hermanos, siempre me cuidaron y me apoyaron en los momentos más difíciles pero también estuvieron en los mejores momentos. La universidad no hubiera sido la misma sin ustedes los quiero.

A Cacahuete y Abi por siempre confiar en mí y apoyar todas las locuras que se me ocurrían, por defenderme de quienes hablaban mal de mí y por ayudarme con las tareas de económica.

*Jessica*

Me gustaría que estas líneas sirvieran para expresar mi más profundo y sincero agradecimiento en especial al Dr. Néstor Noé López Castillo que con su ayuda ha colaborado en la realización del presente trabajo.

Muy especialmente quiero agradecer a Jessica Muciño Chávez por su compañía, su gentileza, el ánimo que me brindo para la realización de este trabajo, pero en especial por estar siempre a mi lado.

Agradeciendo así mismo a mi madre que me impulso y ayudo en todo momento.

*Daniel*



## ÍNDICE

|   |    |
|---|----|
| ÍNDICE DE TABLAS .....  | 3  |
| ÍNDICE DE FIGURAS .....   | 5  |
| ABREVIATURAS.....   | 7  |
| RESUMEN .....   | 9  |
| CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN.....   | 10 |
| 1.1. INTRODUCCIÓN .....   | 10 |
| 1.2. ALCANCE .....  | 11 |
| 1.3. OBJETIVO GENERAL .....   | 11 |
| 1.4. OBJETIVOS PARTICULARES.....  | 12 |
| CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO.....  | 13 |
| 2.1. GASOLINA.....  | 13 |
| 2.2. BENCENO EN LAS GASOLINAS .....   | 14 |
| 2.3. BENCENO EN LA SALUD .....  | 16 |
| 2.4. ECUACIONES DE ESTADO.....  | 18 |
| 2.4.1. ECUACIÓN REDLICH-KWONG (RK).....   | 19 |
| 2.4.2. ECUACIÓN SOAVE-REDLICH-KWONG (SRK).....  | 20 |
| 2.5. MÉTODOS APROXIMADOS PARA SEPARACIONES EN MULTIPLE<br>ETAPA DE SISTEMAS MULTICOMPONENTE ..... | 21 |
| 2.5.1. DETERMINACIÓN DE LA PRESIÓN DE LA COLUMNA Y EL TIPO<br>DE CONDENSADOR.....                 | 22 |
| 2.5.2. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR EL NÚMERO MÍNIMO<br>DE ETAPAS TEÓRICAS.....               | 23 |
| 2.5.3. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR LAS ESCISIONES DE<br>LOS COMPONENTES NO CLAVE.....        | 27 |
| 2.5.4. CORRELACIÓN DE UNDERWOOD .....   | 28 |
| 2.5.5. CORRELACIÓN DE GILLILAND .....   | 35 |
| 2.5.6. ECUACIÓN DE KIRKBRIDE.....   | 37 |
| 2.5.7. CÁLCULO DE LOS SERVICIOS DEL CONDENSADOR Y EL<br>EBULLIDOR.....                            | 38 |
| 2.6. MÉTODOS RIGUROSOS PARA SEPARACIONES<br>MULTICOMPONENTES EN ETAPAS MÚLTIPLES .....            | 38 |
| 2.6.1. ECUACIONES MESH.....   | 39 |



|   |  |     |
|---|--|-----|
| 2.6.2.  | ALGORITMO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL .....             | 42  |
| 2.6.3.  | MÉTODO DEL PUNTO DE BURBUJA (BP) PARA DESTILACIÓN .. | 43  |
| CAPÍTULO 3: DESARROLLO Y RESULTADOS .....                     |  | 48  |
| 3.1.  | COMPOSICIÓN DE LA GASOLINA Y ESPECIFICACIONES .....  | 48  |
| 3.2.  | DISEÑO DE PRELIMINAR DE LA COLUMNA .....             | 49  |
| 3.3.  | DISEÑO RIGUROSO DE LA COLUMNA.....                   | 57  |
| 3.4.  | SIMULACIÓN DE LA COLUMNA.....                        | 69  |
| 3.5   | RESULTADOS.....                                      | 75  |
| CAPÍTULO 4: CONCLUSIONES.....                                 |  | 76  |
| ANEXOS .....  |  | 78  |
| ANEXO A: VALORES DE K PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....         |  | 78  |
| ANEXO B: DATOS DE ISOPENTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN.....   |  | 80  |
| ANEXO C: DATOS DE ISOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN.....    |  | 82  |
| ANEXO D: DATOS DE HEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN.....       |  | 84  |
| ANEXO E: DATOS DE BENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....     |  | 86  |
| ANEXO F: DATOS DE CICLOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN ..... |  | 88  |
| ANEXO G: DATOS DE HEPTENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....     |  | 90  |
| ANEXO H: DATOS DE ISOCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....    |  | 92  |
| ANEXO I: DATOS DE TOLUENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....     |  | 94  |
| ANEXO J: DATOS DE OCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....      |  | 96  |
| ANEXO K: DATOS DE ETILBENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN ..... |  | 98  |
| ANEXO L: DATOS DE XILENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN .....      |  | 100 |
| BIBLIOGRAFÍA .....  |  | 102 |



## ÍNDICE DE TABLAS

|   |    |
|---|----|
| <i>Tabla 1 Especificaciones adicionales de gasolinas por región</i> .....   | 15 |
| <i>Tabla 2 Composición del reformado, 24-08-2012</i> .....  | 48 |
| <i>Tabla 3 Composición Gasolina para Cálculo</i> .....  | 48 |
| <i>Tabla 4 Balance de Materia Preliminar</i> .....  | 50 |
| <i>Tabla 5 Valores de <math>K_D</math> y <math>K_B</math></i> .....   | 51 |
| <i>Tabla 6 Valores Medios de Volatilidades</i> .....  | 52 |
| <i>Tabla 7 Distribución de los Componentes no Clave en el Destilado</i> .....                                     | 53 |
| <i>Tabla 8 Distribución de los Componente no Clave en el Fondo</i> .....  | 53 |
| <i>Tabla 9 Balance de Materia en el Domo y Fondo</i> .....  | 54 |
| <i>Tabla 10 Valores de V y T iniciales</i> .....  | 60 |
| <i>Tabla 11 Temperaturas Reales a lo Largo de Toda la Columna</i> .....   | 61 |
| <i>Tabla 12 Composiciones a lo largo de toda la columna</i> .....   | 62 |
| <i>Tabla 13 Flujos de líquido y vapor en cada etapa</i> .....   | 66 |
| <i>Tabla 14 Resultados de los 3 métodos</i> .....   | 75 |
| <i>Tabla 15 Valores de <math>V_j</math>, <math>T_j</math> y <math>K_{ij}</math> de la primera iteración</i> ..... | 78 |
| <i>Tabla 16 Valores A, B, C y D para el isopentano</i> .....  | 80 |
| <i>Tabla 17 Matriz tridiagonal A, B, C, para el isopentano</i> .....  | 81 |
| <i>Tabla 18 Valores A, B, C y D para el isohexano</i> .....   | 82 |
| <i>Tabla 19 Matriz tridiagonal A, B, C, para el isohexano</i> .....   | 83 |
| <i>Tabla 20 Valores A, B, C y D para el hexano</i> .....  | 84 |
| <i>Tabla 21 Matriz tridiagonal A, B, C, para el hexano</i> .....  | 85 |
| <i>Tabla 22 Valores A, B, C y D para benceno</i> .....  | 86 |
| <i>Tabla 23 Matriz tridiagonal A, B, C, para el benceno</i> .....   | 87 |
| <i>Tabla 24 Valores A, B, C y D para el ciclohexano</i> .....   | 88 |
| <i>Tabla 25 Matriz tridiagonal A, B, C, para el ciclohexano</i> .....   | 89 |
| <i>Tabla 26 Valores A, B, C y D para el hepteno</i> .....   | 90 |
| <i>Tabla 27 Matriz tridiagonal A, B, C, para el hepteno</i> .....   | 91 |
| <i>Tabla 28 Valores A, B, C y D para el isoctano</i> .....  | 92 |
| <i>Tabla 29 Matriz tridiagonal A, B, C, para el isoctano</i> .....  | 93 |
| <i>Tabla 30 Valores A, B, C y D para el tolueno</i> .....   | 94 |



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

---

|  |            |
|--|------------|
| <i>Tabla 31 Matriz tridiagonal A, B, C, para el tolueno .....</i>    | <i>95</i>  |
| <i>Tabla 32 Valores A, B, C y D para el octano .....</i>             | <i>96</i>  |
| <i>Tabla 33 Matriz tridiagonal A, B, C, para el octano .....</i>     | <i>97</i>  |
| <i>Tabla 34 Valores A, B, C y D para el etilbenceno .....</i>        | <i>98</i>  |
| <i>Tabla 35 Matriz tridiagonal A, B, C, para el etilbenceno.....</i> | <i>99</i>  |
| <i>Tabla 36 Valores A, B, C y D para el xileno .....</i>             | <i>100</i> |
| <i>Tabla 37 Matriz tridiagonal A, B, C, para el xileno.....</i>      | <i>101</i> |



## ÍNDICE DE FIGURAS

|   |           |
|---|-----------|
| <i>Figura 1 Algoritmo para destilación de sistemas multicomponentes por un método empírico.....</i>             | <i>22</i> |
| <i>Figura 2 Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.....</i> | <i>23</i> |
| <i>Figura 3 Correlación de Gilliland en coordenadas lineales. ....</i>  | <i>36</i> |
| <i>Figura 4 Etapa General de Equilibrio .....</i>   | <i>39</i> |
| <i>Figura 5 Representación Esquemática de un Proceso en Contracorriente de N Etapas.....</i>                    | <i>40</i> |
| <i>Figura 6 Algoritmo del método Punto de Burbuja (BP).....</i>   | <i>44</i> |
| <i>Figura 7 Algoritmo para calcular el Punto de Burbuja .....</i>   | <i>47</i> |
| <i>Figura 8 Especificaciones para el Método FUG .....</i>   | <i>49</i> |
| <i>Figura 9 Presión del condensador hoja de cálculo.....</i>  | <i>50</i> |
| <i>Figura 10 Temperatura de Fondo Hoja de Calculo .....</i>   | <i>51</i> |
| <i>Figura 11 Valor <math>\phi</math> Solver Excel.....</i>  | <i>54</i> |
| <i>Figura 12 Valor de Y Correlación de Gilliland.....</i>   | <i>56</i> |
| <i>Figura 13 Diseño Preliminar Final de la Columna .....</i>  | <i>57</i> |
| <i>Figura 14 Flujos que Componen la Columna de Destilación.....</i>   | <i>58</i> |
| <i>Figura 15 Parte Superior de la Torre.....</i>  | <i>59</i> |
| <i>Figura 16 Fracción mol de los componentes en cada plato .....</i>  | <i>64</i> |
| <i>Figura 17 Comportamiento de las constantes de equilibrio K en la columna .....</i>                           | <i>65</i> |
| <i>Figura 18 Flujos calculados para la columna de destilación (las unidades de los flujos son Kmol/hr).....</i> | <i>68</i> |
| <i>Figura 19 Resultados del destilado Aspen Plus .....</i>  | <i>69</i> |
| <i>Figura 20 Especificaciones de diseño en el destilado .....</i>   | <i>70</i> |



|  |           |
|--|-----------|
| <i>Figura 21 Especificaciones de diseño en el fondo .....</i>                  | <i>70</i> |
| <i>Figura 22 Variación en la relación de reflujo .....</i>                     | <i>71</i> |
| <i>Figura 23 Resultado de la variación del reflujo.....</i>                    | <i>71</i> |
| <i>Figura 24 Variable a modificar y variable a monitorear .....</i>            | <i>72</i> |
| <i>Figura 25 Resultados análisis de sensibilidad.....</i>                      | <i>73</i> |
| <i>Figura 26 Composición de benceno a lo largo de la columna.....</i>          | <i>73</i> |
| <i>Figura 27 Especificaciones para el dimensionamiento de la columna .....</i> | <i>74</i> |
| <i>Figura 28 Dimensionamiento de la columna. ....</i>                          | <i>74</i> |



## ABREVIATURAS

### LETRAS MAYÚSCULAS Y MINUSCULAS

|                                 |   |
|---------------------------------|---|
| ASTM                            | American Society for Testing Materials,               |
| Ai, Bi, Ci, Di                  | Parámetros del Balance de materia                     |
| a,b                             | Constantes de Redlich-Kwong                           |
| Ac                              | Constante Soave- Redlich-Kwong                        |
| b <sub>j</sub>                  | Flujo del fondo del componente j                      |
| b <sub>r</sub>                  | Flujo del fondo de referencia                         |
| D                               | Caudal del destilado                                  |
| d <sub>i</sub>                  | Flujo de destilado del componente i                   |
| d <sub>r</sub>                  | Flujo de destilado de referencia                      |
| f <sub>i</sub>                  | Flujo de alimentación del componente i                |
| H                               | Entalpia por mol                                      |
| HHK                             | Más pesado que el clave pesado                        |
| HK                              | Clave pesado  |
| i,j                             | Componente i en una corriente que abandona la etapa j |
| K                               | Constante de Equilibrio                               |
| L <sub>∞</sub>                  | Caudal de líquido en la zona de contacto              |
| LK                              | Clave ligero  |
| LLK                             | Más ligero que el clave ligero                        |
| N                               | Número de etapas de equilibrio                        |
| N <sub>min</sub>                | Número de etapas de equilibrio mínimas                |
| N <sub>R</sub>                  | Número de pisos en el sector de enriquecimiento       |
| N <sub>s</sub>                  | Número de pisos en el sector de agotamiento           |
| P                               | Presión   |
| PB                              | Presión del Fondo de la Columna                       |
| P <sub>C</sub>                  | Presión crítica                                       |
| P <sub>D</sub>                  | Presión del condensador                               |
| Q <sub>B</sub>                  | Flujo de calor en el rehervidor                       |
| Q <sub>C</sub>                  | Flujo de calor en el condensador                      |
| R                               | Constante universal de los gases ideales              |
| R <sub>min</sub>                | Reflujo mínimo  |
| S <sub>j</sub>                  | Función del punto de burbuja                          |
| S <sub>X</sub> , S <sub>Y</sub> | Funciones de la suma de fracción molar                |
| T                               | Temperatura   |
| T <sub>B</sub>                  | Temperatura del fondo de la columna                   |
| T <sub>c</sub>                  | Temperatura crítica                                   |
| TD                              | Temperatura del Condensador                           |
| T <sub>r</sub>                  | Temperatura reducida                                  |
| V                               | Volumen   |
| V,L                             | Caudales de corrientes de vapor y líquido             |
| V <sub>∞</sub>                  | Caudal de vapor en la zona de contacto                |
| $\bar{V}$                       | Flujo Molar   |
| x <sub>B</sub>                  | Composición en el fondo de la columna                 |
| x <sub>D</sub>                  | Composición de destilado                              |



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

---

|               |   |
|---------------|---|
| $x_i$         | Composición de líquido del componente $i$             |
| $x_{i\infty}$ | Composición del componente $i$ en la zona de contacto |
| $x_{j\infty}$ | Composición del componente $j$ en la zona de contacto |
| $x_{oi}$      | Composición de reflujo                                |
| $y_i$         | Composición de vapor del componente $i$               |
| ZMVM          | Zonas Metropolitanas del Valle de México              |
| ZMG           | Zonas Metropolitanas de Guadalajara                   |
| ZMM           | Zonas Metropolitanas de Monterrey                     |

LETRAS GRIEGAS

|                   |   |
|-------------------|---|
| $\alpha$          | Relación para Hidrocarburos Redlich-Kwong   |
| $(\alpha_{ij})_m$ | Valor medio de la volatilidad en la columna |
| $\gamma$          | Coefficiente de actividad de una mezcla     |
| $\theta$          | Raíz de la ecuación de Underwood            |
| $\tau$            | Suma de los cuadrados de la diferencia      |
| $\phi$            | Parámetro de la ecuación de Underwood       |
| $\psi$            | Parámetro de asociación                     |
| $\omega$          | Factor acéntrico                            |

ABREVIACIONES

|        |  |
|--------|--|
| atm    | Atmósfera                                  |
| °C     | Grados Celsius                             |
| °F     | Grados Fahrenheit                          |
| K      | Kelvin                                     |
| h      | Hora                                       |
| Kg     | Kilogramo                                  |
| lb     | libra de masa                              |
| mol-kg | mol-kilogramo                              |
| mol-lb | mol-libra                                  |
| psi    | Libra fuerza por pulgada cuadrada          |
| psia   | Libra fuerza por pulgada cuadrada absoluta |

SÍMBOLOS MATEMÁTICOS

|          |                   |
|----------|-------------------|
| $\Sigma$ | Suma              |
| $\ln$    | Logaritmo natural |
| Lim      | Límite            |
| log      | Logaritmo natural |
| $\pi$    | Pi                |



## RESUMEN

---

En esta tesis se realizó el diseño de una torre de destilación para disminuir el contenido de benceno en las gasolinas partiendo de las especificaciones de control de calidad del reformado las cuales se dividen en: Aromáticos (Tolueno, Xileno y Etilbenceno), Olefinas (Hepteno,), Benceno (Benceno,), Parafinas (Hexano, Octano e Isopentano), Isoparafinas (Isohexano, Isoctano), Nafteno (Ciclohexano), utilizando un método aproximado (FUG) para el diseño preliminar de la columna en el que se estableció que el benceno es el componente ligero ya que se quiere obtener la mayor parte del mismo

Para el diseño final de la columna se calculó mediante un método riguroso la temperatura, la presión, los caudales, las composiciones de las corrientes y las velocidades de transferencia de calor para cada etapa.

Para optimizar los gastos de energía se realizó la simulación de la destilación en el programa Aspen Plus V8. Y con ayuda del programa se logró obtener la etapa óptima de alimentación y el dimensionamiento de la columna.

Por último se realizó la comparación de los resultados obtenidos por los tres métodos para determinar si las diferencias entre los métodos son muy considerables.

Al final de la comparación se obtuvo como resultado que aunque las diferencias entre los métodos no son muy grandes el diseño más conveniente es el realizado por el simulador ya que con él se logró obtener la mayor cantidad de benceno con menores gastos energéticos.



## CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

---

### 1.1. INTRODUCCIÓN

Desde comienzos del siglo XX, se tenía conocimiento de los métodos cortos y rigurosos para el cálculo de las columnas de destilación. En ese entonces, los métodos cortos se constituían en la herramienta primaria de diseño, ya que era necesario realizar los cálculos a mano y la implementación de métodos rigurosos era una tarea compleja que podía demandar varios días y algunas veces semanas. El error derivado de la aplicación de métodos cortos era compensado con factores de sobre diseño.

En la actualidad, los métodos rigurosos han pasado a ser la principal herramienta de diseño, quedando como único papel de los métodos aproximados el proporcionar una estimación inicial para los cálculos rigurosos y eliminar las opciones menos adecuadas. El diseño final del equipo de etapas múltiples requiere una determinación rigurosa de la temperatura, la presión, los caudales y composiciones de las corrientes y las velocidades de transferencia de calor para cada etapa. Dada la elevada no linealidad de las ecuaciones que describen el proceso, es necesario resolver el problema general por el uso de procedimientos iterativos y los diversos métodos difieren en la selección del conjunto de variables independientes. Históricamente, los primeros intentos para la resolución del sistema de ecuaciones formado por los balances de materia, las relaciones de equilibrio, las sumas de fracciones molares y los balances de entalpía (sistema de ecuaciones MESH) fueron los métodos clásicos de cálculo etapa a etapa y ecuación a ecuación de Lewis-Matheson (1932) y Thiele-Geddes (1933), aplicables a columnas convencionales (se introduce un único alimento y se extraen dos productos, el destilado por la cabeza y el residuo por el fondo). Sin embargo, la mayor parte de los métodos modernos son “componente a componente”, haciendo referencia este tipo de designación a la forma en que se agrupan y se resuelven los sistemas de ecuaciones. Los métodos clásicos de cálculo etapa a etapa y ecuación a ecuación de Lewis-Matheson y de Thiele-Geddes constituyen un primer intento de resolución de las ecuaciones MESH. Aunque ambos fueron ampliamente utilizados para cálculos manuales en los años



siguientes a su aparición en la bibliografía, se observó un comportamiento numéricamente inestable cuando se intentó su programación en una computadora. En la actualidad se utilizan métodos que resuelven las ecuaciones MESH a partir de un conjunto de ecuaciones lineales simultáneas para las N etapas, agrupadas para cada componente. Estos métodos se pueden clasificar dentro de cuatro grandes grupos: - Métodos de punto de burbuja (BP), que calculan la temperatura de las etapas por resolución de la ecuación del punto de burbuja. - Métodos de suma de flujos (SR), que usan los balances de energía para obtener la temperatura de las etapas. - Métodos de Newton 2N, que calculan las temperaturas y el flujo total al mismo tiempo, pero las composiciones en un paso separado. Estas tres clases de métodos separan las ecuaciones MESH en grupos, que resuelven a través de una serie de pasos. - Método de Newton global o de corrección simultánea (SC), que se resuelve todas las ecuaciones MESH simultáneamente. En general, los métodos modernos están ya programados, son rápidos y requieren un espacio mínimo de memoria en una computadora, aunque normalmente están limitados a un número relativamente reducido de posibilidades para la especificación de variables.

## 1.2. ALCANCE

- ❖ Realizar el diseño de una torre de destilación para disminuir el contenido de benceno en la gasolina reformada mediante un método aproximado (método FUG).
- ❖ Calcular mediante un método riguroso las temperaturas, presiones, flujos de líquido y vapor, composición y velocidades de transferencia de calor para cada etapa utilizando el diseño obtenido del método aproximado.
- ❖ Realizar la simulación en ASPEN PLUS V8 para obtener una corriente de benceno más pura optimizando los gastos de energía cambiando algunas variables.

## 1.3. OBJETIVO GENERAL

Diseñar una torre de destilación para la reducción del contenido de benceno y llevar a cabo la simulación para obtener una corriente de benceno de mayor pureza.



#### 1.4. OBJETIVOS PARTICULARES

Diseñar por medio de un método matemático aproximado y un método riguroso la columna de destilación óptima para obtener una corriente rica en benceno.

Realizar la simulación cambiando condiciones de operación para conseguir la mayor cantidad de benceno disminuyendo los gastos energéticos.

Comparar los resultados para elegir el correcto diseño de la columna.



## CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO

---

### 2.1. GASOLINA

La gasolina es una mezcla de hidrocarburos derivada del petróleo, que se utiliza como combustible en motores de combustión interna de ignición por chispa; su composición química esta entre el rango de  $C_5H_{12}$  a  $C_9H_{20}$ .

La gasolina se obtiene del petróleo en una refinería, la cual se encarga de transformarlo en derivados comercializables. Es de color rojo, con un olor característico un tanto agradable, pero al estar por periodos prolongados en contacto, llega a causar nauseas.

En México, existen dos tipos de gasolinas: la gasolina magna y la premium. La magna contiene un octanaje menor que la premium, es la más común utilizada en los vehículos y su precio es menor que la segunda.

Las gasolinas contienen aditivos químicos llamados oxigenantes. Los oxigenantes permiten que exista la combustión completa en los motores; de esta forma se reduce la cantidad de gases contaminantes emitidos al medio ambiente, principalmente monóxido de carbono e hidrocarburos no quemados.

Dentro de una fracción de gasolina, los 5 tipos de componentes que pueden estar presentes son:

- Parafinas
- Oleofinas
- Naftenos
- Aromáticos
- Isoparafinas

Respecto a su procedencia, existen 3 clases de gasolinas

- Gasolina natural: Es aquella que se produce por separación del gas natural o gas de cabeza de pozo. La composición de esta gasolina varía con respecto al gas natural que lo acompaña. El contenido en hidrocarburos es más bajo que la gasolina de destilación.



- Gasolinas de destilación directa: Fracción que se obtiene al destilar el crudo de petróleo a presión atmosférica. No contiene hidrocarbonados no saturados de moléculas complejas aromático-nafténicas, puesto que presentan puntos de ebullición más altos que el límite superior del intervalo de ebullición de la gasolina.
- Gasolina de craqueo: Esta se obtiene a partir de la fracción pesada del petróleo que se somete a otro proceso (craqueo), en el que se rompen las moléculas grandes en otras más pequeñas, obteniendo así moléculas que entran dentro de la fracción de gasolina. La composición ya no va a ser tan homogénea como en las dos anteriores, y va a depender de la composición inicial y del proceso utilizado.

## 2.2. BENCENO EN LAS GASOLINAS

El benceno es un componente de la gasolina que sirve para aumentar el octanaje y evitar la detonación del motor. Al ser un contaminante tóxico del aire ya que se sabe que tienen efectos cancerígenos, el conocimiento de su concentración puede ser de ayuda en la evaluación de posibles riesgos para la salud a las personas que manipulan y utilizan gasolina.

El benceno se utiliza generalmente como un disolvente, pero actualmente se emplea como materia prima para la síntesis de otros químicos. El porcentaje de benceno en gasolina está entre 1% y 2% vol.

La Norma Oficial Mexicana nom-086-semarnat-sener-scfi-2005, (especificaciones de los combustibles fósiles para la protección ambiental) establece las especificaciones sobre la protección ambiental que deben cumplir los combustibles fósiles líquidos y gaseosos que se comercializan en el país.

Actualmente, el máximo contenido aceptable de benceno en las gasolinas de nuestro país es de 1.0 % vol. (NOM-086).

En la Tabla 1 se establecen las especificaciones para las gasolinas considerando las Zonas Metropolitanas del Valle de México, de Guadalajara y de Monterrey.



**DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS**

**Tabla 1 Especificaciones adicionales de gasolinas por región**

| <i>Contenido máximo de:</i> | Unidad         | Método de prueba  | ZMVM            | ZMG  | ZMM  | Resto del país |                                      |  |
|-----------------------------|----------------|---|-----------------|------|------|----------------|--------------------------------------|--|
|                             |                |   | Premium y Magna |      |      | Premium        | Magna                                |  |
| <i>Aromáticos</i>           | % vol.         | Tipos de hidrocarburos en productos líquidos de petróleo por absorción de indicador fluorescente (ASTM D 1319-03)                                 | 25              | 35   | 35   | 35             | I<br>N<br>F<br>O<br>R<br>M<br>A<br>R |  |
| <i>Olefinas</i>             | % vol.         | Tipos de hidrocarburos en productos líquidos de petróleo por absorción de indicador fluorescente (ASTM D 1319-03)                                 | 10              | 12.5 | 12.5 | 15             | Informar                             |  |
| <i>Benceno</i>              | % vol.         | Determinación de benceno y tolueno en gasolina terminada para uso en motores y aviación por cromatografía de gases (ASTM D 3606-04 <sup>a</sup> ) | 1               | 1    | 1    | 2              | 3                                    |  |
| <i>Oxígeno</i>              | % peso, máximo | Determinación de MTBE, ETBE TAME, DIPE y de, Alcohol teramílico (ASTM D 4815-00 (2005))   | 2.7             | 2.7  | 2.7  | 2.7            | No aplica                            |  |
| <i>BTX</i>                  | % vol.         | Determinación de benceno y tolueno en gasolina terminada para uso en motores y aviación por cromatografía de gases (ASTM D 3606-04 <sup>a</sup> ) | Informar        |      |      |                |                                      |  |

Se prevé que, en un futuro de 1 a 3 años, el contenido máximo de benceno en las gasolinas se fijará, por norma, en niveles del orden del 0.62 % vol. Para cumplir con dicha norma, más restrictiva, se tendrán que implementar nuevos proyectos en Pemex.



## 2.3. BENCENO EN LA SALUD

### ¿QUÉ ES EL BENCENO?

El benceno, conocido también como benzol, es un líquido incoloro de olor dulce. El benceno se evapora al aire rápidamente y es sólo ligeramente soluble en agua. El benceno es sumamente inflamable. La mayoría de la gente puede empezar a detectar el olor del benceno en el aire cuando está en concentraciones de 1.5 a 4.7 partes por millón en el aire (ppm) y en el agua cuando la concentración es de 2 ppm. La mayoría de la gente empieza a detectar el sabor del benceno cuando está en concentraciones entre 0.5 y 4.5 ppm en el agua. Una parte por millón equivale aproximadamente a una gota en 40 galones. El benceno es un contaminante presente en el aire, el agua y el suelo. El benceno proviene tanto de fuentes industriales como naturales.

### FUENTES Y USOS INDUSTRIALES

El benceno fue descubierto y producido a partir de alquitrán en el siglo XIX. Hoy en día, la mayoría del benceno se produce a partir del petróleo. Debido a su extenso uso, el benceno es una de las 20 sustancias químicas más producidas en los Estados Unidos en términos de volumen. Varias industrias usan benceno para fabricar otros productos químicos, como por ejemplo el estireno, el cumeno y ciclohexano. El benceno también se usa en la manufactura de ciertos tipos de caucho, lubricantes, tinturas, detergentes, medicamentos y plaguicidas.

### FUENTES NATURALES

Las fuentes naturales de benceno incluyen los gases emitidos por volcanes y los incendios forestales, contribuyen a la presencia de benceno en el medio ambiente. El benceno también se encuentra en el petróleo, la gasolina y el humo de cigarrillos.

### ¿CÓMO ENTRA Y SALE EL BENCENO DEL CUERPO?

El benceno puede entrar al cuerpo a través de los pulmones, el tubo digestivo y la piel. Cuando se está expuesto a niveles altos de benceno en el aire, aproximadamente la mitad del benceno que se inhala pasa a través de los



pulmones y entra a la corriente sanguínea. Cuando se expone al benceno en alimentos o bebidas, la mayor parte del benceno que se ingiere pasa a través del tubo digestivo a la corriente sanguínea. Si la piel entra en contacto con benceno o con productos que contienen benceno, una pequeña cantidad de benceno pasará a la sangre a través de la piel. Una vez en la sangre, el benceno se moviliza a través del cuerpo y puede ser almacenado transitoriamente en la médula de los huesos y el tejido graso. El benceno es convertido en el hígado y los riñones a productos llamados metabolitos. La mayoría de los metabolitos del benceno abandonan el cuerpo en la orina dentro de 48 horas después de la exposición.

### ¿CÓMO PUEDE AFECTAR EL BENCENO LA SALUD?

La exposición breve (5 a 10 minutos) a niveles muy altos de benceno en el aire (10,000 a 20,000 ppm) puede producir la muerte. Niveles más bajos (700 a 3,000 ppm) pueden producir letargo, mareo, aceleración del latido del corazón, dolor de cabeza, temblores, confusión y pérdida del conocimiento. En la mayoría de los casos, los efectos desaparecerán cuando la exposición termina y la persona empieza a respirar aire fresco.

El benceno produce alteraciones en la sangre. La gente que respira benceno durante períodos prolongados puede sufrir daño de los tejidos que producen las células de la sangre, especialmente la médula de los huesos. Estos efectos pueden interrumpir la producción de elementos de la sangre y producir una disminución de algunos componentes importantes de la sangre. Una disminución de los glóbulos rojos puede conducir a anemia. La reducción de otros componentes de la sangre puede causar hemorragias. La producción de elementos de la sangre puede normalizarse después que la exposición al benceno termina. La exposición excesiva al benceno puede ser perjudicial para el sistema inmune, aumentando las probabilidades de contraer infecciones y posiblemente disminuyendo las defensas del cuerpo contra el cáncer.

La exposición prolongada al benceno puede producir cáncer de los órganos que producen los elementos de la sangre. Esta condición se llama leucemia. La exposición al benceno se ha asociado con el desarrollo de un tipo especial de



leucemia llamada leucemia mieloide aguda. El Departamento de Salud y Servicios Humanos (DHHS) ha determinado que el benceno es un carcinógeno reconocido. Tanto la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC) como la EPA han determinado que el benceno es carcinogénico en seres humanos.

## 2.4. ECUACIONES DE ESTADO

Una ecuación de estado es una ecuación constitutiva para sistemas hidrostáticos que describe el estado de agregación de la materia como una relación matemática entre la temperatura, la presión, el volumen, la densidad, la energía interna y posiblemente otras funciones de estado asociadas con la materia.

Una ecuación de estado es la relación que existe entre dos o más propiedades termodinámicas. En sistemas de un componente y de una fase, la ecuación de estado incluirá tres propiedades, dos de las cuales pueden ser consideradas como independientes. Aunque en principio se podrían plantear relaciones funcionales en que intervengan tres propiedades termodinámicas cualesquiera, las expresiones analíticas de las relaciones entre propiedades han sido limitadas casi completamente a la presión, volumen y temperatura. Dado que la presión, temperatura y volumen pueden ser medidos directamente, los datos necesarios para evaluar las constantes en tales ecuaciones pueden ser obtenidos experimentalmente.

La elección de la ecuación a usar en una aplicación dada depende principalmente de la exactitud deseada y de la capacidad del usuario. Como los coeficientes de casi todas las ecuaciones de estado deben ser evaluados ajustando o adaptando las ecuaciones a diversos datos experimentales de presión, volumen y temperatura, estas ecuaciones nunca pueden representar exactamente los datos experimentales; más aún, muchas veces estas ecuaciones no representan los datos, limitando la exactitud. Esto es particularmente cierto cuando las ecuaciones más sencillas son aplicadas en los límites del punto crítico.

Tiene la forma general:

$$f(p, V, T) = 0 \quad (1)$$



No existe una única ecuación de estado que describa el comportamiento de todas las sustancias para todas las condiciones de presión y temperatura.

### IMPORTANCIA DE LAS ECUACIONES DE ESTADO

- Las ecuaciones de estado son útiles para describir las propiedades de los fluidos, mezclas o sólidos.
- El uso más importante de una ecuación de estado es para predecir el estado de gases y líquidos. Una de las ecuaciones de estado más simples para este propósito es la ecuación de estado del gas ideal, que es aproximable al comportamiento de los gases a bajas presiones y temperaturas mayores a la temperatura crítica. Sin embargo, esta ecuación pierde mucha exactitud a altas presiones y bajas temperaturas, y no es capaz de predecir la condensación de vapor en líquido.
- Entre las ecuaciones de estado más empleadas sobresalen las ecuaciones cúbicas de estado. De ellas, las más conocidas y utilizadas son la ecuación de Peng-Robinson (PR) y la ecuación de Redlich-Kwong-Soave (RKS). Hasta ahora no se ha encontrado ninguna ecuación de estado que prediga correctamente el comportamiento de todas las sustancias en todas las condiciones.
- Además de predecir el comportamiento de gases y líquidos, también hay ecuaciones de estado que predicen el volumen de los sólidos, incluyendo la transición de los sólidos entre los diferentes estados cristalinos.

Entre las ecuaciones de estado más empleadas sobresalen las ecuaciones cúbicas de estado. De ellas, las más conocidas y utilizadas son las ecuaciones de Peng-Robinson y la ecuación de Redlich-Kwong.

#### 2.4.1. ECUACIÓN REDLICH-KWONG (RK)

Esta ecuación de origen semi empírico que predice tres raíces para el volumen. La expresión de esta ecuación es:

$$P = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a}{T^{1/2}\bar{V}(\bar{V} + b)} \quad (2)$$



Donde  $a$  y  $b$  son las constantes de Redlich-Kwong;  $a$  representa las fuerzas atractivas y  $b$  las fuerzas repulsivas.

Los valores de las constantes son:

$$a = 0.42748 \frac{R^2 T_c^{5/2}}{P_c} \quad (3)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (4)$$

Introducida en 1949, la ecuación de Redlich-Kwong fue una mejora considerable sobre las otras ecuaciones de la época. Aún goza de bastante interés debido a su expresión relativamente simple. Aunque es mejor que la ecuación de Van Der Waals, no da buenos resultados sobre la fase líquida y por ello no puede usarse para calcular precisamente los equilibrios líquido-vapor. Sin embargo, puede usarse conjuntamente con expresiones concretas para la fase líquida en tal caso. La ecuación de Redlich-Kwong es adecuada para calcular las propiedades de la fase gaseosa cuando el cociente entre la presión y la presión crítica es menor que la mitad del cociente entre la temperatura y la temperatura crítica.

#### 2.4.2. ECUACIÓN SOAVE-REDLICH-KWONG (SRK)

La ecuación de SRK fue la primera modificación de la forma simple de la ecuación de Redlich-Kwong donde el parámetro  $a$  fue hecho dependiente de la temperatura de modo que la curva de presión de vapor pueda ser reproducida correctamente. La ecuación de estado requiere del ingreso de tres parámetros por compuesto puro:  $T_c$ ,  $P_c$  y  $\omega$ .

La forma explícita de la ecuación es:

$$P = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a(T, \omega)}{\bar{V}(\bar{V} + b)} \quad (5)$$

Los valores de las constantes son:

$$a(T, \omega) = a_c \alpha \quad (6)$$

$$\alpha = [1 + (1 - Tr^{0.5})(0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)]^2 \quad (7)$$



$$Tr = \frac{T}{T_c} \quad (8)$$

$$a_c = \frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c} \quad (9)$$

$$b = \frac{0.08664RT_c}{P_c} \quad (10)$$

La ecuación SRK original puede usarse para hidrocarburos y gases livianos a presión atmosférica o superior. Los valores obtenidos para distintas propiedades termodinámicas son razonablemente precisos para su uso ingenieril, por lo que goza de una amplia aceptación en el campo de la simulación de procesos.

## 2.5. MÉTODOS APROXIMADOS PARA SEPARACIONES EN MULTIPLE ETAPA DE SISTEMAS MULTICOMPONENTE

En el diseño de cualquier columna de destilación es importante conocer, por lo menos, dos cosas. Una de ellas es el número de platos que se requieren para la separación cuando no se retira producto de la columna. Esta es la condición de reflujo total. La otra cuestión es la relación de reflujo mínima que se puede utilizar para conseguir la separación deseada. Mientras que este caso requiere el mínimo consumo de calor, la altura de la columna necesaria se hace infinita. Es evidente que todos los demás casos prácticos de operación estarán comprendidos entre estas dos condiciones.

En la Figura 1 se muestra un algoritmo del método empírico para una columna de destilación. Este método se conoce habitualmente con el nombre de método de Fenske-Underwood-Gilliland, que son los autores de tres importantes etapas del procedimiento.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

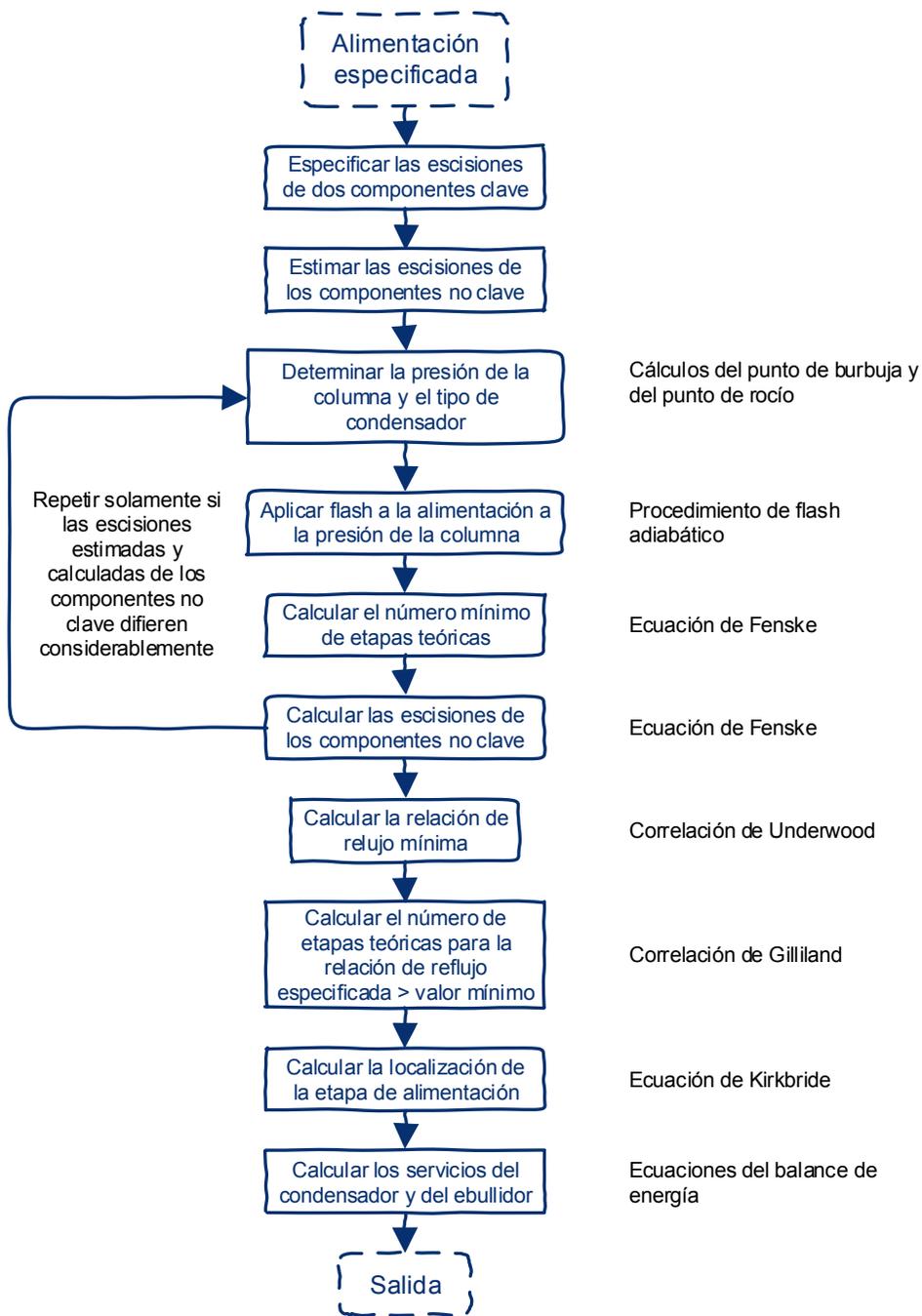


Figura 1 Algoritmo para destilación de sistemas multicomponentes por el método FUG.

### 2.5.1. DETERMINACIÓN DE LA PRESIÓN DE LA COLUMNA Y EL TIPO DE CONDENSADOR

A continuación se muestra el algoritmo para determinar la presión y el tipo de condensador a utilizar.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

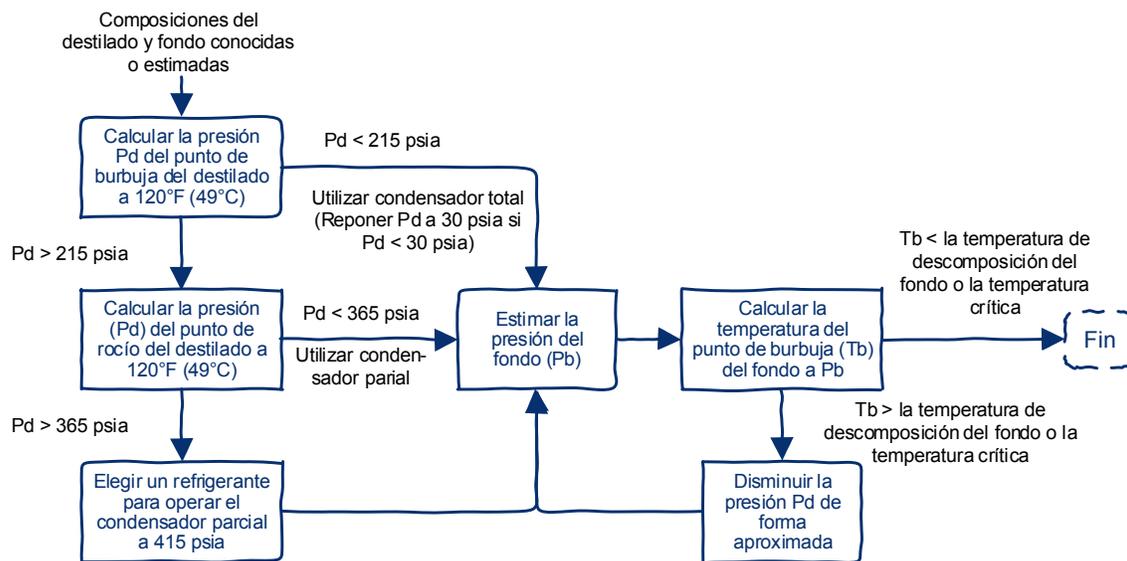


Figura 2 Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.

Se supone que las caídas de presión en la columna y en el condensador son de 5 psia. Sin embargo, cuando se conozca el número de platos necesarios se realizarán cálculos más refinados para permitir, por lo menos, una caída de presión de 0.1 psi/plato para operación de la columna a presión atmosférica o super atmosférica, y 0.05 psi/plato para operación de la columna a vacío, con una caída de presión en el condensador de 5 a 2 psia. La temperatura en el fondo de la columna no debe dar lugar a descomposición del producto de fondos ni estar próxima a las condiciones críticas. Para presiones del tanque de reflujo de hasta 215 psia se utiliza un condensador total, mientras que entre 215 y 365 psia se utiliza un condensador parcial. Si la presión supera 365 psia, se utiliza un refrigerante para el condensador del domo.

La alimentación puede someterse a una operación adiabática de flash para una presión del plato de alimentación de  $P_D + 7.5 \text{ psia}$  con el fin de determinar la condición física de la alimentación.

### 2.5.2. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR EL NÚMERO MÍNIMO DE ETAPAS TEÓRICAS

El número mínimo de etapas de equilibrio se obtiene cuando la columna proporciona la separación deseada en condiciones de reflujo total. La deducción exacta para el número mínimo de etapas requiere sólo la utilización del valor de la



constante de equilibrio (K) y la consideración de igualdad de fracciones molares entre las etapas. Para operación en estado estacionario, la entrada de calor en el rehervidor y la salida en el condensador son iguales (suponiendo que no hay pérdidas de calor) y, según el balance de materia, las corrientes de vapor y líquido que se cruzan entre dos etapas tienen los mismos caudales y composiciones. Sin embargo, los caudales de vapor y líquido variarán de una etapa a otra, a no ser que se cumpla la condición de flujo molar constante.

Para el componente  $i$  de la etapa  $N$  (última etapa = rehervidor)

$$y_{i,N} = K_{i,N}x_{i,N} \quad (11)$$

Y para las corrientes que se cruzan entre etapas

$$y_{i,j} = x_{i,j-1} \quad (12)$$

Luego

$$x_{i,N-1} = K_{i,N}x_{i,N} \quad (13)$$

Análogamente, para la etapa  $N-1$

$$y_{i,N-1} = K_{i,N-1}x_{i,N-1} = K_{i,N}K_{i,N-1}x_{i,N} \quad (14)$$

Y en general

$$y_{i,1} = K_{i,N}K_{i,N-1} \dots K_{i,2}K_{i,1}x_{i,N} \quad (15)$$

Siendo la etapa 1 la primer etapa de la columna (en el domo), sin contar el condensador. Planteando la expresión análoga para el componente  $j$  y dividiendo una por otra

$$\frac{y_{i,1}}{y_{j,1}} = \alpha_{ij,N}\alpha_{ij,N-1} \dots \alpha_{ij,2}\alpha_{ij,1} \left( \frac{X_{i,N}}{X_{j,N}} \right) \quad (16)$$

O bien

$$\left( \frac{X_{i,0}}{X_{i,N}} \right) \left( \frac{X_{j,N}}{X_{j,0}} \right) = \prod_{k=1}^{N_{min}} \alpha_{ij,k} \quad (17)$$



Aunque la ecuación (17) es exacta, no se suele utilizar en la práctica ya que es preciso conocer las condiciones de cada etapa para calcular la serie de volatilidades relativas. Sin embargo, si la volatilidad relativa es constante

$$\left(\frac{x_{i,0}}{x_{i,N}}\right)\left(\frac{x_{j,N}}{x_{j,0}}\right) = \alpha_{ij}^{N_{min}} \quad (18)$$

Y

$$N_{min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{i,0}}{x_{i,N}}\right)\left(\frac{x_{j,N}}{x_{j,0}}\right)\right]}{\log(\alpha_{ij})_m} \quad (19)$$

La ecuación (19) es la ecuación de Fenske. Para el cálculo del número mínimo de etapas, la ecuación de Fenske se aplica haciendo  $i$  igual al LK y  $j$  igual al HK. Así, puede verse que la influencia de los componentes no clave sobre el valor del número mínimo de etapas de equilibrio sólo se debe a su efecto sobre el valor de la volatilidad relativa de los componentes clave. Si se tiene en cuenta que para la deducción de la ecuación (19) se ha numerado la columna de fondo a domo y que  $N$  es el valor asignado al rehervidor y 1 al primer plato de la columna, se puede concluir que el valor de  $N_{min}$  calculado incluye las etapas teóricas más el rehervidor, pero no el condensador, que sería la etapa 0. Sin embargo, cuando el condensador es total, la composición del reflujo y la del destilado coinciden,  $x_{0i} = x_D$ , y la ecuación de Fenske suele formularse de forma que relaciona las composiciones de los componentes clave en el destilado ( $x_D$ ) y en el residuo ( $x_B$ ) ecuación (20). Si el condensador es parcial, se puede mantener la misma formulación de la ecuación de Fenske dada por la ecuación 20, pero ahora teniendo en cuenta que el que ahora es el número de etapas calculado sí incluye al condensador parcial, que se trata como una etapa de equilibrio más.  $(\alpha_{ij})_m$  representa un valor medio de la volatilidad en la columna:

$$N_{min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{i,D}}{x_{i,N}}\right)\left(\frac{x_{j,N}}{x_{j,D}}\right)\right]}{\log(\alpha_{ij})_m} \quad (20)$$

Una expresión alternativa para la ecuación de Fenske se obtiene multiplicando y dividiendo el producto de las relaciones de fracciones molares en el destilado y en



el residuo por los flujos de destilado y de residuo, para obtener las relaciones equivalentes en función de los flujos de componentes  $i$  y  $j$  en el destilado y en el fondo. Para el cálculo de la volatilidad relativa media se utiliza la media geométrica de los valores correspondientes en las etapas de domo y fondo

$$N_{min} = \frac{\log \left[ \left( \frac{d_i}{d_j} \right) \left( \frac{b_j}{b_i} \right) \right]}{\log(\alpha_{ij})_m} \quad (21)$$

Por lo tanto, el número mínimo de etapas de equilibrio depende del grado de separación de los dos componentes clave y de su volatilidad relativa, pero es independiente de la condición física de la alimentación.

La aplicación de la ecuación de Fenske requiere haber realizado previamente el balance preliminar de materia, con el fin de disponer de las composiciones del destilado y del fondo y poder realizar el cálculo de las volatilidades a la temperatura de rocío del destilado y de burbuja del fondo. Si, una vez realizada la comprobación del balance preliminar de materia se observaran discrepancias muy grandes con los valores supuestos, se debe repetir el cálculo.

Como ya se ha dicho, a la hora de calcular la volatilidad relativa media, se utiliza la media geométrica entre los valores correspondientes a:

- *La volatilidad del destilado a la temperatura de rocío del destilado.* Si el condensador es parcial, esta temperatura es la temperatura del condensador, que se encuentra incluido en el valor calculado para  $N_{mín}$ . Si el condensador es total, esta temperatura es la de la primera etapa de la columna, de la que se obtiene el vapor con la misma composición que el destilado; en este caso, el valor de  $N_{mín}$  calculado abarca hasta la primera etapa de la columna y no incluye el condensador total.
- *La volatilidad del fondo a la temperatura de burbuja del fondo.* Que es la temperatura en la caldera, que sí se encuentra contabilizada en  $N_{mín}$ .

Cuando hay diferencias considerables entre la volatilidad en el domo y en la base de la columna no es adecuado utilizar la volatilidad relativa media en la ecuación de Fenske. En estos casos, se puede calcular el número mínimo de etapas en



cada sector, utilizando la ecuación de Fenske con la composición de la alimentación para la base del sector de enriquecimiento y para la cabeza del sector de agotamiento, y evaluando por separado la volatilidad relativa media en cada sector.

### 2.5.3. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR LAS ESCISIONES DE LOS COMPONENTES NO CLAVE.

La comprobación del balance preliminar de materia se lleva a cabo mediante la comparación con la distribución que se obtiene para los componentes no clave a reflujo total, ya que ésta proporciona una buena estimación de la separación que se obtendrá para la columna operando a una razón de reflujo finita, comprendida entre el reflujo total y el reflujo mínimo.

Resulta evidente que la distribución de los componentes clave entre el destilado y el residuo ha de ser la misma independientemente de las condiciones de operación de la columna ya que se trata de una especificación del problema. Sin embargo, la distribución de componentes no clave varía dependiendo de que la columna opere a reflujo total, a reflujo mínimo o a reflujo intermedio. Una vez que se conoce  $N_{\min}$ , la ecuación de Fenske permite calcular las fracciones molares  $x_0$  y  $x_N$  para todos los componentes no clave. Como ya se ha dicho, estos valores proporcionan una primera aproximación a la distribución real de los productos cuando se utiliza un número de etapas superior al mínimo y, obviamente, permiten calcular las temperaturas de las etapas de domo y de fondo, que deberán compararse con los valores estimados utilizados para el cálculo de las volatilidades en la ecuación de Fenske.

Sea  $i$  un componente no clave y  $j$  el componente HK, y haciendo  $j=r$

$$\left(\frac{d_i}{b_i}\right) = \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{\min}} \quad (22)$$

Y sustituyendo  $f_i = d_i + b_i$

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{\min}}} \quad (23)$$

O bien



$$d_i = \frac{f_i \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{min}}}{1 + \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{min}}} \quad (24)$$

Que dan la distribución de los componentes no clave a reflujo total de acuerdo con la ecuación de Fenske.

Estas composiciones calculadas para el destilado y el fondo a reflujo total deben compararse con las procedentes del balance preliminar de materia que han servido para iniciar los cálculos, permitiendo así el cálculo de la volatilidad relativa media necesaria para aplicar la ecuación de Fenske. En caso de que se observen discrepancias considerables, deberá reconsiderarse el balance preliminar de materia y repetirse el cálculo de  $N_{mín}$  y, si es necesario, también de la presión de operación.

#### 2.5.4. CORRELACIÓN DE UNDERWOOD

El reflujo mínimo puede calcularse por métodos gráficos, por métodos aproximados o por métodos rigurosos. Los métodos gráficos, estrictamente, sólo son válidos para mezclas binarias. La mayoría de los métodos gráficos y aproximados dan buenos resultados si se puede aplicar la suposición de flujo molar constante, o si el método se corrige incluyendo los balances de energía. Sin embargo, la mayoría de los simuladores comerciales no tienen en cuenta dicha corrección y las predicciones suelen no ser adecuadas. Los métodos rigurosos predicen el reflujo mínimo con precisión, pero son tediosos y dan muchos problemas de convergencia. Un método sencillo para calcular el reflujo mínimo puede consistir en una extrapolación en la representación gráfica del número de etapas teóricas frente a la razón de reflujo.

El cálculo riguroso del reflujo mínimo requiere realizar cálculos etapa a etapa desde el domo y el fondo de la columna hasta la etapa de alimentación, hasta no encontrar cambios en la composición del líquido al pasar de una etapa a otra. Para ello se requiere conocer la composición del destilado y la del fondo, lo que a su vez implica tener que realizar una suposición acerca de la distribución de productos entre el domo y el fondo. Esta distribución puede estimarse, pero es muy difícil de establecer exactamente para una alimentación dada y para una



cierta separación entre componentes claves, por lo que aun tratándose de métodos rigurosos, los resultados seguirán siendo aproximados. Para una distribución de componentes calculada o supuesta, se puede utilizar el siguiente procedimiento:

1. Se supone una razón de reflujo externo mínima, y se calcula la razón de reflujo interno mínima para cada sector de la columna.
2. Se calcula la temperatura de rocío del vapor que sale de la etapa 1.
3. Se calcula la composición del líquido que sale de la etapa 1 (equilibrio).
4. Se calcula la composición del vapor que sale de la etapa 2 (balance de materia)
5. Se continúa de esta manera, repitiendo los cálculos etapa a etapa, hasta que no se observe cambio en la temperatura o en la composición al cambiar de etapa.
6. Se calcula la temperatura de burbuja del fondo y la composición del vapor en equilibrio.
7. Se repiten los cálculos etapa a etapa desde el fondo de la columna, hasta no encontrar cambios en la temperatura o en la composición de las corrientes al pasar de una etapa a otra.
8. Se añade trazas de los componentes LLK a la composición del punto de contacto o infinidad inferior (donde se acumulan las etapas de composición constante) y se continúa hasta la etapa de alimentación (donde las composiciones del alimento coinciden esencialmente con las obtenidas en el cálculo etapa a etapa).
9. Se continúa con el cálculo etapa a etapa hasta que los componentes HHK prácticamente hayan desaparecido.
10. Se comparan las composiciones obtenidas en el paso 9 con las procedentes del cálculo etapa a etapa comenzando en la etapa 1. Si son iguales, el reflujo mínimo supuesto era correcto. En caso contrario, se supone un nuevo reflujo mínimo y se repite todo el cálculo.

Este procedimiento, que se suele calificar como riguroso, sigue siendo aproximado ya que no tiene en cuenta los balances de entalpía en cada etapa. Sin embargo,



aunque éstos sí se considerarán, los resultados seguirían sin ser exactos debido a la incertidumbre asociada con el cálculo de la entalpía de una mezcla multicomponente y también con el hecho de que los cálculos se inician a partir de una composición del producto supuesta.

Shiras, Hanson y Gibson clasifican los sistemas multicomponentes atendiendo a que tengan una clase 1 o una clase 2 que corresponden a las zonas en la columna donde se acumulan las etapas de composición constante, denominadas puntos de contacto o de infinitud, zonas de conjunción o zonas de tangencia (en inglés, pinch point).

Son sistemas de clase 1 las mezclas binarias y las mezclas multicomponentes en las que todos los componentes están repartidos a lo largo de toda la columna. La zona de contacto aparece en las etapas adyacentes a la etapa de alimentación, salvo en casos similares al que se da en mezclas binarias no ideales en las que la recta operativa que determina el reflujo mínimo sea una tangente a la curva de equilibrio. En este caso, la zona de composición constante aparece en el sector en el que se encuentre dicho punto de tangencia. Los sistemas de clase 2 son aquellos en los que hay componentes no repartidos. Si hay componentes LLK no distribuidos, aparece una zona de contacto en el sector de agotamiento, separada de la etapa de alimentación, y las etapas comprendido entre la alimentación y la zona de contacto sirven para eliminar los componentes ligeros que no aparecen en el fondo. Si hay componentes HHK no distribuidos, aparece una zona de contacto en el sector de enriquecimiento, y las etapas entre la etapa de alimentación y la zona de contacto sirven para eliminar los componentes pesados que no aparecen en el destilado. Ocurrirán separaciones de clase 1 en el caso de mezclas con un estrecho margen de temperaturas de ebullición, o cuando el grado de separación entre los componentes clave no sea muy grande.

#### ❖ PARA SEPARADORES CLASE 1

Una separación de clase 1 es aquella en la que el punto de contacto aparece en una posición adyacente a la etapa de alimentación. Suelen ser separaciones de



clase 1 las separaciones de mezclas binarias y las separaciones multicomponentes donde todos los componentes se encuentran repartidos.

Sea el caso general de un punto de contacto en la etapa de alimentación. Un balance de componente para todas las etapas entre la zona de contacto y el domo de la columna conduce a:

$$y_{i\infty}V_{\infty} = x_{i\infty}L_{\infty} + x_{iD}D \quad (25)$$

y el balance total

$$V_{\infty} = L_{\infty} + D \quad (26)$$

donde el subíndice  $\infty$  se refiere a las corrientes en la zona de contacto, V y L representan, respectivamente, los flujos de las corrientes de vapor y de líquido y D es el flujo de destilado.

$$\frac{L_{\infty}}{D} = \frac{\left[ \frac{x_{iD}}{x_{i\infty}} - (\alpha_{ij})_{\infty} \frac{x_{jD}}{x_{j\infty}} \right]}{(\alpha_{ij})_{\infty} - 1} \quad (27)$$

Para las separaciones de clase 1 puede considerarse que las composiciones de la zona de contacto son idénticas a las de concentraciones en equilibrio con la alimentación, siempre que éste no esté ni sobrecalentado ni subenfriado ya que, en estas condiciones, si sólo hay un punto de contacto, el punto de contacto normalmente aparecerá inmediatamente por encima, inmediatamente por debajo, o inmediatamente por encima y por debajo del piso de alimentación. Por tanto,  $x_{i\infty} = x_{iF}$  y la ecuación (27) para LK y HK adquiere la forma:

$$\frac{(L_{\infty})_{min}}{D} = \frac{\left[ \frac{x_{LK,D}}{x_{LK,F}} - (\alpha_{LK,HK})_F \frac{x_{HK,D}}{x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \quad (28)$$

O, multiplicando por  $\frac{D}{F}$

$$\frac{(L_{\infty})_{min}}{F} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[ \frac{Dx_{LK,D}}{L_F x_{LK,F}} - (\alpha_{LK,HK})_F \frac{Dx_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \quad (29)$$

que es la ecuación de Underwood y que también puede aplicarse a los componentes no clave.



Normalmente en una columna de destilación hay dos puntos de conjunción, uno en la zona de enriquecimiento y otro en la de agotamiento y la composición en cada uno de ellos puede ser muy diferente de la alimentación. Sin embargo, puede calcularse un valor muy aproximado de la razón de reflujo mínima haciendo la suposición anterior.

Como puede verse, para aplicar la ecuación de Underwood se necesita la volatilidad relativa correspondiente a la alimentación y al destilado: se requerirá el cálculo de la temperatura de ebullición de la alimentación y a partir de esta temperatura y estimando la presión de la etapa de alimentación, se calcularán  $K_i$ ,  $K_j$  y  $\alpha_{ij}$ .

Para una separación especificada de los dos componentes clave, la distribución de los no clave a reflujo mínimo, para separaciones de clase 1, se obtiene combinando (29) con una ecuación análoga para el componente i:

$$\frac{(L_\infty)_{min}}{F} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[ \frac{Dx_{i,D}}{L_F x_{i,F}} - (\alpha_{i,HK})_F \frac{Dx_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{i,HK})_F - 1} \quad (30)$$

Y, despejando, se llega a:

$$\frac{Dx_{iD}}{L_F x_{iF}} = \left[ \frac{(\alpha_{i,HK})_F - 1}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \right] \left( \frac{Dx_{LK,D}}{L_F x_{LK,F}} \right) + \left[ \frac{(\alpha_{LK,HK})_F - (\alpha_{i,HK})_F}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \right] \left( \frac{Dx_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right) \quad (31)$$

Ecuación que da la distribución de componentes no clave en condiciones de reflujo mínimo.

Para una separación de clase 1:

$$0 < \left( \frac{Dx_{iD}}{F x_{iF}} \right) < 1 \quad (32)$$

Para todos los componentes no clave ya que, como ya se ha dicho, todos los componentes se encuentran repartidos.

#### ❖ PARA SEPARADORES CLASE 2

En la separaciones de clase 2 hay componentes no repartidos, es decir, que solo aparecen en el destilado o en el fondo. Para estas separaciones es también



aplicable la ecuación (29), aunque no se puede utilizar directamente para calcular la relación de reflujo interno mínima ya que los valores de  $x_{i\infty}$  no están relacionados de forma sencilla con la composición de la alimentación. Underwood ideó un procedimiento, definiendo para el sector de enriquecimiento la magnitud  $\phi$ :

$$\sum \frac{(\alpha_{ir})_{\infty} x_{iD}}{(\alpha_{ir})_{\infty} - \phi} = 1 + (R_{\infty})_{min} \quad (33)$$

Y para el sector de agotamiento,  $\phi$ :

$$\sum \frac{(\alpha'_{ir})_{\infty} x_{iB}}{(\alpha'_{ir})_{\infty} - \phi} = 1 - (R'_{\infty})_{min} \quad (34)$$

donde  $R'_{\infty} = L'_{\infty}/B$ , y la hace referencia a condiciones en la zona de contacto en el sector de agotamiento. Se suponen constantes las volatilidades relativas en la sección entre las dos zonas de contacto y que  $(R_{\infty})_{min}$  y  $(R'_{\infty})_{min}$  están relacionadas por la suposición de flujo molar constante en la región comprendida entre la entrada de la alimentación y el punto de contacto de la sección de rectificación, así como en la región comprendida entre la entrada de la alimentación y el punto de contacto en la sección de agotamiento. Por tanto:

$$(L'_{\infty})_{min} - (L_{\infty}) = \psi F \quad (35)$$

Donde  $\psi$  representa la condición térmica de la alimentación.

Underwood demostró que existe, por lo menos, una raíz común,  $\theta$  ( $\theta = \Phi = \Phi'$ ) entre las ecuaciones (33) y (34), que puede obtenerse resolviendo la siguiente ecuación:

$$\sum \frac{(\alpha_{ir})_{\infty} z_{iF}}{(\alpha_{ir})_{\infty} - \theta} = 1 - \psi \quad (36)$$

Por conveniencia,  $r$  se toma como el componente clave pesado, HK. Cuando solamente se distribuyen los dos componentes clave, la raíz  $\phi$ , necesaria para calcular el reflujo mínimo con la ecuación (33) se obtiene resolviendo la ecuación (36) para obtener una solución que cumpla  $\alpha_{LK, HK} > \theta > 1$ , y se obtiene entonces la relación de reflujo interno  $(R_{\infty})_{min}$  sustituyendo el valor obtenido en la ecuación (33):



$$\sum \frac{(\alpha_{ir})_{\infty} x_{iD}}{(\alpha_{ir})_{\infty} - \phi} = 1 + (R_{\infty})_{min} \quad (37)$$

Si se sospecha que hay componentes no clave repartidos, el número de incógnitas en la ecuación (33) aumenta ya que ahora se desconoce, además de  $(R_{\infty})_{min}$ , el valor de  $x_{iD}$  de los componentes no clave repartidos. El problema se resuelve planteando un sistema de ecuaciones, formado por tantas ecuaciones (37) como incógnitas haya, y donde cada ecuación se diferencia del resto únicamente en el valor de la raíz  $\theta$  utilizada. El número de incógnitas es igual al número de componentes no clave repartidos ( $x_{iD}$  desconocidas) más uno ( $(R_{\infty})_{min}$ ), o lo que es lo mismo, al número total de componentes repartidos menos uno (ya que el número total de componentes repartidos es igual al número de componentes no clave repartidos más dos, por los componentes clave, que siempre están repartidos). Por tanto, en este caso, habrá que resolver la ecuación (37) para obtener  $m$  soluciones para  $\theta$ , siendo  $m$  el número de componentes distribuidos menos 1. Las soluciones buscadas son las que se encuentran comprendidas entre cada pareja adyacente de volatilidades relativas de componentes repartidos. Con estas  $m$  raíces se resuelven simultáneamente las  $m$  ecuaciones (37) y se obtiene  $(R_{\infty})_{min}$  y los valores desconocidos de las  $x_{iD}$ .

La ecuación (36) recibe el nombre de “primera ecuación de Underwood” y permite calcular los valores apropiados de  $\theta$ , mientras que la ecuación (33) recibe el nombre de “segunda ecuación de Underwood”, y permite calcular el reflujo mínimo.

Las ecuaciones de Underwood para separaciones de clase 2 son ampliamente utilizadas, incluso sin que se llegue a plantear el tipo de separación de que se trata.

Cuando las suposiciones de flujo molar constante no son válidas, el valor obtenido por este procedimiento para el reflujo mínimo puede desviarse mucho del valor real, y cuando las suposiciones del método pueden considerarse aceptables y se obtiene un valor negativo para el reflujo mínimo, debe interpretarse como que la



sección de enriquecimiento no es necesaria para llevar a cabo la separación planteada.

De acuerdo con las ecuaciones de Underwood, el reflujo mínimo depende fundamentalmente de la volatilidad relativa y de la condición térmica de la alimentación, y en menor extensión de la separación entre los componentes clave.

#### 2.5.5. CORRELACIÓN DE GILLILAND

El número de etapas teóricas para llevar a cabo una cierta separación depende de la razón de reflujo de operación. De las infinitas combinaciones posibles, debe elegirse la que haga que el costo total de la destilación sea lo menor posible. La relación de reflujo real se suele expresar como un múltiplo del reflujo mínimo y, en general, el óptimo económico para separaciones que requieren gran número de etapas suele encontrarse en torno a un valor de  $R/R_{\text{mín}}$  de aproximadamente 1.10, mientras que aquéllas que requieren pocas etapas se suelen diseñar para valores de  $R/R_{\text{mín}}$  de alrededor de 1.50. Para casos intermedios se suelen utilizar valores del orden de  $R/R_{\text{mín}} = 1.30$ .

La expresión más utilizada para relacionar la razón de reflujo y el número de etapas teóricas es la correlación empírica de Gilliland, que se representa en la Figura 3, y que se obtiene a partir de 61 puntos experimentales que cubren los siguientes intervalos de condiciones:

1. N° de componentes = 4 - 11
2.  $\psi = 0.28 - 1.42$
3. Presión = vacío - 600 psia
4.  $\alpha_{LK,HK} = 1.1 - 4.05$
5.  $R_{\text{mín}} = 0.53 - 9.09$
6.  $N_{\text{mín}} = 3.4 - 60$ .

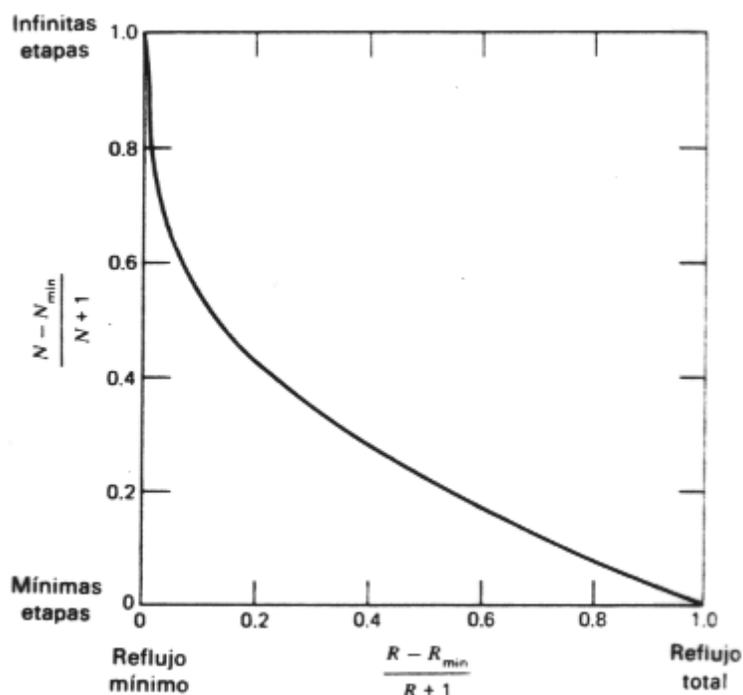


Figura 3 Correlación de Gilliland en coordenadas lineales.

La curva de la Figura 3 ha sido ajustada a la siguiente ecuación, desarrollada por Molokanov y col.:

$$Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[ \left( \frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left( \frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right] \quad (38)$$

Donde

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (39)$$

Como es usual, el valor de N incluye una etapa para una caldera parcial y una etapa para un condensador parcial.

De acuerdo con la figura 3, un pequeño incremento inicial de R por encima de R<sub>mín</sub> provoca una gran disminución de N, pero incrementos posteriores ya no tienen tanta influencia sobre el número de etapas. El cambio brusco de pendiente corresponde a la razón de reflujo óptima. En general, la correlación de Gilliland presenta problemas cuando el agotamiento es más importante que la rectificación, debido a que no se tiene en cuenta el flujo de vapor generado en el rehervidor. Por otro lado, esta correlación tampoco tiene en cuenta la condición térmica de la alimentación, y tiende a ser conservadora para alimentaciones con fracciones



líquidas bajas. El efecto de la condición térmica de la alimentación puede llegar a ser importante cuando la volatilidad relativa de LK respecto de HK es alta o cuando la alimentación es pobre en componentes volátiles.

### 2.5.6. ECUACIÓN DE KIRKBRIDE

Una aproximación razonablemente buena de la localización de la etapa óptima de alimentación puede obtenerse utilizando la ecuación empírica de Kirkbride:

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[ \left( \frac{z_{HK,F}}{z_{LK,F}} \right) \left( \frac{z_{LK,B}}{z_{HK,D}} \right)^2 \left( \frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} \quad (40)$$

donde  $N_R$  y  $N_S$  representan, respectivamente, el número de pisos en el sector de enriquecimiento y en el de agotamiento (es decir,  $N = N_R + N_S$ ).

Otra ecuación utilizada con frecuencia es la ecuación de Fenske, que se obtiene cuando se supone que la relación entre el número de etapas por encima y por debajo de la etapa de alimentación es la misma que la determinada por la aplicación de la ecuación de Fenske a ambos sectores por separado (esto no es cierto más que para separaciones y alimentos simétricos):

$$N_{min,S} = \frac{\ln S_s}{\ln \alpha_s} \quad (41)$$

$$S_s = \frac{z_{LK} x_{HK,B}}{z_{HK} x_{LK,B}} \quad (42)$$

Donde  $\alpha_s$  es la volatilidad relativa media de LK en la sección inferior de la columna. El número de platos en dicho sector se calcula:

$$\frac{N_S}{N_{min,S}} = \frac{N}{N_{min}}$$

La ecuación de Fenske proporciona resultados no adecuados comparados con los de Kirkbride.

En general, es preferible utilizar la ecuación de Kirkbride ya que, como se ha dicho, la ecuación de Fenske sólo es aplicable para alimentos y separaciones simétricas.



### 2.5.7. CÁLCULO DE LOS SERVICIOS DEL CONDENSADOR Y EL EBULLIDOR

El flujo de calor en el condensador es calculado por medio de un balance de entalpía aplicado a la etapa del condensador.

$$Q_C = V_1 H_{V1} - D H_D - L_0 H_{L0} \quad (43)$$

A partir de un balance global de entalpía

$$Q_B = D H_D + B H_B + Q_C - F H_F \quad (44)$$

Se obtiene el flujo de calor en la caldera.

## 2.6. MÉTODOS RIGUROSOS PARA SEPARACIONES MULTICOMPONENTES EN ETAPAS MÚLTIPLES

El diseño de una columna de etapas múltiples para la separación de mezclas multicomponentes requiere una determinación rigurosa de las temperaturas, presiones, flujos de las corrientes, composiciones y rapidez de transferencia de calor para cada etapa. Esta determinación se realiza resolviendo los balances de materia y energía (entalpía), y relaciones de equilibrio para cada etapa.

Cálculos como la densidad, presiones de vapor, entalpías, concentraciones en las fases, etc., requieren disponer de correlaciones exactas para el diseño de equipos de separación multicomponente. Su importancia está bien discutido en la literatura, por ejemplo el efecto del coeficiente de distribución  $K$  y de entalpía ( $H$ ) sobre los requerimientos de calor en el rehervidor ( $Q_B$ ) y condensador ( $Q_C$ ) o el efecto de la correlación de la entalpía sobre el consumo de vapor de una columna para separar etano de una mezcla de hidrocarburos.

En el caso del comportamiento termodinámico del equilibrio de fases en un proceso de destilación, su enfoque tradicional ha estado centrado en el uso de correlaciones de la constante de equilibrio  $K$ . Sin embargo, este método suele usarse como cálculo preliminar sobre todo cuando la presión tiende a aumentar o cuando los componentes tienen una marcada diferencia en su estructura química.

En la Figura 4 se encuentra representado el esquema de general de una etapa de equilibrio.

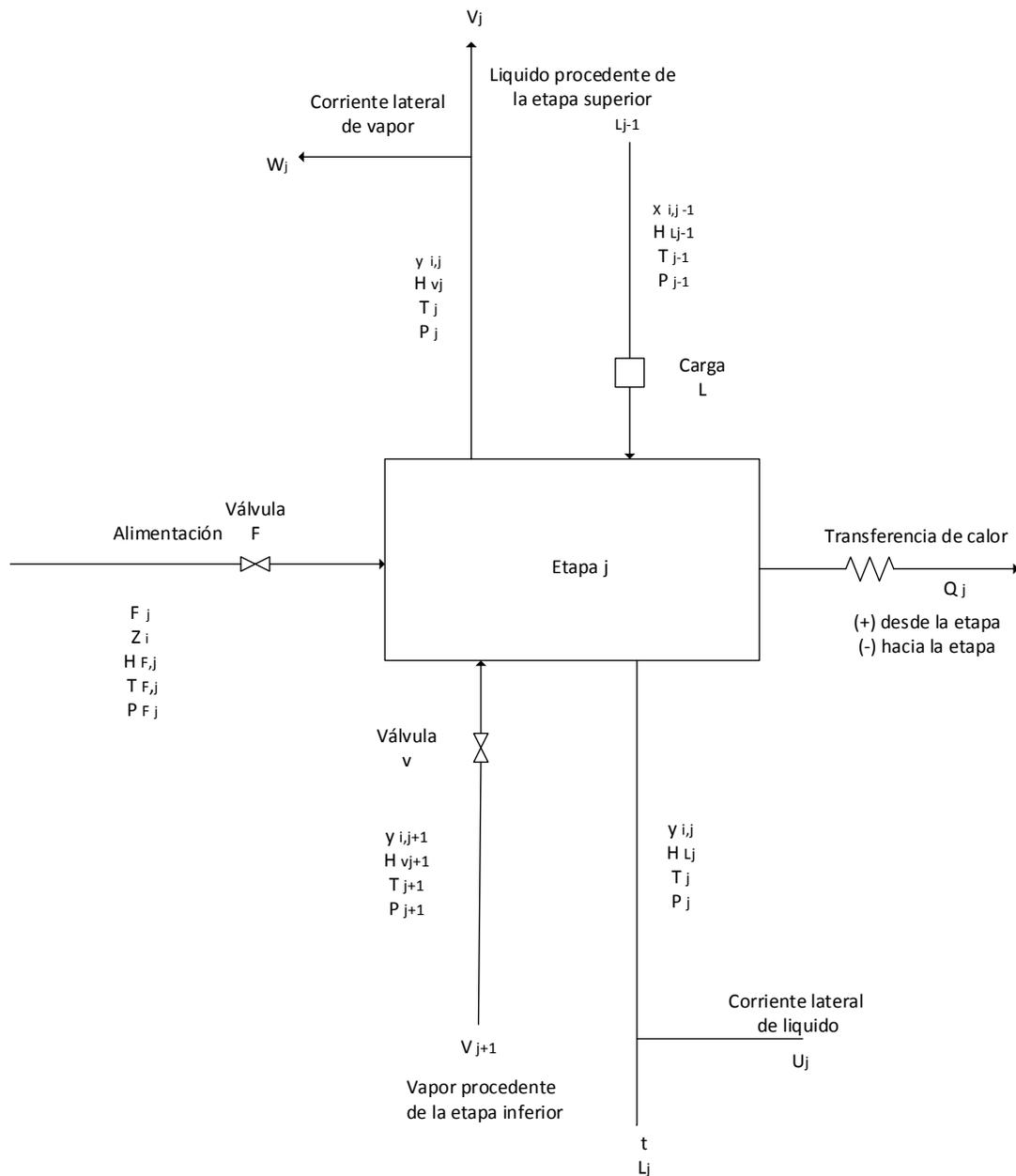


Figura 4 Etapa General de Equilibrio

### 2.6.1. ECUACIONES MESH

La solución de un problema de separación con múltiples etapas requiere de balances de masa, balances de energía y condiciones adecuadas de equilibrio en cada etapa del proceso. Las ecuaciones simples son a menudo básicas, pero la operación en contracorriente interconecta todas las etapas, originando un sistema de ecuaciones simultáneas no lineales.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

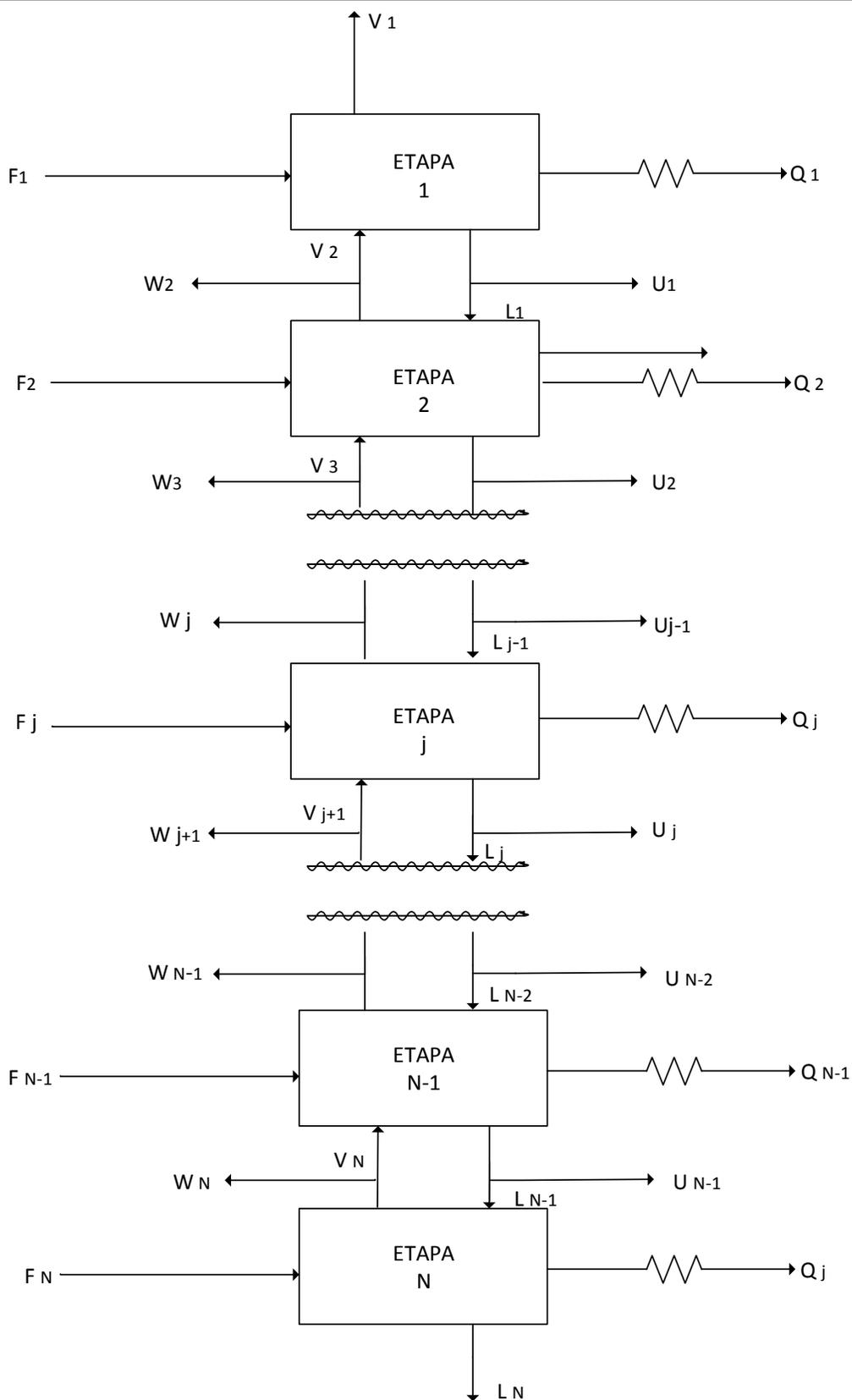


Figura 5 Representación Esquemática de un Proceso en Contracorriente de  $N$  Etapas



Para un sistema con N etapas (Figura 5) y C componentes, las expresiones matemáticas que describen los procesos de separación en contracorriente y múltiple etapa son derivados del balance de materia y de energía alrededor del plato j del modelo (Figura 4).

1. Ecuaciones M. balances de materia para cada componente (C ecuaciones para cada etapa).

$$M_{i,j} = V_{j+1}y_{i,j+1} + L_{j-1}x_{i,j-1} - (V_j + W_j)y_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} + F_jz_{ij} = 0 \quad (45)$$

2. Ecuaciones E. Relaciones de equilibrio entre fases para cada componente (C ecuaciones para cada etapa).

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (46)$$

3. Ecuaciones S. Suma de las fracciones molares (una para cada etapa).

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (47)$$

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (48)$$

4. Ecuación H. Balance de energía (uno para cada etapa).

$$H_j = V_{j+1}H_{j+1} + L_{j-1}h_{j-1} - (V_j + W_j)H_j - (L_j + U_j)h_j + F_jH_{F_j} + Q_j = 0 \quad (49)$$

Donde se ignoran las variaciones de energía cinética y potencial.

Estas ecuaciones son convencionalmente llamadas como ecuaciones MESH.

En lugar de (47) y (48) se puede utilizar una ecuación para el balance de materia total. Se obtiene combinando estas dos ecuaciones y  $\sum z_{i,j} = 1$  con (45) sumado para los C componentes y a lo largo de las etapas 1 a j para dar:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (50)$$



### 2.6.2. ALGORITMO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL

Frecuentemente, los sistemas de ecuaciones que resultan al aplicar los métodos componente a componente suelen dar lugar a una matriz de coeficientes en forma de matriz tridiagonal, y se resuelven mediante un método de eliminación progresiva que recibe el nombre de algoritmo de Thomas.

Si se modifican las ecuaciones MESH de forma que en las ecuaciones M se sustituyen los  $y_{ij}$  por  $K_{ij}x_{ij}$  y los  $L_j$  por su valor en función de  $W_j$ ,  $U_j$  y  $V_j$  dado por el balance global de materia, se puede obtener la siguiente ecuación para cada componente y etapa, donde se ha omitido el subíndice  $i$  para los términos B, C y D:

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad (51)$$

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \quad 2 \leq j \leq N \quad (52)$$

$$B_j = - \left[ V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) K_{ij} \right] \quad 1 \leq j \leq N \quad (53)$$

$$C_j = V_{j+1} K_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N - 1 \quad (54)$$

$$D_j = -F_j z_{ij} \quad 1 \leq j \leq N \quad (55)$$

Con  $x_{i0} = 0$ ,  $V_{N+1} = 0$ ,  $W_1 = 0$  y  $U_N = 0$ .

Si las ecuaciones M modificadas (51) se agrupan por componentes, pueden escribirse como una serie de  $c$  sistemas de ecuaciones, uno para cada componente, en los que las matrices de coeficientes son matrices tridiagonales y donde la variable de salida para cada sistema es la composición  $x_i$  para ese componente en toda la cascada en contracorriente de  $N$  etapas:



$$\begin{bmatrix}
 B_1 & C_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & & & \dots & 0 \\
 A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \dots & \dots & & & \dots & 0 \\
 0 & A_1 & B_3 & 0 & \dots & \dots & & & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & & & & & & & \dots & \\
 \dots & \dots & & & & & & & \dots & \\
 \dots & & & & & & & & \dots & \\
 \dots & & & & & & & & \dots & \\
 \dots & & & & & & & & \dots & \\
 0 & \dots & & \dots & \dots & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\
 0 & \dots & & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\
 0 & \dots & & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 X_1 \\
 X_2 \\
 \dots \\
 X_N
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 D_1 \\
 D_2 \\
 \dots \\
 D_N
 \end{bmatrix}
 \quad (56)$$

Si se dispone de los valores de los coeficientes  $A_j$ ,  $B_j$ ,  $C_j$  y  $D_j$  en cada etapa, la resolución de los  $c$  sistemas de ecuaciones proporcionará el perfil de composición del líquido en la columna. Mientras que las  $D_j$  pueden calcularse a partir de las especificaciones del problema, los coeficientes  $A_j$ ,  $B_j$  y  $C_j$  para cada componente pueden evaluarse si se conoce –porque se ha supuesto o bien porque se ha calculado en una iteración previa- el perfil de temperatura, de constantes de equilibrio y de caudales de vapor en la columna. En el caso en que los valores de las constantes de equilibrio,  $K_{ij}$ , fueran independientes de la composición, el cálculo se simplificaría ya que entonces el cálculo de los coeficientes  $B_j$  y  $C_j$  dependería exclusivamente de las variantes de tanteo  $T_j$  y  $V_j$ , eliminándose de esta manera en el cálculo de los coeficientes la dependencia de la composición.

### 2.6.3. MÉTODO DEL PUNTO DE BURBUJA (BP) PARA DESTILACIÓN

Es un procedimiento de resolución particularmente efectivo en el caso en que las especies de la mezcla a separar presenten un intervalo estrecho de volatilidades. Fue propuesto por Friday y Smith y desarrollado por Wang y Henke. Se denomina método del punto de burbuja (BP) debido a que en cada iteración se calcula un nuevo conjunto de temperaturas de las etapas a partir de las ecuaciones del punto de burbuja. Las ecuaciones se separan y se resuelven en forma secuencial, excepto las ecuaciones  $M$  modificadas, que se resuelven para cada componente por el método de la matriz tridiagonal. El algoritmo de cálculo se muestra en la Figura 6.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

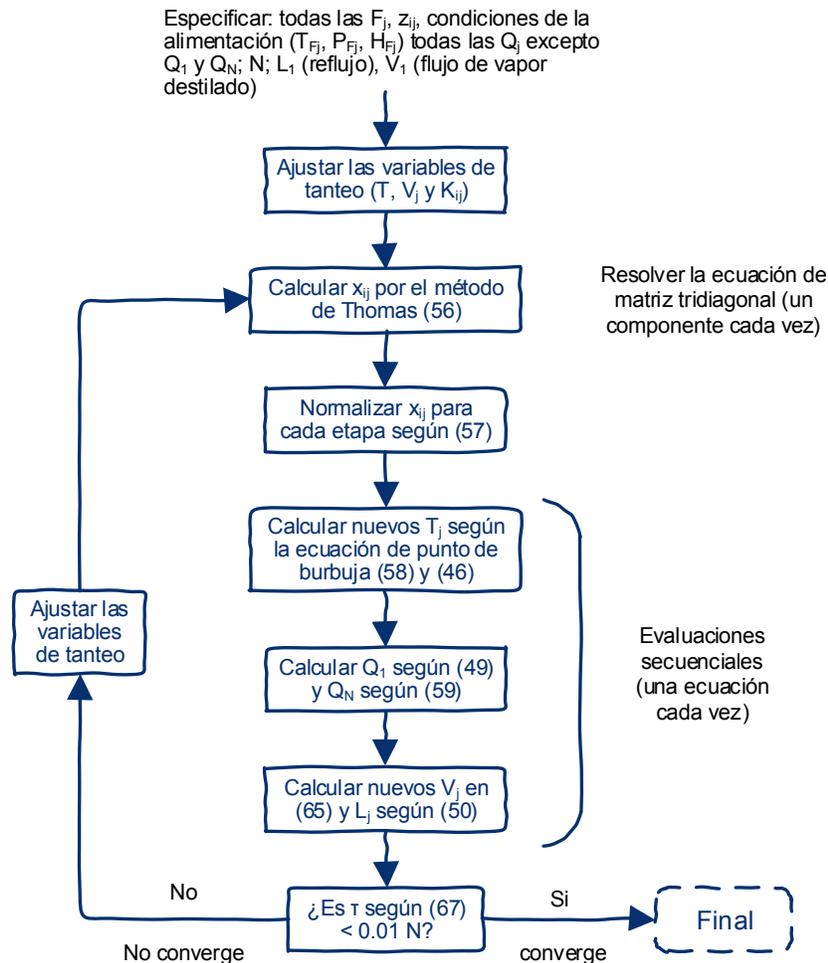


Figura 6 Algoritmo del método Punto de Burbuja (BP)

Para iniciar los cálculos se asignan valores a las variables de tanteo. En la mayoría de los problemas es suficiente con establecer un conjunto inicial de valores  $V_j$  basados en la suposición de flujos molares constantes entre etapas, utilizando los flujos de destilado, alimentación, reflujo y corrientes laterales especificadas. Por lo general, se puede obtener un conjunto inicial adecuado de valores de  $T_j$  calculando y suponiendo tanto la temperatura de burbuja de un producto de fondo estimado, como la temperatura de rocío de un producto de vapor destilado (o en general, calculando o suponiendo la temperatura del destilado en la condición térmica impuesta por el tipo de condensador) y procediendo después a determinar la temperatura del resto de las etapas admitiendo una variación lineal de la temperatura a lo largo de la columna.



Para obtener  $x_i$  a partir de (56) por el método de Thomas se precisan los valores de  $K_{ij}$ . Por tanto, cuando éstos dependen de la composición, se necesitan también suposiciones iniciales para todos los  $x_{ij}$  e  $y_{ij}$ , a no ser que se utilicen en la primera iteración los valores ideales de las  $K_{ij}$ . Para cada iteración, el conjunto de valores calculados  $x_{ij}$  de cada etapa, por lo general, no satisface la restricción impuesta por las ecuaciones S y es aconsejable normalizar el conjunto de valores calculados  $x_{ij}$  mediante:

$$(x_{ij})_{normalizado} = \frac{x_{ij}}{\sum_{i=1}^c x_{ij}} \quad (57)$$

La ecuación necesaria del punto de burbuja se obtiene mediante la combinación de (46) y (47) para eliminar  $y_{ij}$  dando:

$$\sum_{i=1}^c K_{i,j} x_{i,j} - 1 = 0 \quad (58)$$

La energía eliminada en el condensador es una cantidad positiva que se obtiene de (49). El servicio del ebullición es una cantidad que se determina sumando (49) en todas las etapas para dar:

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j H_{F_j} - U_j H_{L_j} - W_j H_{V_j}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 H_{V_1} - L_N H_{L_N} \quad (59)$$

Se calcula entonces un nuevo conjunto de variables de tanteo,  $V_j$ , mediante la aplicación del siguiente balance de energía modificado, obtenido por combinación de (49) y (50) dos veces para eliminar  $L_{j-1}$  y  $L_j$ . una vez reordenando:

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j \quad (60)$$

donde:

$$\alpha_j = H_{L_{j-1}} - H_{V_j} \quad (61)$$

$$\beta_j = H_{V_{j+1}} - H_{L_j} \quad (62)$$



$$\gamma_j = \left[ \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] (H_{L_j} - H_{L_{j-1}}) + F_j (H_{L_j} - H_{F_j}) + W_j (H_{V_j} - H_{L_j}) + Q_j \quad (63)$$

y las entalpias se evalúan para las últimas temperaturas calculadas para cada etapa en vez de las utilizadas al iniciar la iteración. La ecuación (60) escrita en forma de matriz didiagonal, aplicada a las etapas comprendidas entre 2 y N-1 es:

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \alpha_{N-3} & \beta_{N-3} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \alpha_{N-2} & \beta_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \\ V_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_2 - \alpha_2 V_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \gamma_{N-3} \\ \gamma_{N-2} \\ \gamma_{N-1} \end{bmatrix} \quad (64)$$

que se resuelve de forma inmediata, comenzando por la ecuación superior donde  $V_2$  es conocida, y operando hacia abajo en la misma forma, apoyándose en los resultados anteriores. Esto es:

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad (65)$$

Se considera que el método ha convergido cuando los conjuntos de valores de  $T_j$  y de  $V_j$  obtenidos se encuentran dentro de un margen preestablecido de tolerancia. Un posible criterio es el siguiente:

$$\sum_{j=1}^N \left[ \frac{T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{T_j^{(k)}} \right]^2 + \sum_{j=1}^N \left[ \frac{V_j^{(k)} - V_j^{(k-1)}}{V_j^{(k)}} \right]^2 \leq \varepsilon \quad (66)$$

Donde  $k$  es el índice de iteración. Wang y Henke sugieren el siguiente criterio basado exclusivamente en los sucesivos valores de  $T$ :



$$\tau = \sum_{j=1}^N (T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)})^2 \leq 0.01N \quad (67)$$

La velocidad de convergencia del método BP es impredecible y también suele utilizarse junto con el método  $\theta$  de convergencia, mostrado en la Figura 7.

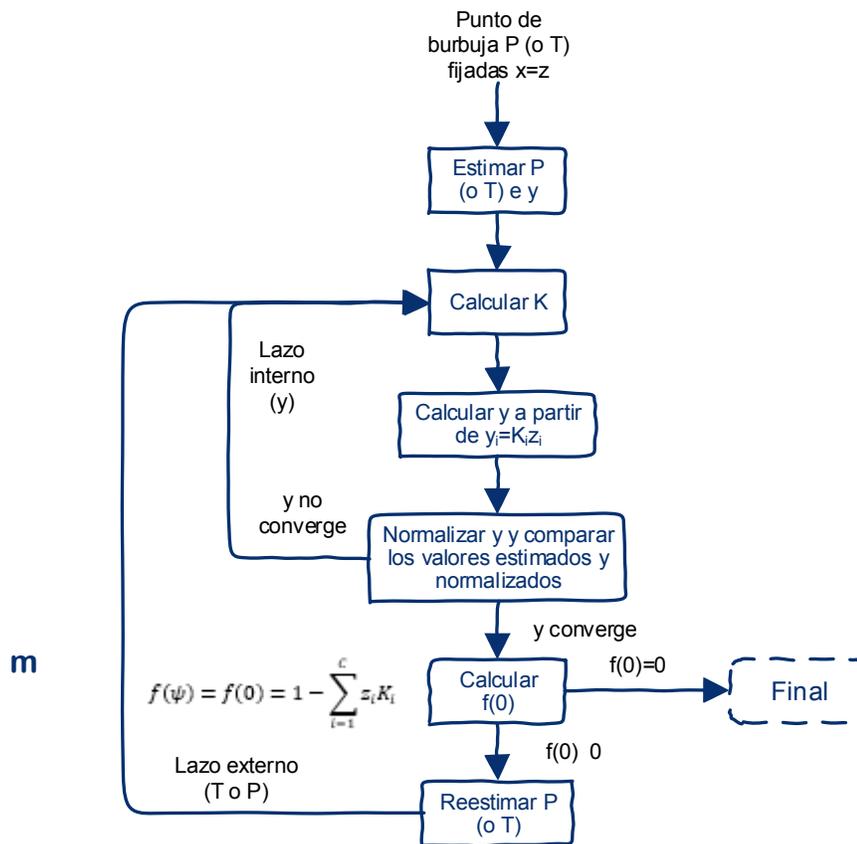


Figura 7 Algoritmo para calcular el Punto de Burbuja



## CAPÍTULO 3: DESARROLLO Y RESULTADOS

### 3.1. COMPOSICIÓN DE LA GASOLINA Y ESPECIFICACIONES

La composición del reformado es la siguiente:

Tabla 2 Composición del reformado, 24-08-2012

| <b>COMPUESTO</b>    | <b>% MOL</b> |
|---------------------|--------------|
| <i>Aromáticos</i>   | 59           |
| <i>Olefinas</i>     | 0.7          |
| <i>Benceno</i>      | 2            |
| <i>Parafinas</i>    | 12           |
| <i>Isoparafinas</i> | 25           |
| <i>Naftenos</i>     | 1.7          |

Para efectos del diseño se tomaron las siguientes consideraciones respecto a los compuestos.

Tabla 3 Composición Gasolina para Cálculo

| <b>COMPUESTOS<br/>DEL REFORMADO</b> | <b>COMPUESTOS<br/>PARA CÁLCULO</b> | <b>%<br/>MOL</b> |
|-------------------------------------|------------------------------------|------------------|
| <i>Aromáticos</i>                   | Tolueno                            | 19               |
|                                     | Xileno                             | 35               |
|                                     | Etilbenceno                        | 5                |
| <i>Olefinas</i>                     | Hepteno                            | 0.3              |
| <i>Benceno</i>                      | Benceno                            | 2                |
| <i>Parafinas</i>                    | Hexano                             | 6                |
|                                     | Octano                             | 6                |
|                                     | Isopentano                         | 5                |
| <i>Isoparafinas</i>                 | Isohexano                          | 10               |
|                                     | Isoctano                           | 10               |
|                                     | <i>Nafteno</i>                     | Ciclohexano      |
|                                     | TOTAL                              | 100              |

La temperatura de alimentación es de 38 °C y la presión es de 1 atm.



### 3.2. DISEÑO DE PRELIMINAR DE LA COLUMNA

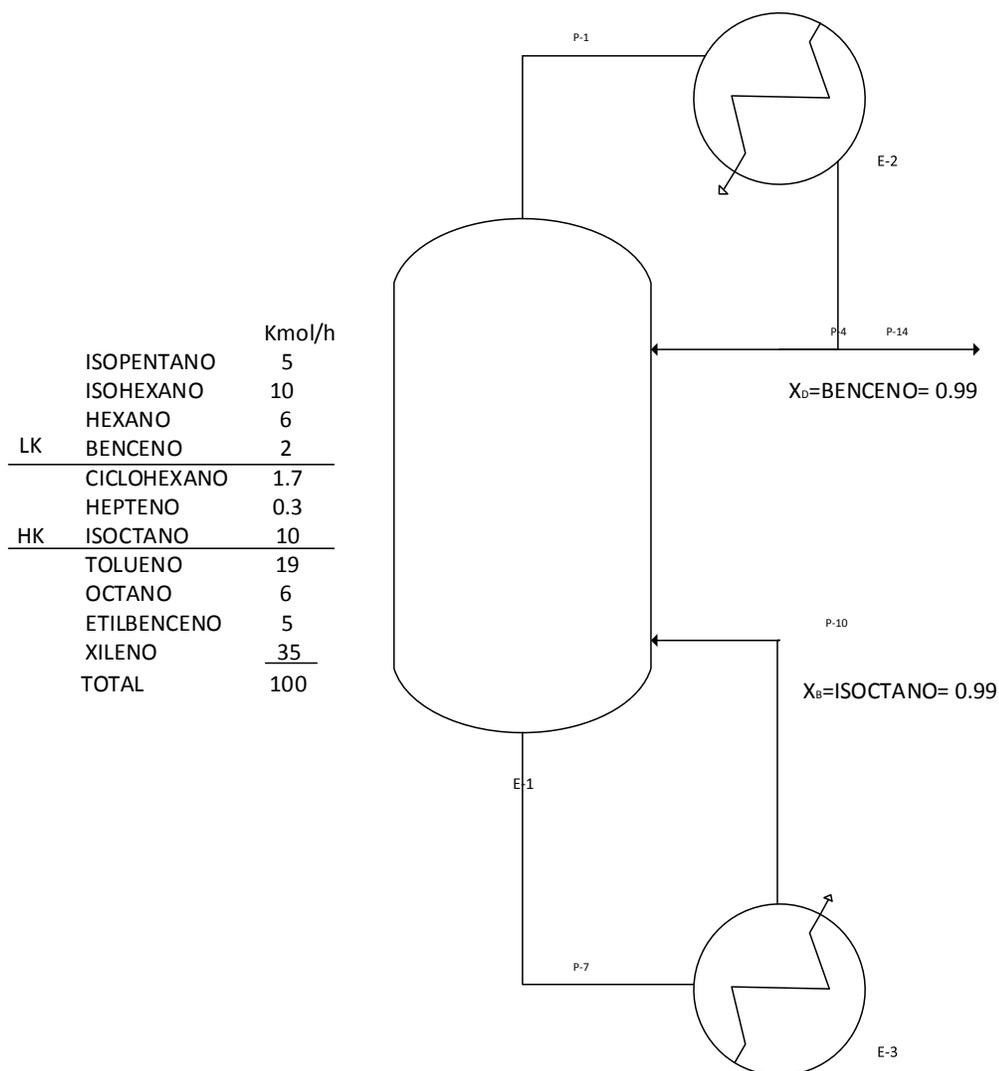


Figura 8 Especificaciones para el Método FUG

Para iniciar con los cálculos y tomando en cuenta que queremos obtener la mayor cantidad de benceno se estableció que este será el componente clave ligero y de manera aleatoria se escogió al isoctano como el componente clave pesado, a su vez se estableció que se obtendría en el domo el 99 % de benceno alimentado y en el fondo el 99% de isoctano alimentado. Con estas afirmaciones se procede a realizar el balance de materia.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 4 Balance de Materia Preliminar

|            |              | Kmol/hr   |       |       | % MOL          |                |        |
|------------|--------------|-----------|-------|-------|----------------|----------------|--------|
| COMPONENTE | ALIMENTACIÓN | DESTILADO | FONDO | Z     | X <sub>D</sub> | X <sub>B</sub> |        |
| 1          | Isopentano   | 5         | 5     | 0     | 0.05           | 0.1993         | 0      |
| 2          | Isohexano    | 10        | 10    | 0     | 0.1            | 0.3987         | 0      |
| 3          | Hexano       | 6         | 6     | 0     | 0.06           | 0.2392         | 0      |
| 4          | Benceno      | 2         | 1.98  | 0.02  | 0.02           | 0.079          | 0.0002 |
| 5          | Ciclohexano  | 1.7       | 1.7   | 0     | 0.017          | 0.0678         | 0      |
| 6          | Hepteno      | 0.3       | 0.3   | 0     | 0.003          | 0.0119         | 0      |
| 7          | Isooctano    | 10        | 0.1   | 9.9   | 0.1            | 0.004          | 0.1321 |
| 8          | Tolueno      | 19        | 0     | 19    | 0.19           | 0              | 0.2536 |
| 9          | Octano       | 6         | 0     | 6     | 0.06           | 0              | 0.0801 |
| 10         | Etilbenceno  | 5         | 0     | 5     | 0.05           | 0              | 0.0667 |
| 11         | Xileno       | 35        | 0     | 35    | 0.35           | 0              | 0.4672 |
| TOTAL      |              | 100       | 25.08 | 74.92 | 1              | 1              | 1      |

Se calcula la presión del domo P<sub>D</sub> del punto de burbuja a una temperatura de 120 °F (49 °C) utilizando las composiciones obtenidas del balance.

Siguiendo el algoritmo de la Figura 7 se hizo una hoja de cálculo en Excel con lo que se obtuvieron los siguientes resultados, mostrados en la Figura 9.

$$P_D = 666.6402 \text{ mmHg}$$

| COMP.       | Tb [K]                         | Pc [atm]    | Tc [K]               | ω                   | A                                      | B                                     | C              | α                      | β  | γ              | δ                                   | Hv [KJ/mol]    | HI [KJ/mol]    |     |
|-------------|--------------------------------|-------------|----------------------|---------------------|--|---------------------------------------|----------------|------------------------|--|----------------|-------------------------------------|----------------|----------------|-----|
| isopentano  | 301                            | 33,4        | 460,4                | 0,227               | 15,6338                                | 2348,67                               | -40,05         | -2,275                 | 0,121  | -0,00006519    | 1,367E-08                           | -153,7         | -178,2         |     |
| isohexano   | 333,4                          | 29,7        | 497,5                | 0,279               | 15,7476                                | 2614,38                               | -46,58         | -2,524                 | 0,1477   | -0,00008533    | 1,931E-08                           | -174,3         | -204,3         |     |
| hexano      | 341,9                          | 29,3        | 507,4                | 0,296               | 15,8366                                | 2697,55                               | -48,78         | -1,054                 | 0,139  | -0,00007449    | 1,551E-08                           | -167,1         | -198,7         |     |
| benceno     | 353,3                          | 48,3        | 562,1                | 0,2116              | 15,9008                                | 2788,51                               | -52,36         | -8,101                 | 0,1133   | -0,00007206    | 1,703E-08                           | 82,93          | 49             |     |
| ciclohexano | 353,7                          | 40,2        | 553,4                | 0,203               | 15,7527                                | 2766,63                               | -50,3          | -13,027                | 0,146  | -0,00006027    | 3,156E-09                           | -124,6         | -157,7         |     |
| hepteno     | 366,8                          | 28          | 537,2                | 0,358               | 15,8894                                | 2895,51                               | -53,97         | -0,789                 | 0,1504   | -0,00008388    | 1,817E-08                           | -63            | -97,7          |     |
| isooctano   | 372,4                          | 25,3        | 543,9                | 0,303               | 15,685                                 | 2896,28                               | -52,41         | -1,782                 | 0,1858   | -0,0001024     | 2,191E-08                           | -224,1         | -259,3         |     |
| tolueno     | 383,8                          | 40,6        | 591,7                | 0,2415              | 16,0137                                | 3096,52                               | -53,67         | -5,817                 | 0,1224   | -0,00006525    | 1,173E-08                           | 50,1           | 12             |     |
| octano      | 398,8                          | 24,5        | 568,8                | 0,394               | 15,9426                                | 3120,29                               | -63,63         | -1,456                 | 0,1842   | -0,0001002     | 2,115E-08                           | -208,7         | -250,3         |     |
| etilbenceno | 409,3                          | 35,6        | 617,1                | 0,301               | 16,0195                                | 3279,47                               | -59,55         | -10,294                | 0,1689   | -0,0001149     | 3,107E-08                           | 29,8           | -12,5          |     |
| xileno      | 412,3                          | 35          | 617                  | 0,3086              | 16,139                                 | 3366,99                               | -58,04         | -6,966                 | 0,1504   | -0,0000895     | 2,025E-08                           | 17,2           | -25,4          |     |
|             |                                |             |                      | 1551,44521          | 1939,30651                             | 2068,59361                            |                |                        |  |                |                                     |                |                |     |
| Tb [K]      | R [atm cm <sup>3</sup> /mol K] | R [J/mol K] | P [mmHg]             | P atm               | R [atm L/mol K]                        | R [cal/mol K]                         | To             | Hv mezcla              |  | HI mezcla      |                                     |                |                |     |
| 322,15      | 82,05606                       | 8,314       | 666,640295           | 8,7715828           | 0,082                                  | 1,987                                 | 298,15         | -35048,8318            |  | -41432,03      |                                     |                |                |     |
| Comp.       | x <sub>i</sub>                 | Tr          | (m <sup>3</sup> /kg) | (ln U) <sup>1</sup> | v <sub>Li</sub> (cm <sup>3</sup> /mol) | v <sub>i</sub> (cm <sup>3</sup> /mol) | Φ <sub>i</sub> | λ <sub>i</sub> (J/mol) | δ <sub>i</sub> (J/cm <sup>3</sup> ) <sup>0,5</sup> | γ <sub>i</sub> | P <sub>i</sub> <sup>0</sup> (mm Hg) | K <sub>i</sub> | y <sub>i</sub> | Σ y |
| isopentano  | 0,1993                         | 0,69971764  | -2,11738928          | -0,52542432         | 120,8175857                            | 129,0564703                           | 0,18657681     | 23199,2407             | 13,0326572   | 1,03858254     | 1492,391793                         | 2,325050058    | 0,463382476    | 1   |
| isohexano   | 0,3987                         | 0,64753769  | -2,16093651          | -0,52775448         | 136,6839288                            |                                       | 0,42226385     | 28099,0872             | 13,6375168   | 1,00411127     | 523,442903                          | 0,788423565    | 0,314344475    |     |
| hexano      | 0,2392                         | 0,63490343  | -2,17072082          | -0,52818505         | 138,6636489                            |                                       | 0,25700645     | 29542,9598             | 13,9190282   | 0,99751992     | 391,0511455                         | 0,585145106    | 0,139966709    |     |
| benceno     | 0,079                          | 0,57311866  | -2,21374111          | -0,53224835         | 93,25018251                            |                                       | 0,05708171     | 31823,2348             | 17,6789427   | 1,53779537     | 261,1111524                         | 0,602327108    | 0,047583842    |     |
| ciclohexano | 0,0678                         | 0,58212866  | -2,20797076          | -0,53127734         | 111,4745911                            |                                       | 0,05856333     | 30788,3347             | 15,879701  | 1,15131934     | 263,9220607                         | 0,455805891    | 0,030903639    |     |
| hepteno     | 0,0119                         | 0,59968354  | -2,1962399           | -0,52985098         | 144,8417942                            |                                       | 0,01335553     | 34401,0172             | 14,7991872   | 1,03033962     | 162,7979484                         | 0,251615718    | 0,002994227    |     |
| isooctano   | 0,004                          | 0,59229638  | -2,20125604          | -0,53038431         | 166,2347913                            |                                       | 0,00515231     | 33269,2581             | 13,5654807   | 0,9757385      | 140,8502702                         | 0,206157703    | 0,000824631    |     |
| tolueno     | 0                              | 0,5444482   | -2,23105322          | -0,53671604         | 112,839247                             |                                       | 0              | 35456,8123             | 17,0437111   | 1,47451587     | 88,25037543                         | 0,19519759     | 0              |     |
| octano      | 0                              | 0,56636779  | -2,21795717          | -0,5331011          | 168,0496422                            |                                       | 0              | 38846,5102             | 14,670482  | 0,99232082     | 48,0758265                          | 0,071562796    | 0              |     |
| etilbenceno | 0                              | 0,52203857  | -2,24362995          | -0,54189963         | 128,1685736                            |                                       | 0              | 40047,4651             | 17,0751922   | 1,58431887     | 34,15942245                         | 0,081182338    | 0              |     |
| xileno      | 0                              | 0,52212318  | -2,24358375          | -0,54187713         | 129,8158098                            |                                       | 0              | 40343,1015             | 17,0334935   | 1,57400736     | 29,68262475                         | 0,070083777    | 0              |     |
|             |                                |             |                      |                     |  |                                       |                |                        |  |                | 0,9999                              |                |                | 1   |

Figura 9 Presión del condensador hoja de cálculo

Como la presión del condensador es menor a 30 psia se fija P<sub>D</sub>=30 psia y se utiliza un condensador total. Por lo que la presión del rehervidor P<sub>B</sub>=40 psia; con esta



**DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS**

presión y la composición del destilado calculada en el balance de materia se calcula la temperatura del fondo ( $T_B$ ) utilizando el algoritmo de punto de burbuja.

Por lo tanto:

$$T_B = 430.9842 \text{ K}$$

| 5 | Tb [K]      | R [atm]        | r [J/mol K] | P [mmHg]            | T <sub>B</sub>      | R [atm L/mol K]                        | R [cal/mol K]                         | To             | Hv mezcla              |  | Hl mezcla      |                        |                |                |     |  |
|---|-------------|----------------|-------------|---------------------|---------------------|--|---------------------------------------|----------------|------------------------|--|----------------|------------------------|----------------|----------------|-----|--|
|   | 430.984234  | 82.05606       | 8.314       | 2068.59361          | 2.7218337           | 0.082                                  | 1.987                                 | 298.15         |                        | -8890.02844  |                | -11256.4055            |                |                |     |  |
| 8 | Comp        | x <sub>i</sub> | Tr          | (ln U) <sub>0</sub> | (ln U) <sub>1</sub> | v <sub>IL</sub> (cm <sup>3</sup> /mol) | v <sub>L</sub> (cm <sup>3</sup> /mol) | Φ <sub>i</sub> | λ <sub>i</sub> (J/mol) | δ <sub>i</sub> (J/cm <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup> | γ <sub>i</sub> | P <sup>s</sup> (mm Hg) | K <sub>i</sub> | y <sub>i</sub> | Σ y |  |
| 9 | isopentano  | 0              | 0.93610824  | -1.7956601          | -0.49388705         | 167.8666626                            | 153.8257322                           | 0              | 12949.7939             | 7.46979269   | 5.00851017     | 15153.10657            | 36.68893105    | 0              | 1   |  |
| 0 | isohexano   | 0              | 0.86629997  | -1.93822092         | -0.50846717         | 171.7032887                            |                                       | 0              | 19412.5909             | 9.6015811  | 1.94234129     | 7680.794304            | 7.212012962    | 0              |     |  |
| 1 | hexano      | 0              | 0.84939739  | -1.96218793         | -0.51029032         | 171.7226949                            |                                       | 0              | 21047.9186             | 10.0847912   | 1.65192595     | 6494.586357            | 5.186410573    | 0              |     |  |
| 2 | benceno     | 0.0002         | 0.76673943  | -2.05506735         | -0.51941287         | 109.5822893                            |                                       | 0.00014248     | 25339.4691             | 14.090357  | 0.96621951     | 5094.678419            | 2.379673649    | 0.000475935    |     |  |
| 3 | ciclohexano | 0              | 0.77879334  | -2.04302362         | -0.51806186         | 131.8185775                            |                                       | 0              | 24236.2243             | 12.5170932   | 1.0137554      | 4842.47267             | 2.373149957    | 0              |     |  |
| 4 | hepteno     | 0              | 0.80227892  | -2.01847931         | -0.51538925         | 173.9173116                            |                                       | 0              | 26175.5578             | 11.3974933   | 1.19188446     | 3674.940044            | 2.117430859    | 0              |     |  |
| 5 | isooctano   | 0.1321         | 0.79239609  | -2.02900631         | -0.51651226         | 198.3145016                            |                                       | 0.17030535     | 25676.8022             | 10.5549456   | 1.48365014     | 3085.61342             | 2.213083696    | 0.292348356    |     |  |
| 6 | tolueno     | 0.2536         | 0.72838302  | -2.09158975         | -0.52326762         | 130.1484177                            |                                       | 0.21456513     | 29136.671              | 14.0121726   | 1.00313091     | 2457.646638            | 1.191795867    | 0.302239432    |     |  |
| 7 | octano      | 0.0801         | 0.75770787  | -2.06389496         | -0.52039471         | 197.0244756                            |                                       | 0.10259441     | 30959.2837             | 11.7876042   | 1.10451915     | 1717.535874            | 0.917072957    | 0.073457544    |     |  |
| 8 | etilbenceno | 0.0667         | 0.69840258  | -2.118543           | -0.52550605         | 145.9651353                            |                                       | 0.06329159     | 33553.4222             | 14.3291488   | 1.03914786     | 1326.490886            | 0.666356194    | 0.044445958    |     |  |
| 9 | xileno      | 0.4672         | 0.69851578  | -2.1184438          | -0.52549908         | 147.8666445                            |                                       | 0.44910104     | 33790.2495             | 14.2928562   | 1.03727369     | 1225.20983             | 0.614368097    | 0.287032775    |     |  |
| 0 |             | 0.9999         |             |                     |                     |  |                                       |                |                        |  |                |                        |                | 1              |     |  |

Figura 10 Temperatura de Fondo Hoja de Calculo

De las Figuras 9 y 10 se obtienen los valores de  $K_D$  y  $K_B$  para los cálculos de las  $\alpha$ 's.

Tabla 5 Valores de  $K_D$  y  $K_B$

| COMPONENTE     | $K_D$  | $K_B$   |
|----------------|--------|---------|
| 1 Isopentano   | 0.9991 | 36.6889 |
| 2 Isohexano    | 0.3388 | 7.212   |
| 3 Hexano       | 0.2514 | 5.1864  |
| 4 Benceno      | 0.2588 | 2.3797  |
| 5 Ciclohexano  | 0.1959 | 2.3731  |
| 6 Hepteno      | 0.1081 | 2.1174  |
| 7 Isooctano    | 0.0886 | 2.2131  |
| 8 Tolueno      | 0.0839 | 1.1918  |
| 9 Octano       | 0.0307 | 0.9171  |
| 10 Etilbenceno | 0.0349 | 0.6664  |
| 11 Xileno      | 0.0301 | 0.6144  |

Se procede a calcular las  $(\alpha_{ij})_m$  con la siguiente ecuación:

$$(\alpha_{ir})_m = \sqrt{\left(\frac{K_{Di}}{K_{Dr}}\right)\left(\frac{K_{Bi}}{K_{Br}}\right)} \quad (68)$$

r=isooctano



Tabla 6 Valores Medios de Volatilidades

| $(\alpha_{i,r})_m$  | Valor   |
|---------------------|---------|
| $(\alpha_{1,7})_m$  | 13.6727 |
| $(\alpha_{2,7})_m$  | 3.5301  |
| $(\alpha_{3,7})_m$  | 2.5787  |
| $(\alpha_{4,7})_m$  | 1.7722  |
| $(\alpha_{5,7})_m$  | 1.5397  |
| $(\alpha_{6,7})_m$  | 1.0804  |
| $(\alpha_{7,8})_m$  | 0.7141  |
| $(\alpha_{7,9})_m$  | 0.3789  |
| $(\alpha_{7,10})_m$ | 0.3444  |
| $(\alpha_{7,11})_m$ | 0.3071  |

Utilizando la ecuación (21) y tomando el valor medio de la volatilidad de los componentes clave ligero (benceno) y clave pesado (isooctano)  $(\alpha_{4,7})_m = 1.7722$ ; se calcula el número mínimo de etapas ( $N_{min}$ ).

$$N_{min} = \frac{\log \left[ \left( \frac{1.98}{0.1} \right) \left( \frac{9.9}{0.02} \right) \right]}{\log(1.7722)} = \boxed{16.0606 \text{ etapas}}$$

Con el  $N_{min}$  se procede a calcular la distribución de los componentes no clave en la columna.

Para la distribución de los componentes no clave en el destilado se utiliza la ecuación (24) con lo que se obtienen los siguientes resultados:

$$d_1 = \frac{5 \text{ Kmol/hr} \left( \frac{0.1 \text{ Kmol/hr}}{9.9 \text{ Kmol/hr}} \right) (13.6727)^{16.0606}}{1 + \left( \frac{0.1 \text{ Kmol/hr}}{9.9 \text{ Kmol/hr}} \right) (13.6727)^{16.0606}} = 5 \text{ Kmol/hr}$$



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 7 Distribución de los Componentes no Clave en el Destilado

| <b>COMPONENTE</b> | <b>d<sub>i</sub> [Kmol/hr]</b> |        |
|-------------------|--------------------------------|--------|
| 1                 | Isopentano                     | 5      |
| 2                 | Isohexano                      | 9.9999 |
| 3                 | Hexano                         | 5.9998 |
| 5                 | Ciclohexano                    | 1.5501 |
| 6                 | Hepteno                        | 0.0101 |
| 8                 | Tolueno                        | 0.0008 |
| 9                 | Octano                         | 0      |
| 10                | Etilbenceno                    | 0      |
| 11                | Xileno                         | 0      |

Para la distribución de los componentes no clave en el fondo se utiliza la ecuación (23) con lo que se obtienen los siguientes resultados:

$$b_1 = \frac{5 \text{ Kmol/hr}}{1 + \left(\frac{0.1 \text{ Kmol/hr}}{9.9 \text{ Kmol/hr}}\right) (13.6727)^{16.0606}} = 0 \text{ Kmol/hr}$$

Tabla 8 Distribución de los Componente no Clave en el Fondo

| <b>COMPONENTE</b> | <b>b<sub>i</sub> [Kmol/hr]</b> |         |
|-------------------|--------------------------------|---------|
| 1                 | Isopentano                     | 0       |
| 2                 | Isohexano                      | 0.0001  |
| 3                 | Hexano                         | 0.0002  |
| 5                 | Ciclohexano                    | 0.1499  |
| 6                 | Hepteno                        | 0.2899  |
| 8                 | Tolueno                        | 18.9992 |
| 9                 | Octano                         | 6       |
| 10                | Etilbenceno                    | 5       |
| 11                | Xileno                         | 35      |

Como la diferencia entre el balance preliminar y el balance real es muy pequeño se considera que las presiones y temperaturas en domo y fondo son correctas por lo que el balance de materia queda de la siguiente manera:



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 9 Balance de Materia en el Domo y Fondo

| COMPONENTE   | DESTILADO<br>[Kmol/hr] | FONDO<br>[Kmol/hr] | X <sub>D</sub> %<br>mol | X <sub>B</sub> %<br>mol |          |
|--------------|------------------------|--------------------|-------------------------|-------------------------|----------|
| 1            | Isopentano             | 5                  | 0                       | 0.2029                  | 0        |
| 2            | Isohexano              | 9.9999             | 0.0001                  | 0.4058                  | 0.000001 |
| 3            | Hexano                 | 5.9998             | 0.0002                  | 0.2435                  | 0.000002 |
| 4            | Benceno                | 1.98               | 0.02                    | 0.0803                  | 0.000265 |
| 5            | Ciclohexano            | 1.5501             | 0.1499                  | 0.0629                  | 0.001989 |
| 6            | Hepteno                | 0.0101             | 0.2899                  | 0.0004                  | 0.003847 |
| 7            | Isocetano              | 0.1                | 9.9                     | 0.004                   | 0.131371 |
| 8            | Tolueno                | 0.0008             | 18.9992                 | 0.00003                 | 0.252114 |
| 9            | Octano                 | 0                  | 6                       | 0                       | 0.079618 |
| 10           | Etilbenceno            | 0                  | 5                       | 0                       | 0.066348 |
| 11           | Xileno                 | 0                  | 35                      | 0                       | 0.464441 |
| <b>Total</b> | <b>24.6407</b>         | <b>75.3593</b>     | <b>1</b>                | <b>1</b>                |          |

Utilizando la ecuación de Underwood (36) se calcula el valor de  $\phi$ . Como la alimentación es líquido saturado se considera  $\psi=1$ .

$$\frac{(13.6727)(5)}{13.6727 - \phi} + \frac{(3.5301)(10)}{3.5301 - \phi} + \frac{(2.5787)(6)}{2.5787 - \phi} + \frac{(1.7722)(2)}{1.7722 - \phi} + \frac{(1.5397)(1.7)}{1.5397 - \phi} + \frac{(1.0804)(0.3)}{1.0804 - \phi} + \frac{(1)(10)}{1 - \phi} + \frac{(0.7141)(19)}{0.7141 - \phi} + \frac{(0.3789)(6)}{0.3789 - \phi} + \frac{(0.3444)(5)}{0.3444 - \phi} + \frac{(0.3071)(35)}{0.3071 - \phi} = 0$$

El valor de  $\phi$  se obtuvo utilizando la función solver de Excel (Figura 11) y el resultado obtenido es el siguiente:

|    | alpha     | F   | xd      | $\phi$ | x                 |            |
|----|-----------|-----|---------|--------|-------------------|------------|
| 1  | 13.6727   | 5   | 0.20289 | $\phi$ | f(x)              | 0.00085441 |
| 2  | 3.5301    | 10  | 0.4058  |        | f(x) <sup>2</sup> | 7.3001E-07 |
| 3  | 2.5787    | 6   | 0.2435  |        |                   |            |
| 4  | 1.7722    | 2   | 0.0803  |        |                   |            |
| 5  | 1.5397    | 1.7 | 0.0629  |        |                   |            |
| 6  | 1.0804    | 0.3 | 0.0004  |        |                   |            |
| 7  | 0.9999999 | 10  | 0.004   |        |                   |            |
| 8  | 0.7141    | 19  | 0.00003 |        |                   |            |
| 9  | 0.3789    | 6   | 0       |        |                   |            |
| 10 | 0.3444    | 5   | 0       |        |                   |            |
| 11 | 0.3071    | 35  | 0       |        |                   |            |

Figura 11 Valor  $\phi$  Solver Excel



$$\phi = 1.6409$$

Con este valor de  $\phi$  obtenido se calcula el reflujo mínimo con la ecuación (37).

$$\begin{aligned} & \frac{(13.6727)(0.2029)}{13.6727 - 1.6409} + \frac{(3.5301)(0.4058)}{3.5301 - 1.6409} + \frac{(2.5787)(0.2435)}{2.5787 - 1.6409} + \frac{(1.7722)(0.0803)}{1.7722 - 1.6409} \\ & + \frac{(1.5397)(0.0629)}{1.5397 - 1.6409} + \frac{(1.0804)(0.0004)}{1.0804 - 1.6409} + \frac{(1)(0.004)}{1 - 1.6409} \\ & + \frac{(0.7141)(0.00003)}{0.7141 - 1.6409} + \frac{(0.3789)(0)}{0.3789 - 1.6409} + \frac{(0.3444)(0)}{0.3444 - 1.6409} \\ & + \frac{(0.3071)(0)}{0.3071 - 1.6409} = 1 + R_{min} \end{aligned}$$

$$1.7787 = 1 + R_{min}$$

Por lo tanto.

$$R_{min} = \boxed{0.7787}$$

Como regla de dedo para el diseño de la columna se utiliza  $R=1.3R_{min}$ ; obteniendo:

$$R = 1.3(0.7787) = \boxed{1.0123}$$

Para calcular el número de etapas teóricas utilizaremos la correlación de Gilliland, se necesita tener el valor de X para poder leer el valor de Y de la Figura 3. De la ecuación (39) obtenemos el valor de X.

$$X = \frac{1.0123 - 0.7787}{1.0123 + 1} = 0.116$$

Ahora se lee el valor de Y en la gráfica:

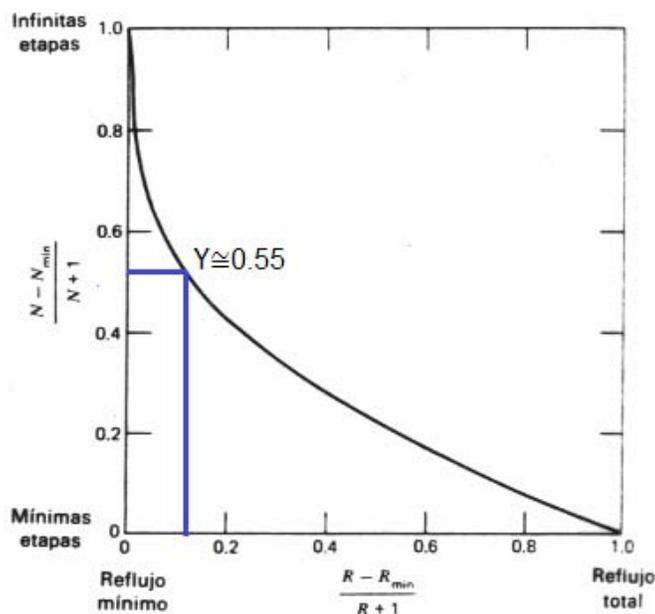


Figura 12 Valor de Y Correlación de Gilliland

De la ecuación (38) se obtiene el valor de etapas teóricas.

$$0.55 = \frac{N - 16.0606}{N + 1}$$

$$0.55N + 0.55 = N - 16.0606$$

$$N = \frac{-16.0606 - 0.55}{0.55 - 1} = 36.9124 \approx \boxed{37 \text{ etapas}}$$

Como se utiliza un condensador total este no está incluido en ese valor por lo que el número de etapas real es  $N=38$ .

Lo único que falta para tener el diseño preliminar es saber en qué etapa estará la alimentación y para esto utilizamos la ecuación de Kirkbride (40).

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[ \left( \frac{0.1}{0.02} \right) \left( \frac{0.000265}{0.004} \right)^2 \left( \frac{75.3593}{24.6407} \right) \right]^{0.206}$$

$$N_R = 0.5732N_S$$

Sustituimos  $N_R$  en  $N=N_R+N_S$

$$N = 0.5732N_S + N_S$$



$$N_S = \frac{38}{1.5732} = 24.1546$$

$$N_R = 38 - 24.1546 = 13.84$$

Por lo tanto la etapa de alimentación es:

$$N_F = \boxed{14}$$

Con estos datos se tiene que el diseño final de la columna es el mostrado en la Figura 13:

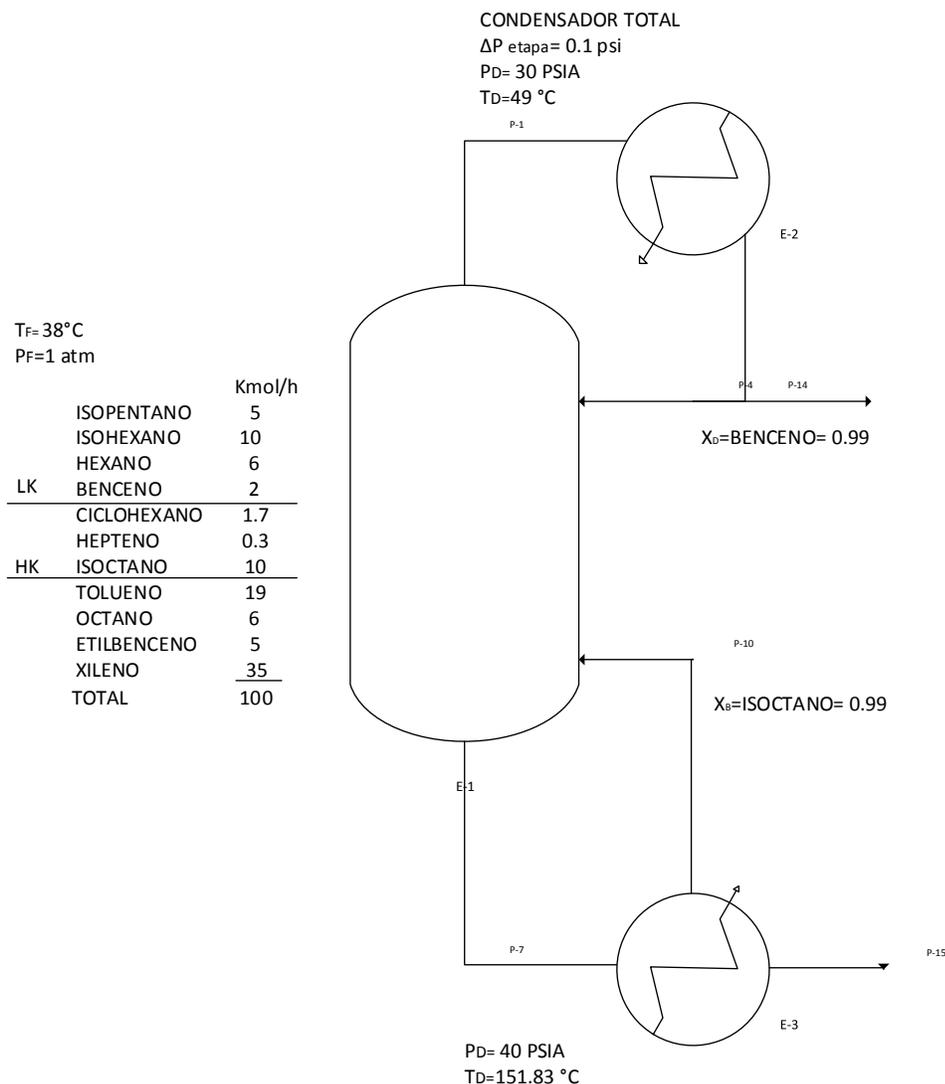


Figura 13 Diseño Preliminar Final de la Columna

### 3.3. DISEÑO RIGUROSO DE LA COLUMNA

Se utiliza el diseño obtenido con el método FUG para iniciar con los cálculos del método riguroso, en la figura 14 se muestra el diseño de la torre.



# DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

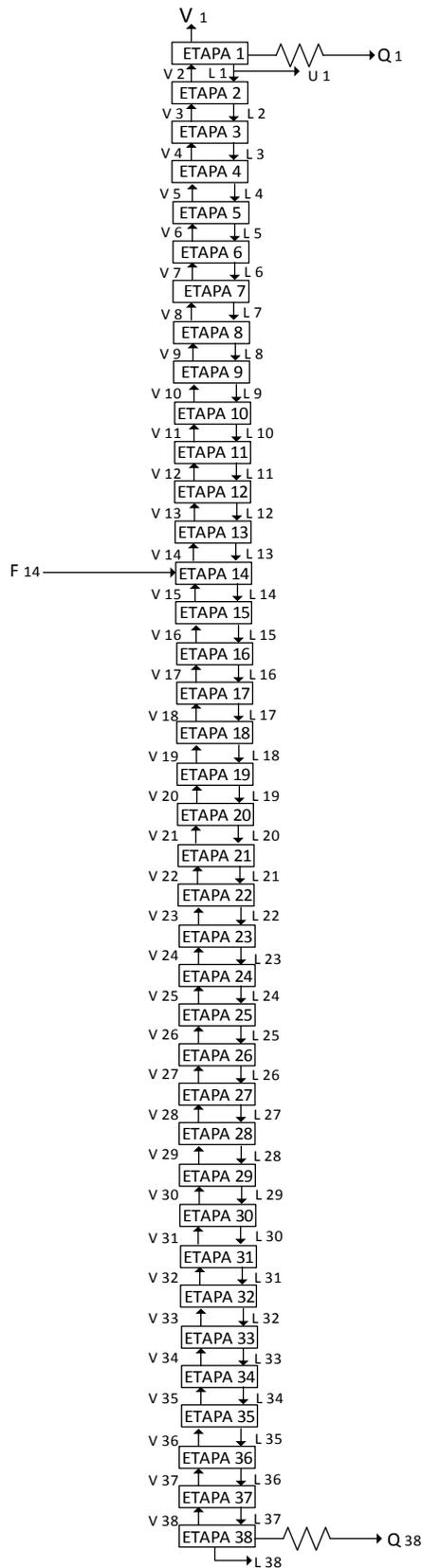


Figura 14 Flujos que Componen la Columna de Destilación



Antes de iniciar con los cálculos se debe realizar el balance en la parte superior de la torre Figura 15 para obtener los valores de  $L_1$  y  $V_2$ .

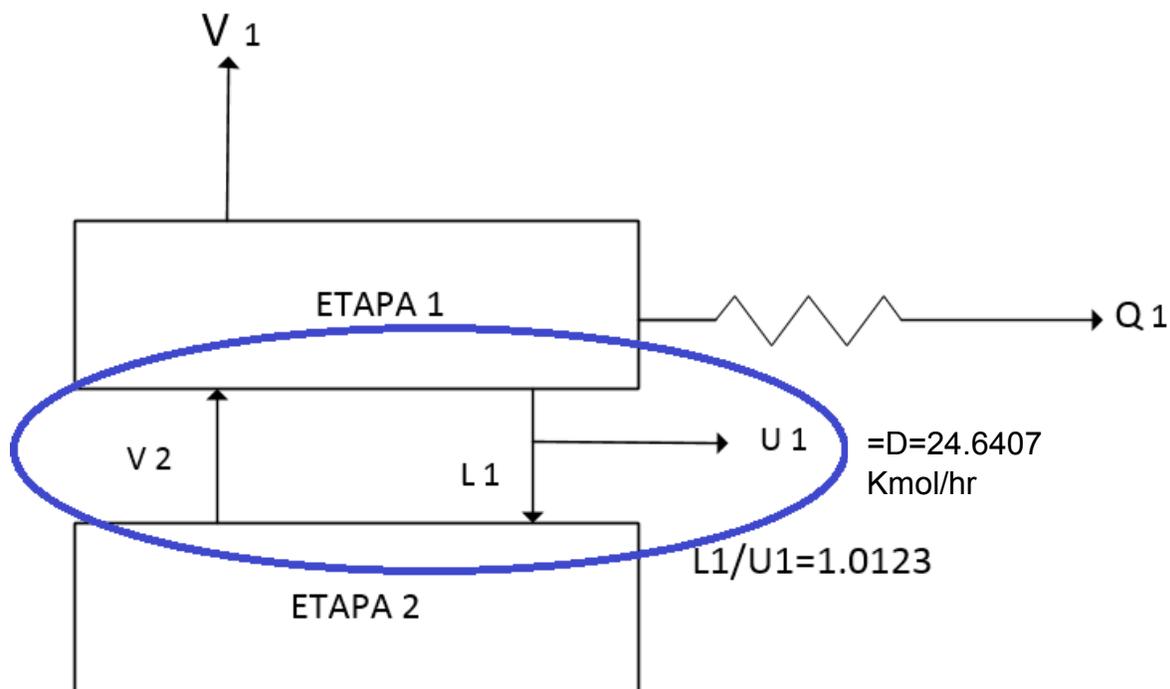


Figura 15 Parte Superior de la Torre

Se realiza el balance de materia del área seleccionada.

$$L_1 = 1.0123(24.6407 \text{ Kmol/hr})$$

$$L_1 = 24.9438 \text{ Kmol/hr}$$

$$V_2 = L_1 + U_1$$

$$V_2 = 24.9438 \text{ Kmol/hr} + 24.6407 \text{ Kmol/hr}$$

$$V_2 = 49.5844 \text{ Kmol/hr}$$

Para la primera iteración se supondrá que el flujo de vapor es constante a lo largo de toda la columna. Para calcular el perfil de temperaturas para cada etapa se tomarán como referencia las temperaturas del domo y el fondo obtenidas por el método FUG.

$$T_D = 322.15 \text{ K}$$

$$T_B = 430.9842 \text{ K}$$



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Teniendo la estimación inicial de la temperatura en el plato 1 y 38 se supuso un comportamiento lineal de las temperaturas a través de toda la columna de la siguiente forma:

$$h = \frac{T_B - T_D}{N - 1} = \frac{430.9842 \text{ K} - 322.15 \text{ K}}{38 - 1} = 2.9414 \text{ K}$$

$$T_j = T_{j-1} + h$$

Se utilizan los datos de V y T de la Tabla 10 para empezar con las iteraciones.

Tabla 10 Valores de V y T iniciales

| ETAPA | V<br>[Kmol/hr] | T [K]    |
|-------|----------------|----------|
| 1     | 0              | 322.15   |
| 2     | 49.5844        | 325.0914 |
| 3     | 49.5844        | 328.0328 |
| 4     | 49.5844        | 330.9742 |
| 5     | 49.5844        | 333.9156 |
| 6     | 49.5844        | 336.857  |
| 7     | 49.5844        | 339.7984 |
| 8     | 49.5844        | 342.7398 |
| 9     | 49.5844        | 345.6812 |
| 10    | 49.5844        | 348.6226 |
| 11    | 49.5844        | 351.564  |
| 12    | 49.5844        | 354.5054 |
| 13    | 49.5844        | 357.4468 |
| 14    | 49.5844        | 360.3882 |
| 15    | 49.5844        | 363.3296 |
| 16    | 49.5844        | 366.271  |
| 17    | 49.5844        | 369.2124 |
| 18    | 49.5844        | 372.1538 |
| 19    | 49.5844        | 375.0952 |
| 20    | 49.5844        | 378.0366 |
| 21    | 49.5844        | 380.978  |
| 22    | 49.5844        | 383.9194 |
| 23    | 49.5844        | 386.8608 |
| 24    | 49.5844        | 389.8022 |
| 25    | 49.5844        | 392.7436 |
| 26    | 49.5844        | 395.685  |
| 27    | 49.5844        | 398.6264 |
| 28    | 49.5844        | 401.5678 |



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

|    |         |          |
|----|---------|----------|
| 29 | 49.5844 | 404.5092 |
| 30 | 49.5844 | 407.4506 |
| 31 | 49.5844 | 410.392  |
| 32 | 49.5844 | 413.3334 |
| 33 | 49.5844 | 416.2748 |
| 34 | 49.5844 | 419.2162 |
| 35 | 49.5844 | 422.1576 |
| 36 | 49.5844 | 425.099  |
| 37 | 49.5844 | 428.0404 |
| 38 | 49.5844 | 430.9818 |

Para resolver el método riguroso se utilizaron hojas de cálculo en Excel, se elaboraron 12 iteraciones antes de converger. A continuación se presentan las temperaturas reales en cada plato de la columna:

Tabla 11 Temperaturas Reales a lo Largo de Toda la Columna

| <b>ETAPA</b> | <b>T [K]</b> | <b>ETAPA</b> | <b>T [K]</b> |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 1            | 351.59625    | 20           | 401.989557   |
| 2            | 360.455935   | 21           | 403.495412   |
| 3            | 364.533621   | 22           | 404.77871    |
| 4            | 367.188704   | 23           | 405.878812   |
| 5            | 369.317865   | 24           | 406.836273   |
| 6            | 371.075172   | 25           | 407.720479   |
| 7            | 372.516172   | 26           | 408.554219   |
| 8            | 373.713105   | 27           | 409.375868   |
| 9            | 374.776589   | 28           | 410.196967   |
| 10           | 375.866655   | 29           | 411.022113   |
| 11           | 377.220468   | 30           | 411.860276   |
| 12           | 379.222412   | 31           | 412.718622   |
| 13           | 382.259188   | 32           | 413.612597   |
| 14           | 386.502329   | 33           | 414.575644   |
| 15           | 390.417488   | 34           | 415.678685   |
| 16           | 393.393777   | 35           | 417.06553    |
| 17           | 395.918556   | 36           | 419.00916    |
| 18           | 398.196907   | 37           | 421.988292   |
| 19           | 400.224769   | 38           | 426.66329    |

Las composiciones obtenidas a lo largo de la columna son las siguientes:



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 12 Composiciones a lo largo de toda la columna

| Etapa | % mol [x <sub>i</sub> ] |           |          |          |             |
|-------|-------------------------|-----------|----------|----------|-------------|
|       | Isopentano              | Isohexano | Hexano   | Benceno  | Ciclohexano |
| 1     | 0.414547                | 0.344272  | 0.165665 | 0.045864 | 0.0194446   |
| 2     | 0.202916                | 0.405831  | 0.243449 | 0.073019 | 0.0380792   |
| 3     | 0.142793                | 0.393796  | 0.262723 | 0.082877 | 0.0486315   |
| 4     | 0.129072                | 0.371221  | 0.258930 | 0.084258 | 0.0530256   |
| 5     | 0.126059                | 0.352874  | 0.248676 | 0.082236 | 0.0536916   |
| 6     | 0.125296                | 0.339732  | 0.238038 | 0.079185 | 0.0523230   |
| 7     | 0.125025                | 0.330523  | 0.229098 | 0.076245 | 0.0501795   |
| 8     | 0.124907                | 0.324082  | 0.222208 | 0.073849 | 0.0480057   |
| 9     | 0.124894                | 0.319496  | 0.217058 | 0.072056 | 0.0461260   |
| 10    | 0.125006                | 0.316075  | 0.213111 | 0.070749 | 0.0445917   |
| 11    | 0.125307                | 0.313270  | 0.209790 | 0.069738 | 0.0433009   |
| 12    | 0.125927                | 0.310577  | 0.206470 | 0.068799 | 0.0420676   |
| 13    | 0.126971                | 0.307528  | 0.202585 | 0.067658 | 0.0406402   |
| 14    | 0.128465                | 0.303765  | 0.197722 | 0.066108 | 0.0388462   |
| 15    | 0.055377                | 0.275483  | 0.218253 | 0.090723 | 0.0544082   |
| 16    | 0.022124                | 0.228370  | 0.219143 | 0.114683 | 0.0719711   |
| 17    | 0.008353                | 0.177070  | 0.205055 | 0.136766 | 0.0911427   |
| 18    | 0.003008                | 0.129831  | 0.180905 | 0.155405 | 0.1109820   |
| 19    | 0.001038                | 0.090592  | 0.151507 | 0.169493 | 0.1300976   |
| 20    | 0.000346                | 0.060552  | 0.121303 | 0.178056 | 0.1471887   |
| 21    | 0.000111                | 0.039037  | 0.093533 | 0.181027 | 0.1613374   |
| 22    | 3.53E-05                | 0.024440  | 0.069955 | 0.178952 | 0.1720877   |
| 23    | 1.09E-05                | 0.014947  | 0.051070 | 0.172699 | 0.1793243   |
| 24    | 3.32E-06                | 0.008972  | 0.036571 | 0.163052 | 0.1831134   |
| 25    | 1.00E-06                | 0.005310  | 0.025790 | 0.151124 | 0.1836917   |
| 26    | 2.99E-07                | 0.003103  | 0.017960 | 0.137690 | 0.1812161   |
| 27    | 8.84E-08                | 0.001792  | 0.012361 | 0.123357 | 0.1759142   |
| 28    | 2.59E-08                | 0.001024  | 0.008412 | 0.108631 | 0.1679734   |
| 29    | 7.55E-09                | 0.000579  | 0.005660 | 0.093998 | 0.1576538   |
| 30    | 2.18E-09                | 0.000324  | 0.003765 | 0.079835 | 0.1453059   |
| 31    | 6.25E-10                | 0.000179  | 0.002473 | 0.066478 | 0.1313354   |
| 32    | 1.78E-10                | 9.80E-05  | 0.001602 | 0.054185 | 0.1161972   |
| 33    | 5.01E-11                | 5.28E-05  | 0.001021 | 0.043126 | 0.1003596   |
| 34    | 1.39E-11                | 2.80E-05  | 0.000637 | 0.033385 | 0.0842624   |
| 35    | 3.83E-12                | 1.45E-05  | 0.000386 | 0.024962 | 0.0682739   |
| 36    | 1.03E-12                | 7.19E-06  | 0.000224 | 0.017788 | 0.0526595   |
| 37    | 2.64E-13                | 3.33E-06  | 0.000120 | 0.011746 | 0.0375907   |
| 38    | 6.05E-14                | 1.33E-06  | 5.55E-05 | 0.006721 | 0.0232579   |



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

| Etapa | % mol [x <sub>i</sub> ] |          |          |          |             |          |
|-------|-------------------------|----------|----------|----------|-------------|----------|
|       | Hepteno                 | Isoctano | Tolueno  | Octano   | Etilbenceno | Xileno   |
| 1     | 0.000561                | 0.008627 | 0.001015 | 3.19E-07 | 1.99E-08    | 3.53E-08 |
| 2     | 0.001735                | 0.030466 | 0.004498 | 2.71E-06 | 1.92E-07    | 3.82E-07 |
| 3     | 0.002917                | 0.056350 | 0.009897 | 9.76E-06 | 7.83E-07    | 1.71E-06 |
| 4     | 0.003914                | 0.082416 | 0.017123 | 2.75E-05 | 2.54E-06    | 6.12E-06 |
| 5     | 0.004638                | 0.105817 | 0.025911 | 6.86E-05 | 7.32E-06    | 1.94E-05 |
| 6     | 0.005058                | 0.124268 | 0.035864 | 0.000156 | 1.94E-05    | 5.69E-05 |
| 7     | 0.005209                | 0.136731 | 0.046446 | 0.000335 | 4.86E-05    | 0.000157 |
| 8     | 0.005159                | 0.143309 | 0.057263 | 0.000682 | 0.000116    | 0.000414 |
| 9     | 0.004978                | 0.144706 | 0.068025 | 0.001333 | 0.000268    | 0.001055 |
| 10    | 0.004716                | 0.141640 | 0.078384 | 0.002508 | 0.000604    | 0.002610 |
| 11    | 0.004398                | 0.134444 | 0.087642 | 0.004526 | 0.001317    | 0.006263 |
| 12    | 0.004023                | 0.122884 | 0.094313 | 0.007730 | 0.002764    | 0.014440 |
| 13    | 0.003574                | 0.106484 | 0.095826 | 0.012127 | 0.005432    | 0.031169 |
| 14    | 0.003055                | 0.085986 | 0.088949 | 0.016719 | 0.009653    | 0.060725 |
| 15    | 0.003766                | 0.103028 | 0.100800 | 0.019135 | 0.010828    | 0.068194 |
| 16    | 0.004524                | 0.120404 | 0.111211 | 0.021308 | 0.011813    | 0.074443 |
| 17    | 0.005358                | 0.138731 | 0.121179 | 0.023402 | 0.012724    | 0.080215 |
| 18    | 0.006262                | 0.157801 | 0.130993 | 0.025443 | 0.013600    | 0.085765 |
| 19    | 0.007200                | 0.176795 | 0.140449 | 0.027391 | 0.014427    | 0.091005 |
| 20    | 0.008137                | 0.194943 | 0.149313 | 0.029166 | 0.015185    | 0.095805 |
| 21    | 0.009047                | 0.211791 | 0.157471 | 0.030679 | 0.015864    | 0.100099 |
| 22    | 0.009916                | 0.227293 | 0.164982 | 0.031949 | 0.016468    | 0.103917 |
| 23    | 0.010746                | 0.241701 | 0.172049 | 0.033069 | 0.017014    | 0.107366 |
| 24    | 0.011550                | 0.255886 | 0.178697 | 0.034054 | 0.017523    | 0.110575 |
| 25    | 0.012319                | 0.269760 | 0.185412 | 0.034964 | 0.018005    | 0.113619 |
| 26    | 0.013051                | 0.283712 | 0.192344 | 0.035821 | 0.018483    | 0.116616 |
| 27    | 0.013735                | 0.297770 | 0.199701 | 0.036690 | 0.018975    | 0.119701 |
| 28    | 0.014347                | 0.312026 | 0.207592 | 0.037601 | 0.019486    | 0.122904 |
| 29    | 0.014851                | 0.326219 | 0.216179 | 0.038586 | 0.020021    | 0.126249 |
| 30    | 0.015214                | 0.339904 | 0.225594 | 0.039696 | 0.020586    | 0.129773 |
| 31    | 0.015394                | 0.352345 | 0.236043 | 0.041011 | 0.021193    | 0.133545 |
| 32    | 0.015342                | 0.362476 | 0.247817 | 0.042672 | 0.021873    | 0.137734 |
| 33    | 0.015010                | 0.368766 | 0.261263 | 0.044930 | 0.022698    | 0.142769 |
| 34    | 0.014342                | 0.369011 | 0.276627 | 0.048206 | 0.023837    | 0.149662 |
| 35    | 0.013270                | 0.359988 | 0.293584 | 0.053123 | 0.025653    | 0.160742 |
| 36    | 0.011711                | 0.336981 | 0.310052 | 0.060365 | 0.028917    | 0.181292 |
| 37    | 0.009566                | 0.293519 | 0.319730 | 0.069960 | 0.035126    | 0.222636 |
| 38    | 0.006764                | 0.222599 | 0.308110 | 0.079221 | 0.046744    | 0.306522 |



La Figura 16 esquematiza el comportamiento de la fracción mol de los componentes a través de toda la columna.

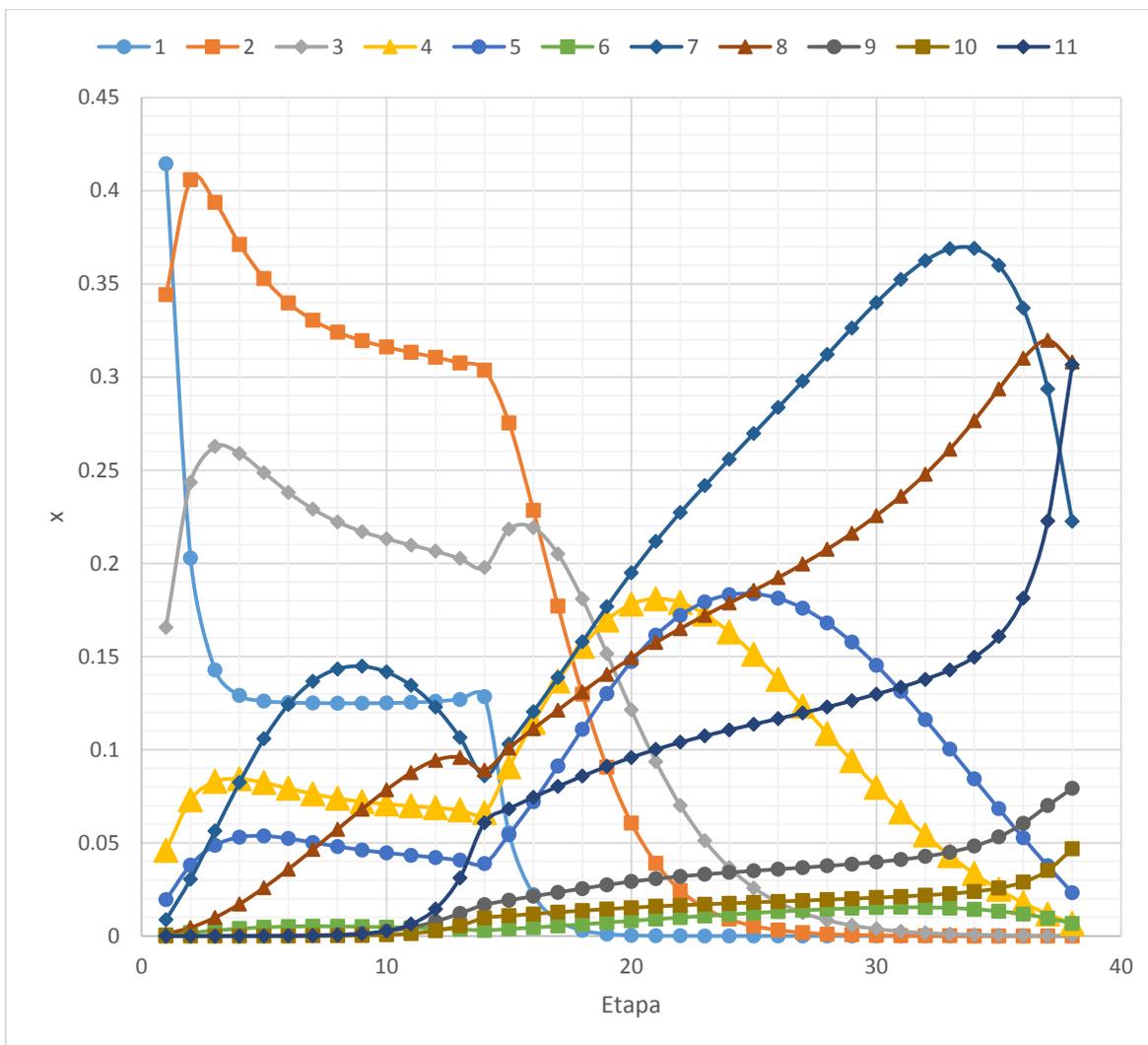


Figura 16 Fracción mol de los componentes en cada plato

Se puede observar en la Figura 16 que la mayor composición de benceno se encuentra en la etapa 21 por lo que ahí sería conveniente colocar la salida lateral.

La Figura 17 presenta el comportamiento de las constantes de equilibrio K a través de todos los platos de la columna diseñada.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

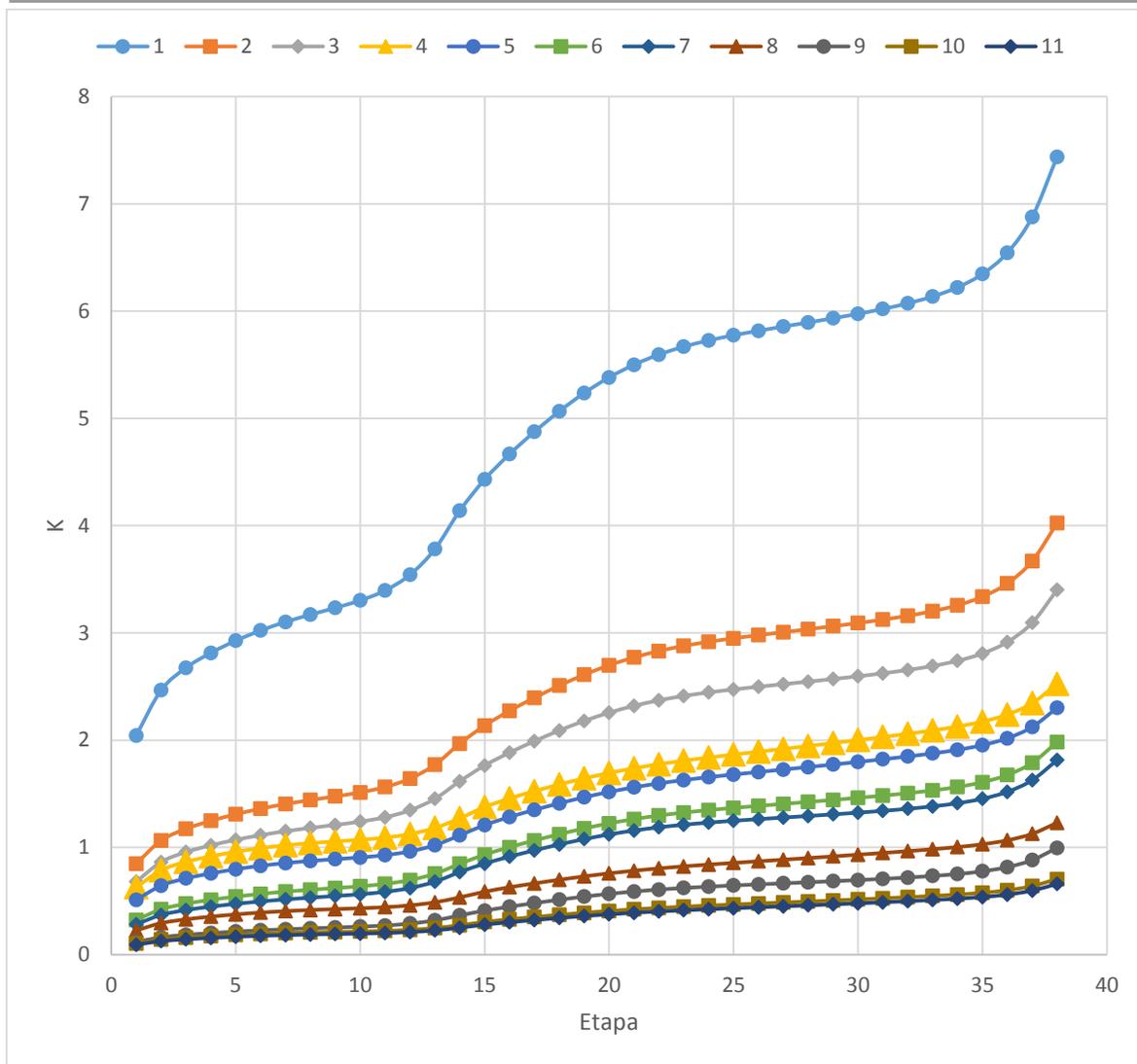


Figura 17 Comportamiento de las constantes de equilibrio K en la columna

En la Figura 17 se observa que el benceno es uno de los componentes que tiene la mayor constante de equilibrio K, esto muestra que la separación del benceno de los demás componentes mediante la destilación es viable.

En la Tabla 13 se muestran los valores de los flujos de vapor  $V_j$  y de líquido  $L_j$  para cada etapa.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 13 Flujos de líquido y vapor en cada etapa

| <b>Etapa</b> | <b>L<sub>j</sub> [Kmol/hr]</b> | <b>V<sub>j</sub> [Kmol/hr]</b> |
|--------------|--------------------------------|--------------------------------|
| 1            | 24.943785                      | 0                              |
| 2            | 24.492954                      | 49.5844806                     |
| 3            | 24.0442873                     | 49.133654                      |
| 4            | 23.6192239                     | 48.6849873                     |
| 5            | 23.2607747                     | 48.2599239                     |
| 6            | 22.9690911                     | 47.9014747                     |
| 7            | 22.722508                      | 47.6097911                     |
| 8            | 22.4889525                     | 47.363208                      |
| 9            | 22.2245827                     | 47.1296525                     |
| 10           | 21.8650956                     | 46.8652827                     |
| 11           | 21.3080522                     | 46.5057956                     |
| 12           | 20.4661192                     | 45.9487522                     |
| 13           | 19.3314653                     | 45.1068192                     |
| 14           | 171.434308                     | 43.9721653                     |
| 15           | 173.129876                     | 96.075008                      |
| 16           | 174.1929                       | 97.7705755                     |
| 17           | 174.982862                     | 98.8336005                     |
| 18           | 175.725681                     | 99.6235618                     |
| 19           | 176.441504                     | 100.366381                     |
| 20           | 177.11751                      | 101.082204                     |
| 21           | 177.727549                     | 101.75821                      |
| 22           | 178.269792                     | 102.368249                     |
| 23           | 178.744654                     | 102.910492                     |
| 24           | 179.144952                     | 103.385354                     |
| 25           | 179.506409                     | 103.785652                     |
| 26           | 179.82605                      | 104.147109                     |
| 27           | 180.132675                     | 104.46675                      |
| 28           | 180.430416                     | 104.773375                     |
| 29           | 180.71357                      | 105.071116                     |
| 30           | 180.980255                     | 105.35427                      |
| 31           | 181.217235                     | 105.620955                     |
| 32           | 181.400278                     | 105.857935                     |
| 33           | 181.485096                     | 106.040978                     |
| 34           | 181.393598                     | 106.125796                     |
| 35           | 180.997935                     | 106.034298                     |
| 36           | 180.115495                     | 105.638635                     |
| 37           | 178.625701                     | 104.756195                     |
| 38           | 75.3593                        | 103.266401                     |

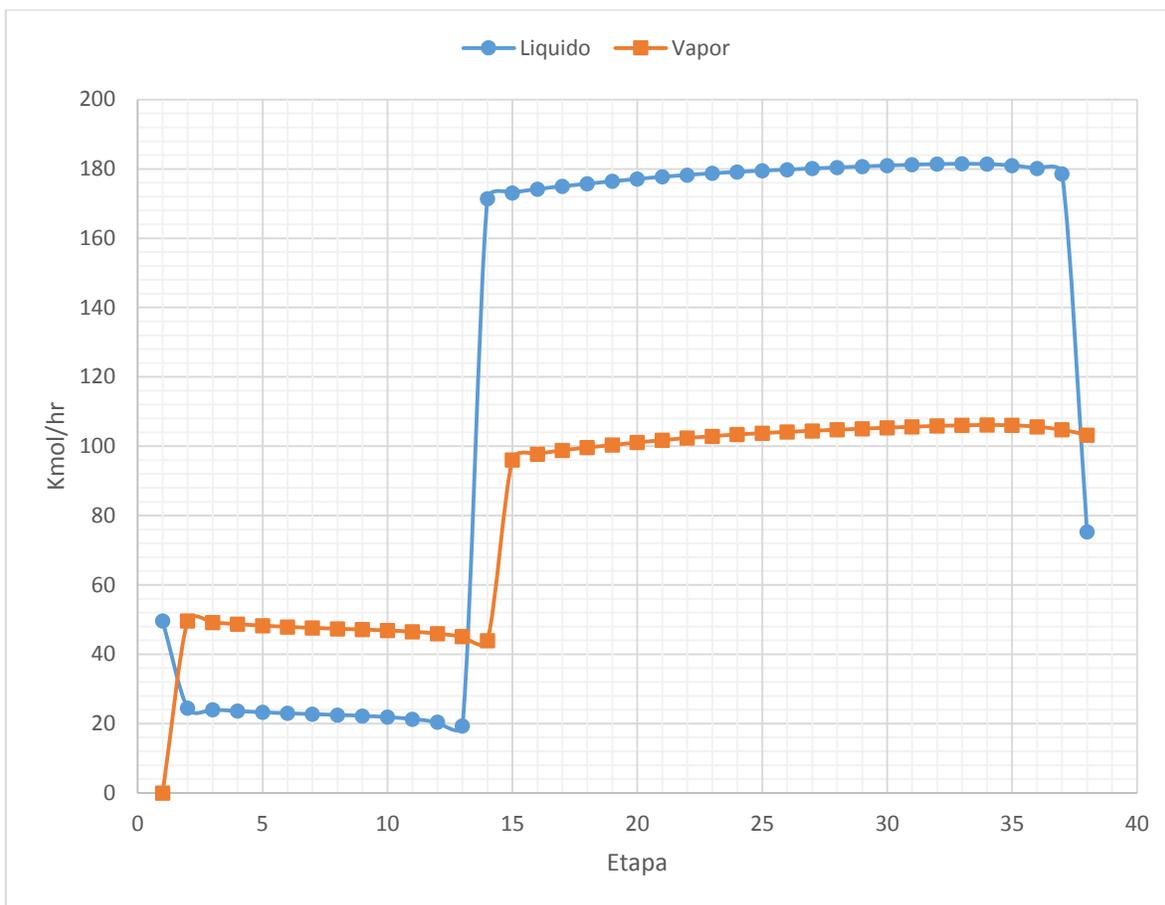


Figura 18 Comportamiento de los flujos de líquido y vapor en la columna

En la Figura 18 se puede notar que hay un gran salto en ambos flujos esto es debido al ingreso de la alimentación.

La Figura 19 muestra la columna de 38 platos ya con todos los flujos completos de vapor y líquido.

La carga térmica de la etapa 1  $Q_1$  (condensador) obtenida es de -1,647,162.993 Btu/hr y la carga térmica del rehervidor  $Q_{38}$  fue de 3,621,937.667 Btu/hr.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

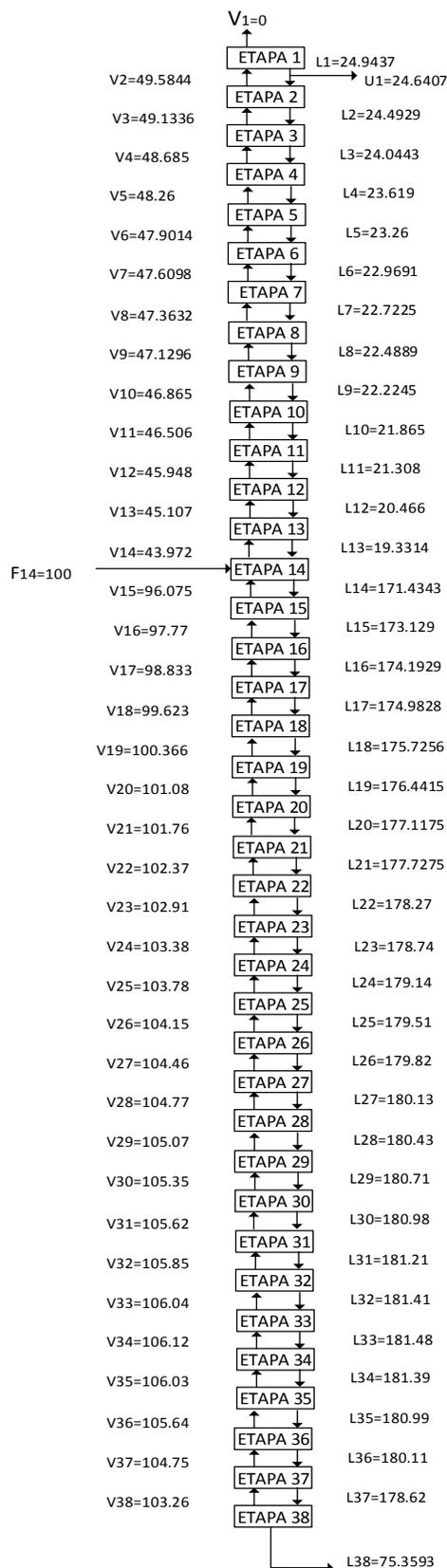


Figura 19 Flujos calculados para la columna de destilación (las unidades de los flujos son Kmol/hr)



### 3.4. SIMULACIÓN DE LA COLUMNA

Para realizar la simulación se utilizó el programa Aspen Plus V8. Lo que se quiere es optimizar gastos de energía obteniendo la cantidad de benceno que se especificó en el balance de materia preliminar.

Al cargar el programa con los datos obtenidos con el método FUG se obtiene en el destilado los flujos mostrados en la Figura 20:

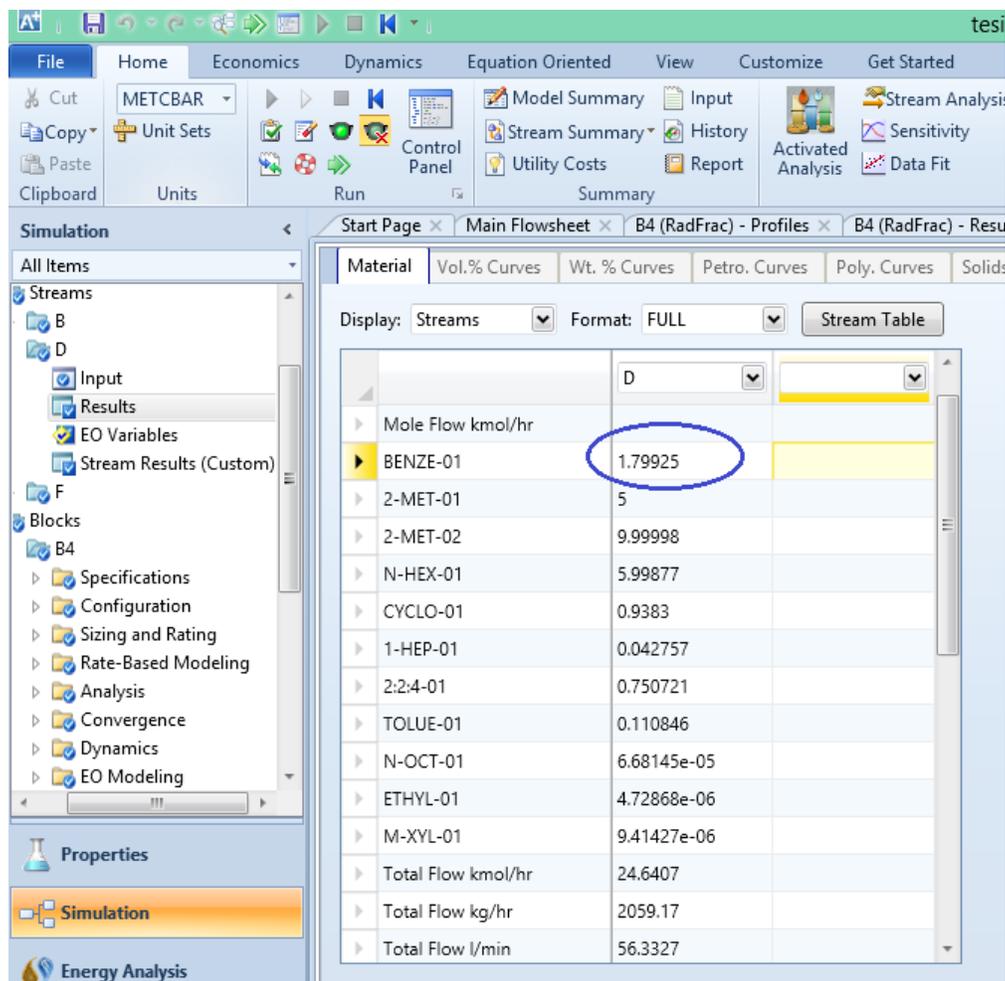


Figura 20 Resultados del destilado Aspen Plus

El valor resaltado es la cantidad de benceno que el programa obtiene en el destilado. Como se planteó en el diseño preliminar se quiere obtener en el destilado el 99% de benceno alimentado que sería de 1.98 Kmol/hr.

Para conseguir ese flujo se introdujo en 2 especificaciones de diseño. La primera es para el destilado donde se indica lo que se quiere obtener 1.98 Kmol/hr de benceno.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

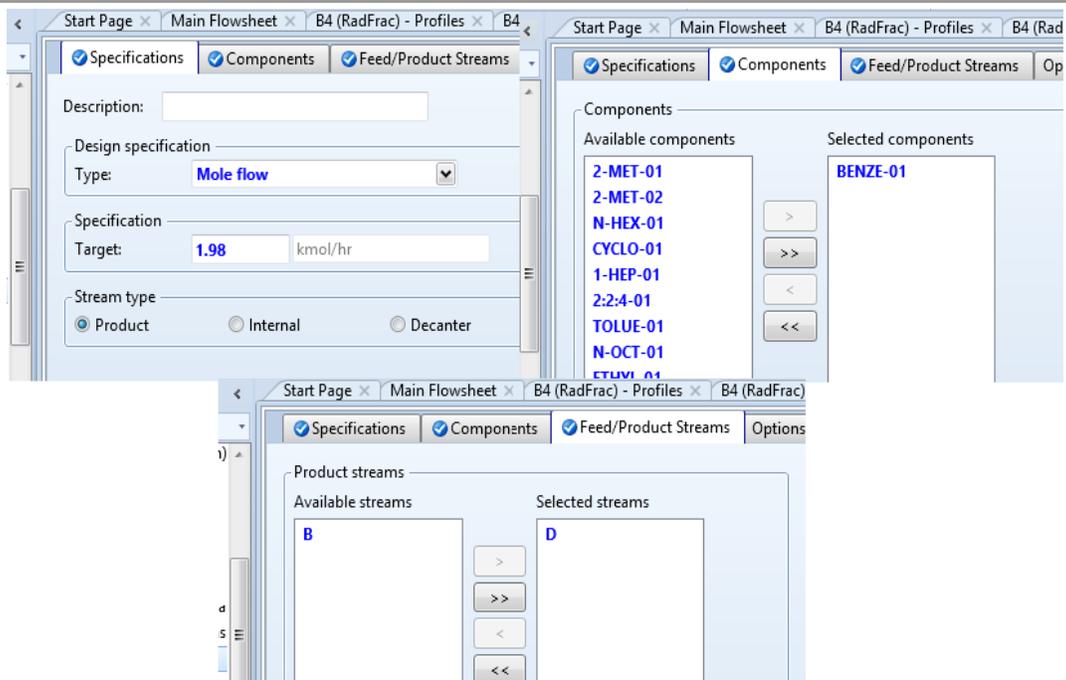


Figura 21 Especificaciones de diseño en el destilado

La segunda es para el domo donde se introduce lo que se quiere obtener 0.02 Kmol/hr de benceno.

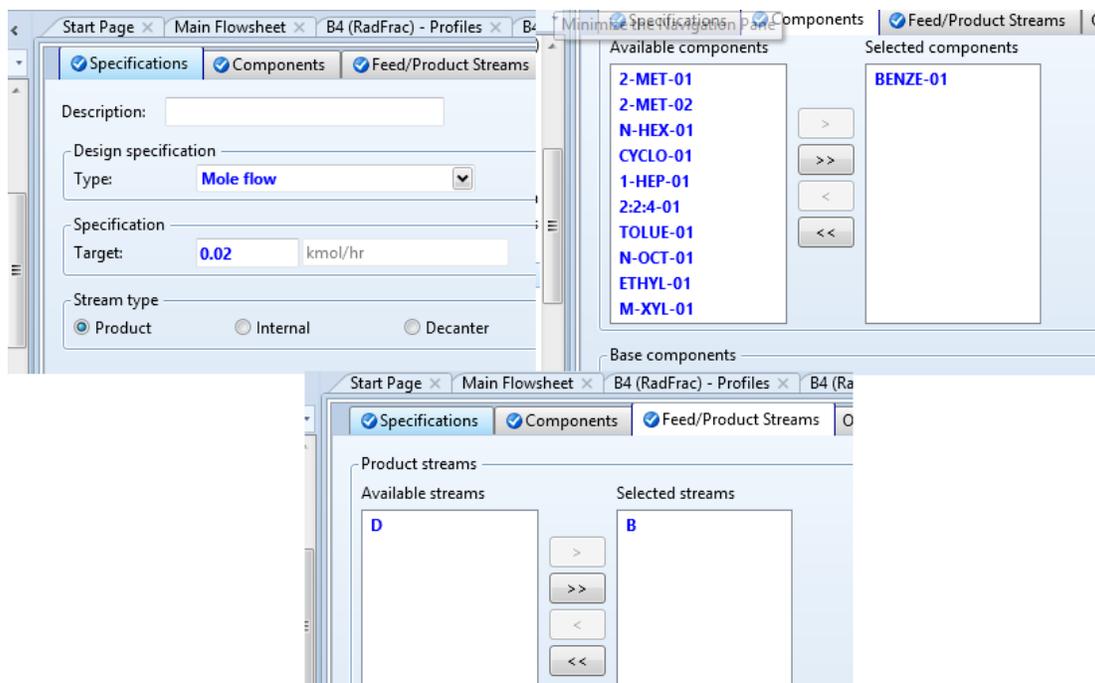


Figura 22 Especificaciones de diseño en el fondo

Lo que se va a variar será la relación de reflujo como se observa en la Figura 23.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

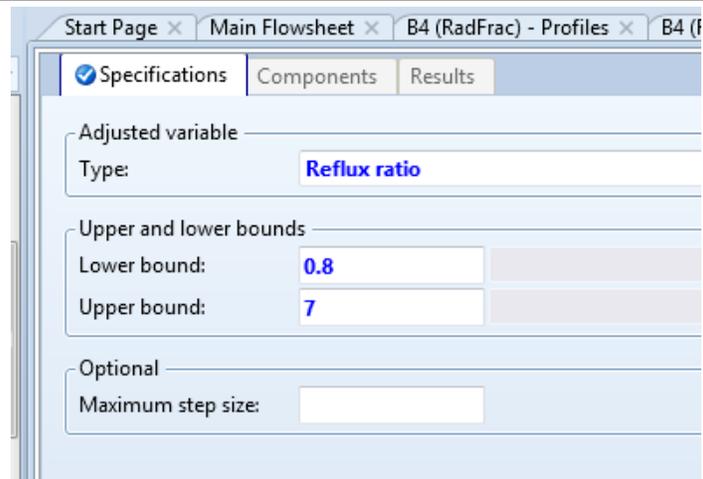


Figura 23 Variación en la relación de reflujo

Al correr el programa da como resultado una relación de reflujo de 1.5108 y se obtiene la cantidad de benceno en el destilado y en el fondo que se especificó.

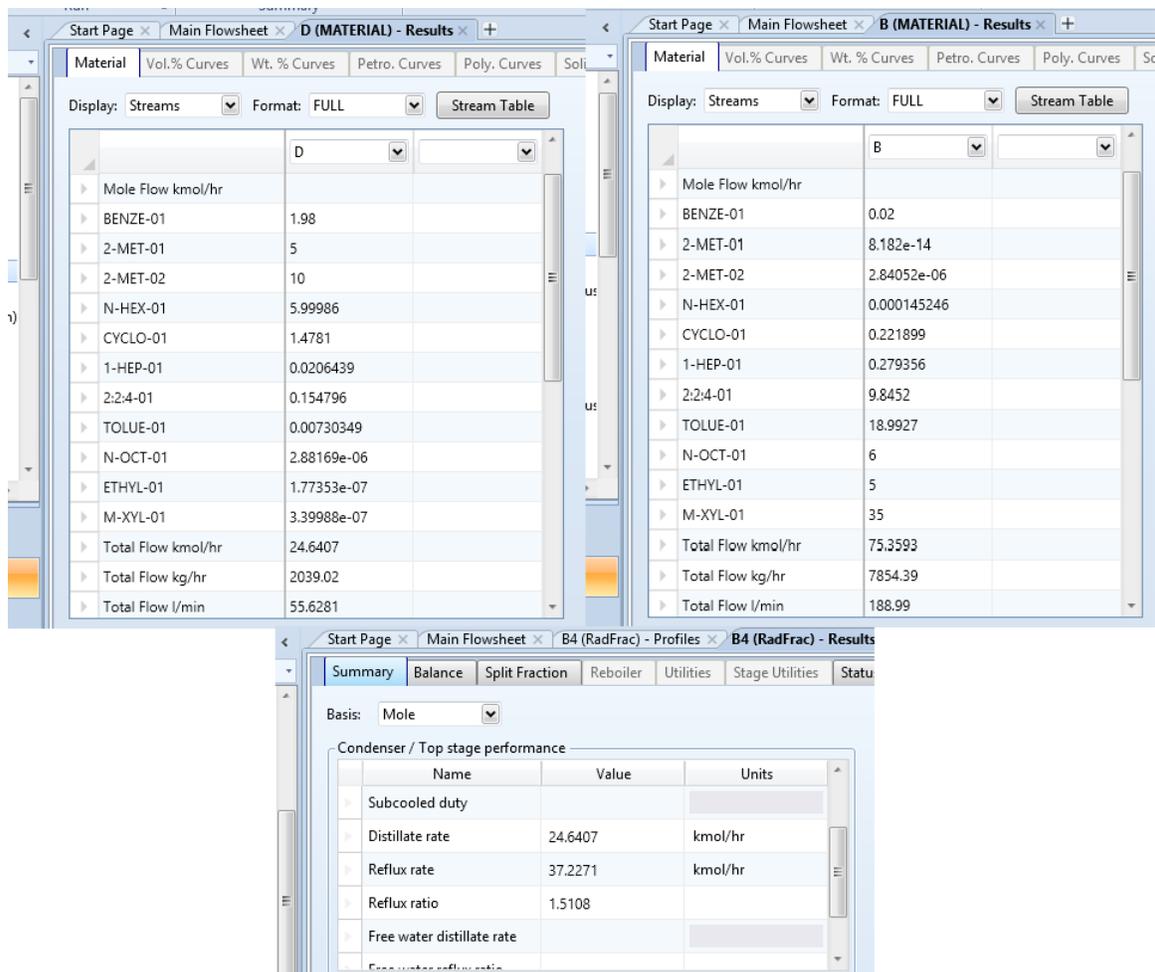


Figura 24 Resultado de la variación del reflujo



Con esas especificaciones de diseño establecidas no importa que cambios se hagan siempre se conseguirá obtener esa cantidad de benceno en el destilado y en el fondo.

Ahora se tienen que optimizar los gastos de energía, esto se logrará cambiando la etapa de alimentación. Para hacer esto el programa realizará un análisis de sensibilidad. Este análisis se realiza declarando que variable vamos a modificar, que para este caso es la etapa de alimentación, y estableciendo la variable a monitorear que es el calor suministrado al rehedidor.

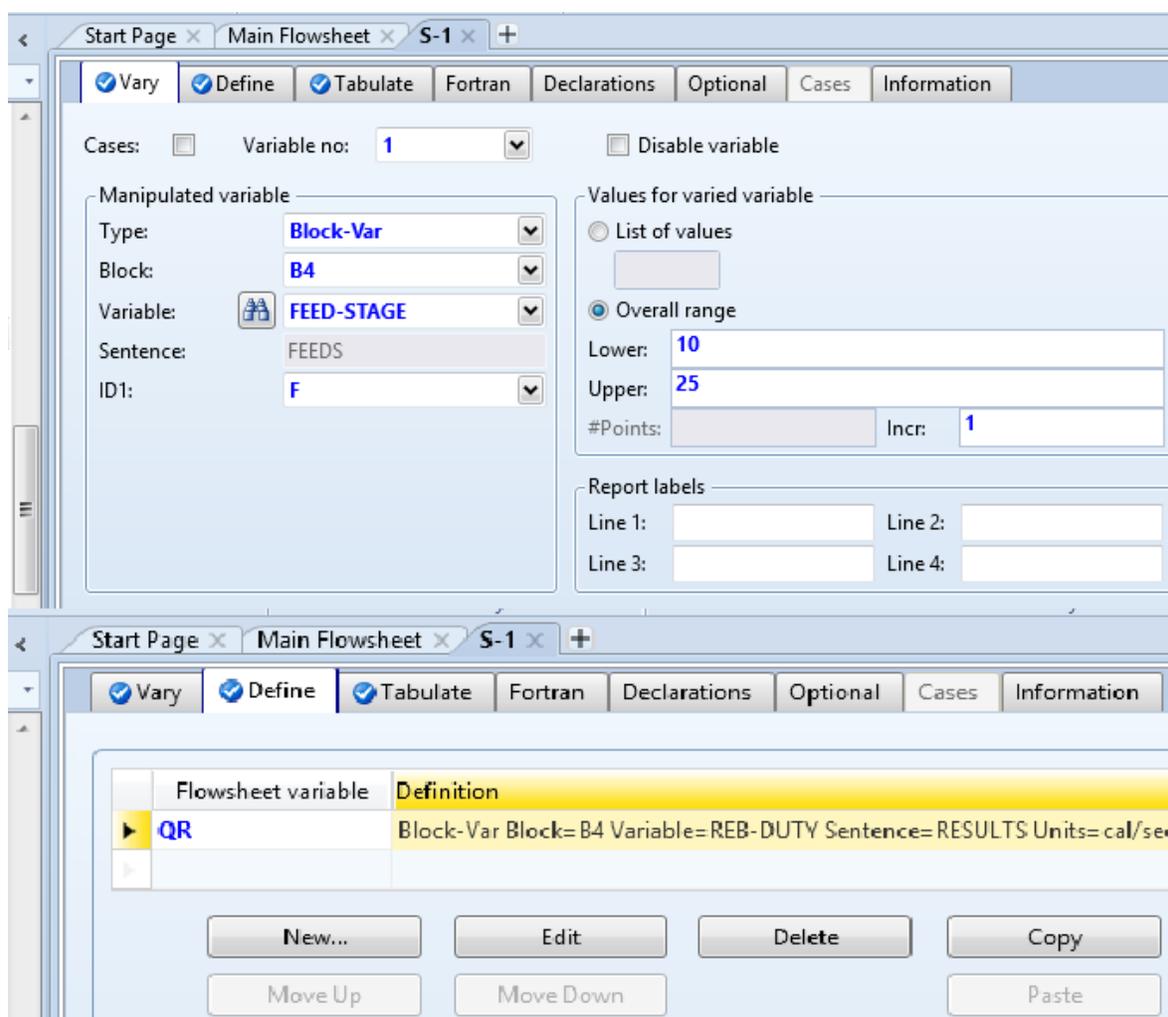


Figura 25 Variable a modificar y variable a monitorear

Al volver a correr el programa da como resultado que la etapa óptima de alimentación es la 13.



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

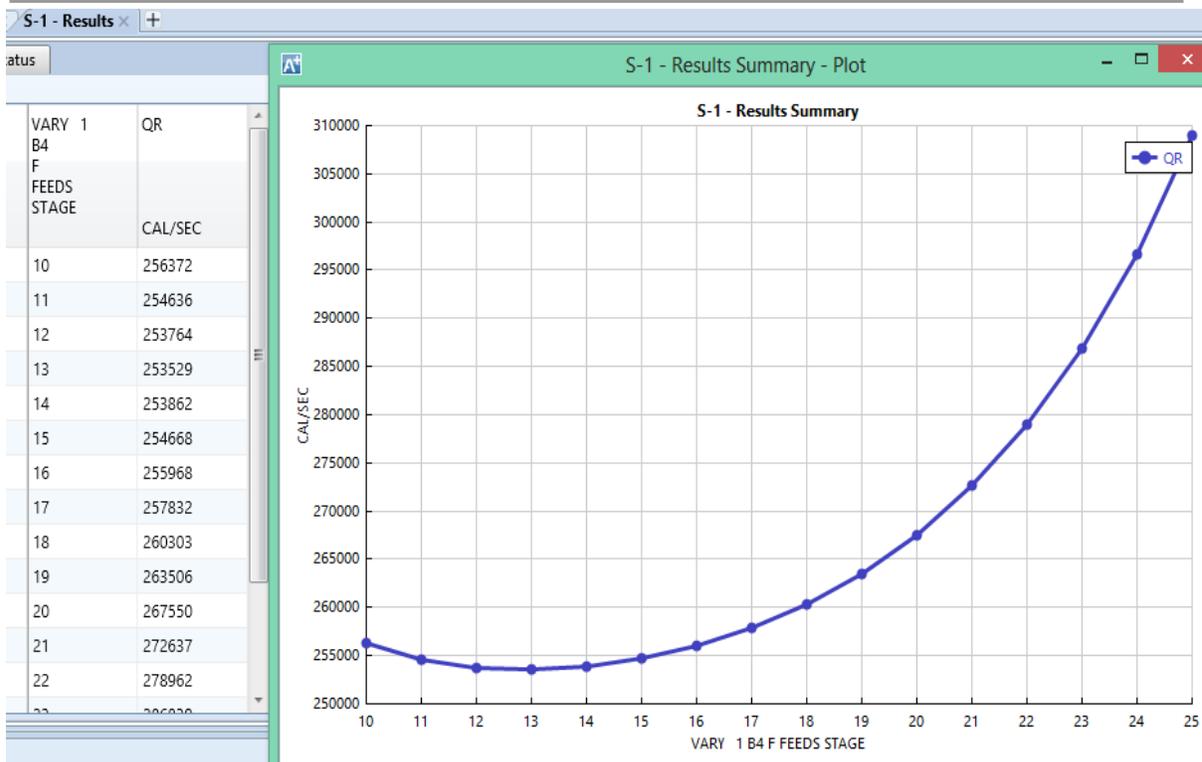


Figura 26 Resultados análisis de sensibilidad.

Lo que más interesa saber es qué etapa tiene el mayor contenido de benceno que sería óptima para colocar una salida lateral. Cambiando la etapa de alimentación de 14 a 13 se obtiene que la mayor composición de benceno se encuentra en la etapa 17.

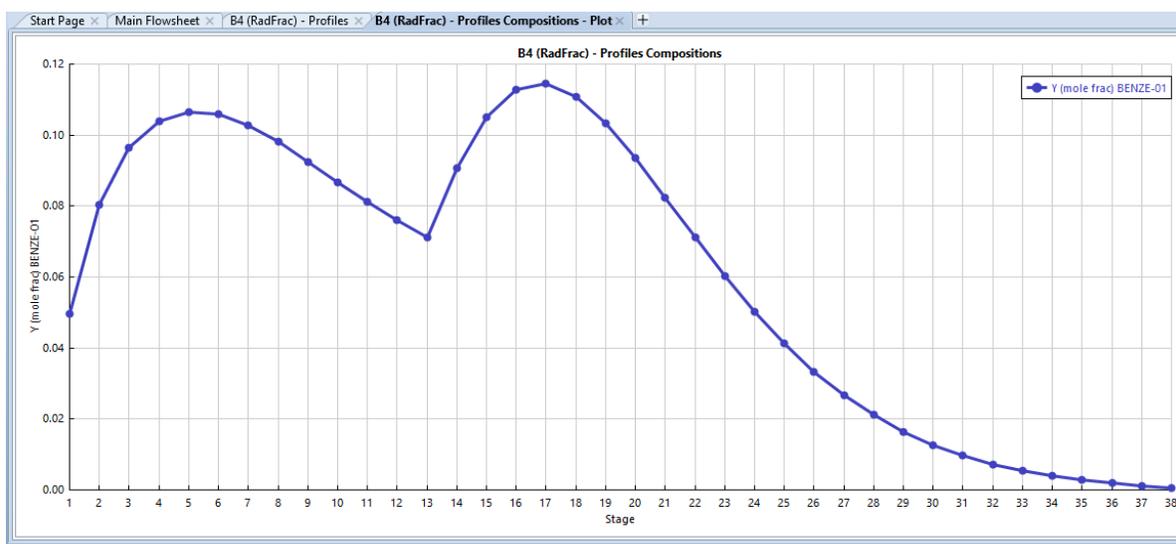


Figura 27 Composición de benceno a lo largo de la columna.



Para finalizar con el simulador se va a dimensionar la columna. Lo único que necesitamos meter es el número de etapas de la siguiente manera:

| Trayed section  |            |                     |
|-----------------|------------|---------------------|
| Starting stage: | 2          | Ending stage: 37    |
| Tray type:      | Bubble Cap | Number of passes: 1 |

| Tray geometry                         |        |       |
|---------------------------------------|--------|-------|
| Tray spacing:                         | 2      | ft    |
| Minimum column diameter:              | 0.3048 | meter |
| Cap slot area to active area ratio:   | 0.12   |       |
| Sieve hole area to active area ratio: | 0.12   |       |

Figura 28 Especificaciones para el dimensionamiento de la columna

Lo que nos da como resultado un diámetro de columna de 0.8998 m.

| Tray sizing results           |          |       |
|-------------------------------|----------|-------|
| Section starting stage:       | 2        |       |
| Section ending stage:         | 37       |       |
| Stage with maximum diameter:  | 31       |       |
| Column diameter:              | 0.899829 | meter |
| Downcomer area / Column area: | 0.1      |       |
| Side downcomer velocity:      | 0.132065 | m/sec |
| Flow path length:             | 0.618227 | meter |
| Side downcomer width:         | 0.140801 | meter |
| Side weir length:             | 0.653826 | meter |
| Center downcomer width:       | 0        | meter |
| Center weir length:           | 0        | meter |
| Off-center downcomer width:   | 0        | meter |
| Off-center short weir length: | 0        | meter |
| Off-center long weir length:  | 0        | meter |
| Tray center to OCDC center:   | 0        | meter |

Figura 29 Dimensionamiento de la columna.



### 3.5 RESULTADOS

Los resultados obtenidos por los 3 métodos se mostraran en la siguiente tabla comparativa.

Tabla 14 Resultados de los 3 métodos

| <b>PARÁMETRO</b>                                 | <b>FUG</b>        | <b>RIGUROSO</b> | <b>SIMULADOR</b> |
|--|-------------------|-----------------|------------------|
| <i># Etapas</i>                                  | 38                | 38              | 38               |
| <i>Flujo de destilado [Kmol/hr]</i>              | 24.6407           | 24.943785       | 24.6407          |
| <i>Flujo en fondo [Kmol/hr]</i>                  | 75.3593           |                 |                  |
| <i>Presión condensador [psia]</i>                | 30                |                 |                  |
| <i>Temperatura condensador [K]</i>               | 322.15            | 351.59625       | 351.2756059      |
| <i>Tipo de condensador</i>                       | Condensador Total |                 |                  |
| <i>Presión rehervidor [psia]</i>                 | 40                |                 | 33.7             |
| <i>Temperatura rehervidor [K]</i>                | 430.9842          | 426.66329       | 426.962287       |
| <i>Relación de reflujo</i>                       | 1.0123            |                 | 1.5081           |
| <i>Etapas de alimentación</i>                    | 14                |                 | 13               |
| <i>Flujo de benceno destilado [Kmol/hr]</i>      | 1.98              | 1.7992          | 1.98             |
| <i>Salida lateral de benceno</i>                 | -----             | 21              | 17               |
| <i>Flujo de calor en el condensador [Btu/hr]</i> | -----             | -1333767.65     | -1647162.99      |
| <i>Flujo de calor en el rehervidor [Btu/hr]</i>  | -----             | 3299148.29      | 3621937.667      |
| <i>Díámetro de la columna [m]</i>                | -----             |                 | 0.9              |

Como se puede observar las diferencias entre un método y otro son muy pequeñas pero el que se adecua a las necesidades es el diseño realizado por el simulador.



## CAPÍTULO 4: CONCLUSIONES

---

Se aplicaron los pasos para realizar el diseño de la columna, teniendo primero que obtener un diseño preliminar mediante un método aproximado (FUG).

La información recopilada por el método aproximado fue la base para poder realizar el cálculo riguroso y la simulación. Datos como el número de etapas, presiones y temperaturas en domo y fondo, así como sus respectivos flujos; fueron los parámetros clave para poder iniciar con los otros dos métodos.

Para la simulación se utilizó el programa “Aspen Plus V8” con el que se pudo realizar un diseño con el que no solo se alcanza el flujo de benceno deseado sino que también se logra minimizar gastos energéticos.

Se examinaron los resultados obtenidos por los tres métodos y se pudo determinar que la variación entre los valores dados no es muy significativa por lo que los tres diseños pueden ser viables.

Sin embargo, las exigencias de la actualidad hacen que sea imperativo cuidar cualquier pérdida tanto económica como energética por mínima que sea por lo que el diseño definitivo de la columna fue el obtenido por el simulador.

Se logró cumplir con los objetivos al conseguir una corriente rica en benceno en el domo y obtener una gasolina que cumpla con las especificaciones ambientales propuestas.

El diseño que mejor satisfago las premisas propuestas fue el siguiente:

- ❖ 38 etapas
- ❖ Etapa de alimentación: etapa 13
- ❖ Salida lateral de benceno: etapa 17
- ❖ Relación de reflujo: 1.5081
- ❖ Presión en el condensador: 30 psia
- ❖ Tipo de condensador: Condensador total
- ❖ Flujo de destilado: 24.6407 Kmol/hr
- ❖ Flujo de reflujo: 37.1612 Kmol/hr
- ❖ Flujo de calor en el condensador: -1,333,767.65 Btu/hr



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN  
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

---

- ❖ Flujo de calor en el ebullidor: 3,299,148.295 Btu/hr
- ❖ Diámetro de la columna: 0.9 m.



ANEXOS

ANEXO A: VALORES DE K PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 15 Valores de Vj, Tj y Kij de la primera iteración

| <i>Etapa</i> | Vj [kmol/h] | Tj [K]     | k ISOPENTANO | k ISOHEXANO | k HEXANO   | k BENCENO  | k CICLOHEXANO | k HEPTENO  | k ISOCTANO | k TOLUENO  | k OCTANO   | k ETILBENCENO | k XILENO   |
|--------------|-------------|------------|--------------|-------------|------------|------------|---------------|------------|------------|------------|------------|---------------|------------|
| 1            | 0           | 322.15     | 0.797857165  | 0.27082092  | 0.20111515 | 0.20822414 | 0.15722718    | 0.08665162 | 0.0707796  | 0.06747407 | 0.02464104 | 0.028082829   | 0.02424327 |
| 2            | 49.58448061 | 325.173172 | 0.872566409  | 0.30015947  | 0.2240368  | 0.23318229 | 0.176027741   | 0.09783659 | 0.07966358 | 0.07689116 | 0.02839509 | 0.032509136   | 0.02812696 |
| 3            | 49.58448061 | 328.196344 | 0.952542836  | 0.33194212  | 0.24898935 | 0.26050844 | 0.196607876   | 0.11017662 | 0.08943417 | 0.08738859 | 0.03262034 | 0.037521709   | 0.03253532 |
| 4            | 49.58448061 | 331.219517 | 1.038028339  | 0.36630567  | 0.27609697 | 0.29036489 | 0.219089299   | 0.12375955 | 0.10015589 | 0.09906293 | 0.03736304 | 0.043183535   | 0.03752613 |
| 5            | 49.58448061 | 334.242689 | 1.129269963  | 0.40339001  | 0.30548732 | 0.32292042 | 0.243598562   | 0.13867726 | 0.11189601 | 0.1120169  | 0.04267264 | 0.049562824   | 0.04316215 |
| 6            | 49.58448061 | 337.265861 | 1.226520243  | 0.44333787  | 0.33729144 | 0.35835039 | 0.270267128   | 0.15502573 | 0.12472456 | 0.12635962 | 0.04860199 | 0.056733338   | 0.04951141 |
| 7            | 49.58448061 | 340.289033 | 1.330037658  | 0.48629474  | 0.37164369 | 0.39683695 | 0.299231445   | 0.17290506 | 0.13871437 | 0.14220689 | 0.05520744 | 0.064774747   | 0.05664757 |
| 8            | 49.58448061 | 343.312205 | 1.440087238  | 0.53240863  | 0.40868156 | 0.43856917 | 0.330633056   | 0.19241956 | 0.15394107 | 0.15968154 | 0.06254897 | 0.073773015   | 0.06465032 |
| 9            | 49.58448061 | 346.335378 | 1.556941352  | 0.58182996  | 0.44854561 | 0.4837433  | 0.364618735   | 0.2136778  | 0.17048315 | 0.17891374 | 0.07069041 | 0.083820819   | 0.07360574 |
| 10           | 49.58448061 | 349.35855  | 1.680880697  | 0.63471131  | 0.49137931 | 0.53256313 | 0.401340665   | 0.23679274 | 0.18842193 | 0.20004142 | 0.07969958 | 0.095018024   | 0.08360682 |
| 11           | 49.58448061 | 352.381722 | 1.812195544  | 0.69120727  | 0.53732897 | 0.58524037 | 0.440956661   | 0.26188178 | 0.20784162 | 0.22321076 | 0.08964853 | 0.107472204   | 0.09475394 |
| 12           | 49.58448061 | 355.404894 | 1.951187274  | 0.75147426  | 0.58654355 | 0.64199517 | 0.48363046    | 0.28906696 | 0.22882943 | 0.24857671 | 0.1006137  | 0.121299248   | 0.10715546 |
| 13           | 49.58448061 | 358.428066 | 2.09817027   | 0.81567032  | 0.63917464 | 0.70305675 | 0.529532074   | 0.31847513 | 0.25147557 | 0.27630364 | 0.11267625 | 0.136624035   | 0.12092838 |
| 14           | 49.58448061 | 361.451239 | 3.243568592  | 1.12557592  | 0.83395312 | 0.5322354  | 0.485972146   | 0.34708387 | 0.35260209 | 0.21188518 | 0.12404731 | 0.099200423   | 0.08810828 |
| 15           | 49.58448061 | 364.474411 | 4.26606383   | 1.43616782  | 1.04673604 | 0.54329755 | 0.53380791    | 0.41320011 | 0.45991698 | 0.22109878 | 0.15098683 | 0.103194519   | 0.09195389 |
| 16           | 49.58448061 | 367.497583 | 4.638114878  | 1.56172591  | 1.14045789 | 0.59102343 | 0.580868589   | 0.45278325 | 0.50233514 | 0.24328714 | 0.16727771 | 0.114698903   | 0.10238692 |
| 17           | 49.58448061 | 370.520755 | 5.041084833  | 1.69620134  | 1.2408826  | 0.64191202 | 0.631088831   | 0.49533368 | 0.54778276 | 0.2672134  | 0.18495465 | 0.127225611   | 0.11376823 |
| 18           | 49.58448061 | 373.543927 | 5.47816707   | 1.84012362  | 1.34838356 | 0.69609765 | 0.684608221   | 0.54100887 | 0.59640824 | 0.29297202 | 0.20410147 | 0.140840678   | 0.1261611  |
| 19           | 49.58448061 | 376.5671   | 5.953085125  | 1.99406054  | 1.46335465 | 0.75371631 | 0.741568622   | 0.58997104 | 0.64836357 | 0.32065984 | 0.22480462 | 0.155612552   | 0.13963128 |
| 20           | 49.58448061 | 379.590272 | 6.470213575  | 2.15862396  | 1.5862128  | 0.81490547 | 0.802114097   | 0.64238733 | 0.70380438 | 0.35037608 | 0.24715315 | 0.171612078   | 0.15424698 |
| 21           | 49.58448061 | 382.613444 | 7.034731113  | 2.33447692  | 1.71740108 | 0.87980399 | 0.866390847   | 0.6984299  | 0.76289002 | 0.38222221 | 0.27123867 | 0.188912486   | 0.17007889 |
| 22           | 49.58448061 | 385.636616 | 7.65281582   | 2.52234208  | 1.85739242 | 0.94855196 | 0.934547147   | 0.75827616 | 0.82578376 | 0.41630188 | 0.29715526 | 0.207589373   | 0.18720012 |
| 23           | 49.58448061 | 388.659788 | 8.33189641   | 2.72301194  | 2.0066941  | 1.02129055 | 1.006733309   | 0.822109   | 0.89265293 | 0.45272089 | 0.32499947 | 0.227720685   | 0.20568625 |
| 24           | 49.58448061 | 391.682961 | 9.0809785    | 2.9373611   | 2.16585304 | 1.09816192 | 1.083101647   | 0.89011712 | 0.96366921 | 0.49158707 | 0.35487023 | 0.249386693   | 0.22561527 |
| 25           | 49.58448061 | 394.706133 | 9.911072713  | 3.16636109  | 2.33546225 | 1.17930905 | 1.163806474   | 0.96249541 | 1.03900894 | 0.53301022 | 0.38686881 | 0.272669976   | 0.24706759 |
| 26           | 49.58448061 | 397.729305 | 10.83576277  | 3.41109823  | 2.5161685  | 1.26487562 | 1.249004113   | 1.03944543 | 1.11885355 | 0.57710203 | 0.42109875 | 0.297655395   | 0.27012605 |
| 27           | 49.58448061 | 400.752477 | 11.87196884  | 3.67279527  | 2.70868148 | 1.35500589 | 1.338852934   | 1.12117595 | 1.20339005 | 0.62397595 | 0.45766583 | 0.324430073   | 0.29487583 |
| 28           | 49.58448061 | 403.775649 | 13.04098722  | 3.95283768  | 2.91378484 | 1.44984459 | 1.433513429   | 1.20790375 | 1.29281164 | 0.67374719 | 0.49667799 | 0.353083375   | 0.32140452 |
| 29           | 49.58448061 | 406.798822 | 14.36992818  | 4.25280572  | 3.13234945 | 1.54953679 | 1.533148312   | 1.29985434 | 1.38731846 | 0.72653255 | 0.53824528 | 0.38370689    | 0.34980208 |
| 30           | 49.58448061 | 409.821994 | 15.89373736  | 4.5745137   | 3.36534937 | 1.65422784 | 1.63792267    | 1.39726306 | 1.48711845 | 0.7824504  | 0.58247982 | 0.416394414   | 0.38016079 |



## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

|    |             |            |             |            |            |            |             |            |            |            |            |             |            |
|----|-------------|------------|-------------|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|------------|------------|-------------|------------|
| 31 | 49.58448061 | 412.845166 | 17.65809082 | 4.92005836 | 3.61388112 | 1.76406322 | 1.748004154 | 1.50037625 | 1.59242839 | 0.84162053 | 0.62949575 | 0.451241944 | 0.41257532 |
| 32 | 49.58448061 | 415.868338 | 19.72362748 | 5.29187884 | 3.87918713 | 1.87918853 | 1.863563223 | 1.60945268 | 1.70347512 | 0.90416412 | 0.67940917 | 0.48834767  | 0.44714266 |
| 33 | 49.58448061 | 418.89151  | 22.1722814  | 5.6928314  | 4.16268427 | 1.99974938 | 1.984773458 | 1.72476526 | 1.82049696 | 0.97020362 | 0.73233812 | 0.527811979 | 0.48396217 |
| 34 | 49.58448061 | 421.914683 | 25.11700716 | 6.12628347 | 4.46599875 | 2.12589142 | 2.111811938 | 1.84660305 | 1.94374538 | 1.03986268 | 0.78840258 | 0.569737469 | 0.52313559 |
| 35 | 49.58448061 | 424.937855 | 28.71716974 | 6.59623268 | 4.79100925 | 2.25776025 | 2.244859703 | 1.97527363 | 2.07348693 | 1.11326606 | 0.84772437 | 0.614228971 | 0.56476704 |
| 36 | 49.58448061 | 427.961027 | 33.20375379 | 7.10745915 | 5.13990021 | 2.39550151 | 2.384102303 | 2.11110596 | 2.21000552 | 1.19053956 | 0.91042722 | 0.661393583 | 0.60896309 |
| 37 | 49.58448061 | 430.984199 | 38.92235754 | 7.66572203 | 5.51522856 | 2.5392609  | 2.529730469 | 2.2544537  | 2.35360502 | 1.27180992 | 0.97663673 | 0.711340724 | 0.65583278 |
| 38 | 49.58448061 | 440        | 70.52168678 | 9.68699878 | 6.82412493 | 3.00516015 | 3.00391909  | 2.73051519 | 2.82725605 | 1.53917263 | 1.19617778 | 0.877932113 | 0.81259868 |



## ANEXO B: DATOS DE ISOPENTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 16 Valores A, B, C y D para el isopentano

### ISOPENTANO

| Etapa | A        | B         | C        | D  | X           |
|-------|----------|-----------|----------|----|-------------|
| 1     | 0        | -24.94378 | 43.26575 | 0  | 1.21118E+15 |
| 2     | 24.94378 | -68.20953 | 47.23134 | 0  | 6.98273E+14 |
| 3     | 24.94378 | -72.17512 | 51.4701  | 0  | 3.68771E+14 |
| 4     | 24.94378 | -76.41388 | 55.99426 | 0  | 1.78716E+14 |
| 5     | 24.94378 | -80.93805 | 60.81637 | 0  | 7.96128E+13 |
| 6     | 24.94378 | -85.76015 | 65.94923 | 0  | 3.26531E+13 |
| 7     | 24.94378 | -90.89301 | 71.40598 | 0  | 1.23503E+13 |
| 8     | 24.94378 | -96.34976 | 77.20013 | 0  | 4.31425E+12 |
| 9     | 24.94378 | -102.1439 | 83.3456  | 0  | 1.39396E+12 |
| 10    | 24.94378 | -108.2894 | 89.85677 | 0  | 4.17185E+11 |
| 11    | 24.94378 | -114.8006 | 96.74861 | 0  | 1.15808E+11 |
| 12    | 24.94378 | -121.6924 | 104.0367 | 0  | 29857810348 |
| 13    | 24.94378 | -128.9805 | 160.8307 | 0  | 7158692962  |
| 14    | 24.94378 | -285.7744 | 211.5306 | -5 | 1110266303  |
| 15    | 124.9438 | -336.4743 | 229.9785 | 0  | 655795880.6 |
| 16    | 124.9438 | -354.9223 | 249.9596 | 0  | 356283785.2 |
| 17    | 124.9438 | -374.9034 | 271.6321 | 0  | 178090570.9 |
| 18    | 124.9438 | -396.5758 | 295.1806 | 0  | 81917092.18 |
| 19    | 124.9438 | -420.1244 | 320.8222 | 0  | 34673789.6  |
| 20    | 124.9438 | -445.766  | 348.8135 | 0  | 13503662.27 |
| 21    | 124.9438 | -473.7573 | 379.4609 | 0  | 4836964.943 |
| 22    | 124.9438 | -504.4047 | 413.1328 | 0  | 1592650.759 |
| 23    | 124.9438 | -538.0765 | 450.2756 | 0  | 481665.528  |
| 24    | 124.9438 | -575.2194 | 491.4354 | 0  | 133653.9482 |
| 25    | 124.9438 | -616.3792 | 537.2857 | 0  | 33980.51877 |
| 26    | 124.9438 | -662.2294 | 588.6654 | 0  | 7902.043038 |
| 27    | 124.9438 | -713.6092 | 646.6306 | 0  | 1677.202563 |
| 28    | 124.9438 | -771.5744 | 712.5254 | 0  | 324.0738007 |
| 29    | 124.9438 | -837.4692 | 788.0827 | 0  | 56.82745404 |
| 30    | 124.9438 | -913.0265 | 875.5673 | 0  | 9.009507304 |
| 31    | 124.9438 | -1000.511 | 977.9858 | 0  | 1.28566011  |
| 32    | 124.9438 | -1102.93  | 1099.401 | 0  | 0.164251085 |
| 33    | 124.9438 | -1224.345 | 1245.414 | 0  | 0.018666663 |
| 34    | 124.9438 | -1370.358 | 1423.926 | 0  | 0.001872696 |
| 35    | 124.9438 | -1548.87  | 1646.391 | 0  | 0.00016432  |
| 36    | 124.9438 | -1771.335 | 1929.945 | 0  | 1.24689E-05 |
| 37    | 124.9438 | -2054.889 | 3496.781 | 0  | 8.06129E-07 |
| 38    | 124.9438 | -3572.141 | 0        | 0  | 2.81962E-08 |





## ANEXO C: DATOS DE ISOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 18 Valores A, B, C y D para el isohehexano

### ISOHEXANO

| <i>Etapa</i> | A          | B          | C          | D   | X          |
|--------------|------------|------------|------------|-----|------------|
| 1            | 0          | -24.943781 | 14.8832516 | 0   | 1181.0782  |
| 2            | 24.9437806 | -39.827032 | 16.4591775 | 0   | 1979.4435  |
| 3            | 24.9437806 | -41.402958 | 18.1630766 | 0   | 2999.83425 |
| 4            | 24.9437806 | -43.106857 | 20.0018839 | 0   | 4119.743   |
| 5            | 24.9437806 | -44.945665 | 21.9826779 | 0   | 5137.61434 |
| 6            | 24.9437806 | -46.926459 | 24.1126719 | 0   | 5829.65939 |
| 7            | 24.9437806 | -49.056453 | 26.3992056 | 0   | 6030.59443 |
| 8            | 24.9437806 | -51.342986 | 28.8497365 | 0   | 5698.11936 |
| 9            | 24.9437806 | -53.793517 | 31.4718305 | 0   | 4926.65295 |
| 10           | 24.9437806 | -56.415611 | 34.2731534 | 0   | 3904.74111 |
| 11           | 24.9437806 | -59.216934 | 37.2614609 | 0   | 2841.84546 |
| 12           | 24.9437806 | -62.205242 | 40.4445894 | 0   | 1902.40447 |
| 13           | 24.9437806 | -65.38837  | 55.8110974 | 0   | 1173.28821 |
| 14           | 24.9437806 | -180.75488 | 71.2116352 | -10 | 524.380364 |
| 15           | 124.943781 | -196.15542 | 77.4373683 | 0   | 919.906768 |
| 16           | 124.943781 | -202.38115 | 84.1052624 | 0   | 1484.12365 |
| 17           | 124.943781 | -209.04904 | 91.2415741 | 0   | 2204.6423  |
| 18           | 124.943781 | -216.18535 | 98.874456  | 0   | 3018.86883 |
| 19           | 124.943781 | -223.81824 | 107.034248 | 0   | 3814.72526 |
| 20           | 124.943781 | -231.97803 | 115.753826 | 0   | 4452.9317  |
| 21           | 124.943781 | -240.69761 | 125.069022 | 0   | 4806.37352 |
| 22           | 124.943781 | -250.0128  | 135.019133 | 0   | 4801.48057 |
| 23           | 124.943781 | -259.96291 | 145.647524 | 0   | 4443.11205 |
| 24           | 124.943781 | -270.5913  | 157.00237  | 0   | 3811.45659 |
| 25           | 124.943781 | -281.94615 | 169.137534 | 0   | 3033.12489 |
| 26           | 124.943781 | -294.08131 | 182.113646 | 0   | 2240.54402 |
| 27           | 124.943781 | -307.05743 | 195.999403 | 0   | 1537.12831 |
| 28           | 124.943781 | -320.94318 | 210.873163 | 0   | 979.822485 |
| 29           | 124.943781 | -335.81694 | 226.824886 | 0   | 580.504052 |
| 30           | 124.943781 | -351.76867 | 243.958539 | 0   | 319.71964  |
| 31           | 124.943781 | -368.90232 | 262.395064 | 0   | 163.703967 |
| 32           | 124.943781 | -387.33884 | 282.276088 | 0   | 77.9122606 |
| 33           | 124.943781 | -407.21987 | 303.768584 | 0   | 34.4508543 |
| 34           | 124.943781 | -428.71236 | 327.070772 | 0   | 14.1371433 |
| 35           | 124.943781 | -452.01455 | 352.419671 | 0   | 5.36993299 |
| 36           | 124.943781 | -477.36345 | 380.100845 | 0   | 1.87543371 |
| 37           | 124.943781 | -505.04463 | 480.324803 | 0   | 0.59016911 |
| 38           | 124.943781 | -555.6841  | 0          | 0   | 0.13269762 |





## ANEXO D: DATOS DE HEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 20 Valores A, B, C y D para el hexano

### HEXANO

| Etapa | A          | B          | C          | D  | X          |
|-------|------------|------------|------------|----|------------|
| 1     | 0          | -24.943781 | 11.1087481 | 0  | 0.01967145 |
| 2     | 24.9437806 | -36.052529 | 12.3460077 | 0  | 0.04417062 |
| 3     | 24.9437806 | -37.289788 | 13.690125  | 0  | 0.08924199 |
| 4     | 24.9437806 | -38.633906 | 15.1474299 | 0  | 0.16260134 |
| 5     | 24.9437806 | -40.091211 | 16.724421  | 0  | 0.26776107 |
| 6     | 24.9437806 | -41.668202 | 18.4277593 | 0  | 0.39935453 |
| 7     | 24.9437806 | -43.37154  | 20.2642629 | 0  | 0.54056555 |
| 8     | 24.9437806 | -45.208044 | 22.240901  | 0  | 0.66539546 |
| 9     | 24.9437806 | -47.184682 | 24.3647881 | 0  | 0.74625926 |
| 10    | 24.9437806 | -49.308569 | 26.6431777 | 0  | 0.76399299 |
| 11    | 24.9437806 | -51.586958 | 29.0834574 | 0  | 0.71526279 |
| 12    | 24.9437806 | -54.027238 | 31.6931424 | 0  | 0.61345382 |
| 13    | 24.9437806 | -56.636923 | 41.3511321 | 0  | 0.48281288 |
| 14    | 24.9437806 | -166.29491 | 51.9018629 | -6 | 0.29124181 |
| 15    | 124.943781 | -176.84564 | 56.5490122 | 0  | 0.58550602 |
| 16    | 124.943781 | -181.49279 | 61.5285192 | 0  | 1.18755983 |
| 17    | 124.943781 | -186.4723  | 66.8588986 | 0  | 2.31401986 |
| 18    | 124.943781 | -191.80268 | 72.5596804 | 0  | 4.2346254  |
| 19    | 124.943781 | -197.50346 | 78.6515378 | 0  | 7.20910158 |
| 20    | 124.943781 | -203.59532 | 85.1564403 | 0  | 11.3759048 |
| 21    | 124.943781 | -210.10022 | 92.0978385 | 0  | 16.6205697 |
| 22    | 124.943781 | -217.04162 | 99.5008845 | 0  | 22.4830121 |
| 23    | 124.943781 | -224.44467 | 107.392698 | 0  | 28.1717348 |
| 24    | 124.943781 | -232.33648 | 115.802683 | 0  | 32.719944  |
| 25    | 124.943781 | -240.74646 | 124.762908 | 0  | 35.2509407 |
| 26    | 124.943781 | -249.70669 | 134.308564 | 0  | 35.2539537 |
| 27    | 124.943781 | -259.25234 | 144.478508 | 0  | 32.7511673 |
| 28    | 124.943781 | -269.42229 | 155.315921 | 0  | 28.2814013 |
| 29    | 124.943781 | -280.2597  | 166.8691   | 0  | 22.712322  |
| 30    | 124.943781 | -291.81288 | 179.192418 | 0  | 16.9699685 |
| 31    | 124.943781 | -304.1362  | 192.347479 | 0  | 11.7990038 |
| 32    | 124.943781 | -317.29126 | 206.404537 | 0  | 7.63312389 |
| 33    | 124.943781 | -331.34832 | 221.444229 | 0  | 4.59152386 |
| 34    | 124.943781 | -346.38801 | 237.559705 | 0  | 2.56354547 |
| 35    | 124.943781 | -362.50349 | 254.859282 | 0  | 1.32303188 |
| 36    | 124.943781 | -379.80306 | 273.469744 | 0  | 0.62506887 |
| 37    | 124.943781 | -398.41352 | 338.37069  | 0  | 0.26364331 |
| 38    | 124.943781 | -413.72999 | 0          | 0  | 0.07961857 |





## ANEXO E: DATOS DE BENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 22 Valores A, B, C y D para benceno

### BENCENO

| Etapa | A          | B           | C          | D  | X           |
|-------|------------|-------------|------------|----|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 11.5622225 | 0  | 1.84511E+15 |
| 2     | 24.9437806 | -36.5060031 | 12.9171757 | 0  | 3.58402E+14 |
| 3     | 24.9437806 | -37.8609563 | 14.3975924 | 0  | 6.26364E+13 |
| 4     | 24.9437806 | -39.341373  | 16.0118411 | 0  | 9.87122E+12 |
| 5     | 24.9437806 | -40.9556217 | 17.7686181 | 0  | 1.40589E+12 |
| 6     | 24.9437806 | -42.7123987 | 19.6769542 | 0  | 1.81339E+11 |
| 7     | 24.9437806 | -44.6207348 | 21.7462243 | 0  | 21226499564 |
| 8     | 24.9437806 | -46.6900049 | 23.9861602 | 0  | 2259316690  |
| 9     | 24.9437806 | -48.9299408 | 26.4068662 | 0  | 219091045.3 |
| 10    | 24.9437806 | -51.3506468 | 29.0188399 | 0  | 19392449.65 |
| 11    | 24.9437806 | -53.9626205 | 31.832997  | 0  | 1569598.645 |
| 12    | 24.9437806 | -56.7767777 | 34.8607039 | 0  | 116374.1186 |
| 13    | 24.9437806 | -59.8044845 | 26.390616  | 0  | 7917.310528 |
| 14    | 24.9437806 | -151.334397 | 26.9391267 | -2 | 495.0806256 |
| 15    | 124.943781 | -151.882907 | 29.3055898 | 0  | 142.7558082 |
| 16    | 124.943781 | -154.24937  | 31.828874  | 0  | 37.95437812 |
| 17    | 124.943781 | -156.772655 | 34.5156404 | 0  | 9.318357396 |
| 18    | 124.943781 | -159.459421 | 37.3726316 | 0  | 2.115761069 |
| 19    | 124.943781 | -162.316412 | 40.4066644 | 0  | 0.444903588 |
| 20    | 124.943781 | -165.350445 | 43.6246239 | 0  | 0.086764476 |
| 21    | 124.943781 | -168.568405 | 47.0334561 | 0  | 0.015713846 |
| 22    | 124.943781 | -171.977237 | 50.6401616 | 0  | 0.002646421 |
| 23    | 124.943781 | -175.583942 | 54.4517886 | 0  | 0.000414979 |
| 24    | 124.943781 | -179.395569 | 58.4754267 | 0  | 6.06632E-05 |
| 25    | 124.943781 | -183.419207 | 62.7182005 | 0  | 8.27714E-06 |
| 26    | 124.943781 | -187.661981 | 67.1872632 | 0  | 1.05536E-06 |
| 27    | 124.943781 | -192.131044 | 71.8897908 | 0  | 1.25888E-07 |
| 28    | 124.943781 | -196.833571 | 76.8329772 | 0  | 1.40642E-08 |
| 29    | 124.943781 | -201.776758 | 82.0240283 | 0  | 1.47318E-09 |
| 30    | 124.943781 | -206.967809 | 87.4701586 | 0  | 1.44833E-10 |
| 31    | 124.943781 | -212.413939 | 93.1785871 | 0  | 1.33779E-11 |
| 32    | 124.943781 | -218.122368 | 99.1565345 | 0  | 1.16211E-12 |
| 33    | 124.943781 | -224.100315 | 105.411222 | 0  | 9.50306E-14 |
| 34    | 124.943781 | -230.355002 | 111.949869 | 0  | 7.32213E-15 |
| 35    | 124.943781 | -236.89365  | 118.779698 | 0  | 5.32056E-16 |
| 36    | 124.943781 | -243.723479 | 125.907933 | 0  | 3.64877E-17 |
| 37    | 124.943781 | -250.851713 | 149.009305 | 0  | 2.35932E-18 |
| 38    | 124.943781 | -224.368605 | 0          | 0  | 1.25463E-19 |





## ANEXO F: DATOS DE CICLOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 24 Valores A, B, C y D para el ciclohexano

### CICLOHEXANO

| Etapa | A          | B           | C          | D    | X           |
|-------|------------|-------------|------------|------|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 8.72824411 | 0    | 1.56834E+15 |
| 2     | 24.9437806 | -33.6720247 | 9.74869943 | 0    | 3.04642E+14 |
| 3     | 24.9437806 | -34.69248   | 10.8634291 | 0    | 5.32409E+13 |
| 4     | 24.9437806 | -35.8072097 | 12.0787082 | 0    | 8.39054E+12 |
| 5     | 24.9437806 | -37.0224888 | 13.4010552 | 0    | 1.19501E+12 |
| 6     | 24.9437806 | -38.3448358 | 14.8372358 | 0    | 1.54138E+11 |
| 7     | 24.9437806 | -39.7810164 | 16.3942684 | 0    | 18042524629 |
| 8     | 24.9437806 | -41.338049  | 18.0794306 | 0    | 1920419186  |
| 9     | 24.9437806 | -43.0232112 | 19.9002684 | 0    | 186227388.5 |
| 10    | 24.9437806 | -44.844049  | 21.864607  | 0    | 16483582.2  |
| 11    | 24.9437806 | -46.8083876 | 23.9805651 | 0    | 1334158.848 |
| 12    | 24.9437806 | -48.9243458 | 26.2565729 | 0    | 98918.0008  |
| 13    | 24.9437806 | -51.2003535 | 24.0966765 | 0    | 6729.713948 |
| 14    | 24.9437806 | -149.040457 | 26.468588  | -1.7 | 420.8185318 |
| 15    | 124.943781 | -151.412369 | 28.8020673 | 0    | 121.342437  |
| 16    | 124.943781 | -153.745848 | 31.2922119 | 0    | 32.2612214  |
| 17    | 124.943781 | -156.235993 | 33.9459431 | 0    | 7.920603787 |
| 18    | 124.943781 | -158.889724 | 36.770295  | 0    | 1.798396909 |
| 19    | 124.943781 | -161.714076 | 39.7724109 | 0    | 0.378168049 |
| 20    | 124.943781 | -164.716192 | 42.9595402 | 0    | 0.073749804 |
| 21    | 124.943781 | -167.903321 | 46.3390349 | 0    | 0.013356769 |
| 22    | 124.943781 | -171.282816 | 49.9183482 | 0    | 0.002249458 |
| 23    | 124.943781 | -174.862129 | 53.7050326 | 0    | 0.000352733 |
| 24    | 124.943781 | -178.648813 | 57.7067396 | 0    | 5.15637E-05 |
| 25    | 124.943781 | -182.65052  | 61.9312202 | 0    | 7.03557E-06 |
| 26    | 124.943781 | -186.875001 | 66.3863274 | 0    | 8.97059E-07 |
| 27    | 124.943781 | -191.330108 | 71.0800188 | 0    | 1.07005E-07 |
| 28    | 124.943781 | -196.023799 | 76.0203628 | 0    | 1.19546E-08 |
| 29    | 124.943781 | -200.964143 | 81.2155449 | 0    | 1.25221E-09 |
| 30    | 124.943781 | -206.159325 | 86.6738781 | 0    | 1.23108E-10 |
| 31    | 124.943781 | -211.617659 | 92.4038145 | 0    | 1.13712E-11 |
| 32    | 124.943781 | -217.347595 | 98.413961  | 0    | 9.87795E-13 |
| 33    | 124.943781 | -223.357742 | 104.713098 | 0    | 8.0776E-14  |
| 34    | 124.943781 | -229.656879 | 111.310202 | 0    | 6.22381E-15 |
| 35    | 124.943781 | -236.253983 | 118.214474 | 0    | 4.52248E-16 |
| 36    | 124.943781 | -243.158255 | 125.435371 | 0    | 3.10146E-17 |
| 37    | 124.943781 | -250.379152 | 148.947768 | 0    | 2.00543E-18 |
| 38    | 124.943781 | -224.307068 | 0          | 0    | 1.06643E-19 |





## ANEXO G: DATOS DE HEPTENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 26 Valores A, B, C y D para el hepteno

### HEPTENO

| Etapa | A          | B           | C          | D    | X           |
|-------|------------|-------------|------------|------|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 4.85117669 | 0    | 2.76766E+14 |
| 2     | 24.9437806 | -29.7949573 | 5.46305052 | 0    | 5.37603E+13 |
| 3     | 24.9437806 | -30.4068311 | 6.13655294 | 0    | 9.39546E+12 |
| 4     | 24.9437806 | -31.0803336 | 6.87623999 | 0    | 1.48068E+12 |
| 5     | 24.9437806 | -31.8200206 | 7.68687027 | 0    | 2.10884E+11 |
| 6     | 24.9437806 | -32.6306509 | 8.57340759 | 0    | 27200857598 |
| 7     | 24.9437806 | -33.5171882 | 9.54102389 | 0    | 3183974935  |
| 8     | 24.9437806 | -34.4848045 | 10.5951029 | 0    | 338897503.4 |
| 9     | 24.9437806 | -35.5388836 | 11.7412449 | 0    | 32863656.79 |
| 10    | 24.9437806 | -36.6850255 | 12.9852718 | 0    | 2908867.447 |
| 11    | 24.9437806 | -37.9290524 | 14.333235  | 0    | 235439.7967 |
| 12    | 24.9437806 | -39.2770156 | 15.7914238 | 0    | 17456.11779 |
| 13    | 24.9437806 | -40.7352045 | 17.2099736 | 0    | 1187.596579 |
| 14    | 24.9437806 | -142.153754 | 20.4883128 | -0.3 | 74.26209384 |
| 15    | 124.943781 | -145.432093 | 22.4510224 | 0    | 21.41337124 |
| 16    | 124.943781 | -147.394803 | 24.5608634 | 0    | 5.693156718 |
| 17    | 124.943781 | -149.504644 | 26.8256436 | 0    | 1.397753609 |
| 18    | 124.943781 | -151.769424 | 29.2534075 | 0    | 0.31736416  |
| 19    | 124.943781 | -154.197188 | 31.8524419 | 0    | 0.066735538 |
| 20    | 124.943781 | -156.796223 | 34.6312837 | 0    | 0.013014671 |
| 21    | 124.943781 | -159.575064 | 37.5987294 | 0    | 0.002357077 |
| 22    | 124.943781 | -162.54251  | 40.7638478 | 0    | 0.000396963 |
| 23    | 124.943781 | -165.707628 | 44.1359953 | 0    | 6.22469E-05 |
| 24    | 124.943781 | -169.079776 | 47.7248352 | 0    | 9.09948E-06 |
| 25    | 124.943781 | -172.668616 | 51.5403615 | 0    | 1.24157E-06 |
| 26    | 124.943781 | -176.484142 | 55.5929274 | 0    | 1.58305E-07 |
| 27    | 124.943781 | -180.536708 | 59.89328   | 0    | 1.88833E-08 |
| 28    | 124.943781 | -184.837061 | 64.4526023 | 0    | 2.10963E-09 |
| 29    | 124.943781 | -189.396383 | 69.2825632 | 0    | 2.20977E-10 |
| 30    | 124.943781 | -194.226344 | 74.3953772 | 0    | 2.17249E-11 |
| 31    | 124.943781 | -199.339158 | 79.8038754 | 0    | 2.00668E-12 |
| 32    | 124.943781 | -204.747656 | 85.5215897 | 0    | 1.74317E-13 |
| 33    | 124.943781 | -210.46537  | 91.5628529 | 0    | 1.42546E-14 |
| 34    | 124.943781 | -216.506634 | 97.9429168 | 0    | 1.09832E-15 |
| 35    | 124.943781 | -222.886697 | 104.678092 | 0    | 7.98084E-17 |
| 36    | 124.943781 | -229.621873 | 111.785916 | 0    | 5.47316E-18 |
| 37    | 124.943781 | -236.729696 | 135.391178 | 0    | 3.53899E-19 |
| 38    | 124.943781 | -210.750478 | 0          | 0    | 1.88194E-20 |





## ANEXO H: DATOS DE ISOCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 28 Valores A, B, C y D para el isoctano

### ISOCTANO

| Etapa | A          | B           | C          | D   | X           |
|-------|------------|-------------|------------|-----|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 3.950077   | 0   | 9.22553E+15 |
| 2     | 24.9437806 | -28.8938576 | 4.43454698 | 0   | 1.79201E+15 |
| 3     | 24.9437806 | -29.3783276 | 4.96617802 | 0   | 3.13182E+14 |
| 4     | 24.9437806 | -29.9099586 | 5.54830549 | 0   | 4.93561E+13 |
| 5     | 24.9437806 | -30.4920861 | 6.18440232 | 0   | 7.02947E+12 |
| 6     | 24.9437806 | -31.1281829 | 6.87807975 | 0   | 9.06695E+11 |
| 7     | 24.9437806 | -31.8218604 | 7.63308823 | 0   | 1.06132E+11 |
| 8     | 24.9437806 | -32.5768688 | 8.45331856 | 0   | 11296583448 |
| 9     | 24.9437806 | -33.3970992 | 9.34280332 | 0   | 1095455226  |
| 10    | 24.9437806 | -34.2865839 | 10.305719  | 0   | 96962248.24 |
| 11    | 24.9437806 | -35.2494996 | 11.3463886 | 0   | 7847993.224 |
| 12    | 24.9437806 | -36.2901692 | 12.4692856 | 0   | 581870.593  |
| 13    | 24.9437806 | -37.4130662 | 17.4835913 | 0   | 39586.55264 |
| 14    | 24.9437806 | -142.427372 | 22.8047446 | -10 | 2475.403128 |
| 15    | 124.943781 | -147.748525 | 24.9080269 | 0   | 713.7790412 |
| 16    | 124.943781 | -149.851808 | 27.1615234 | 0   | 189.7718906 |
| 17    | 124.943781 | -152.105304 | 29.5725927 | 0   | 46.59178698 |
| 18    | 124.943781 | -154.516373 | 32.1487709 | 0   | 10.57880535 |
| 19    | 124.943781 | -157.092551 | 34.8977744 | 0   | 2.224517938 |
| 20    | 124.943781 | -159.841555 | 37.8275055 | 0   | 0.433822378 |
| 21    | 124.943781 | -162.771286 | 40.9460589 | 0   | 0.078569231 |
| 22    | 124.943781 | -165.88984  | 44.261732  | 0   | 0.013232104 |
| 23    | 124.943781 | -169.205513 | 47.7830373 | 0   | 0.002074897 |
| 24    | 124.943781 | -172.726818 | 51.5187187 | 0   | 0.000303316 |
| 25    | 124.943781 | -176.462499 | 55.4777721 | 0   | 4.13857E-05 |
| 26    | 124.943781 | -180.421553 | 59.6694705 | 0   | 5.27682E-06 |
| 27    | 124.943781 | -184.613251 | 64.1033936 | 0   | 6.29442E-07 |
| 28    | 124.943781 | -189.047174 | 68.7894652 | 0   | 7.0321E-08  |
| 29    | 124.943781 | -193.733246 | 73.7379959 | 0   | 7.36591E-09 |
| 30    | 124.943781 | -198.681777 | 78.9597347 | 0   | 7.24164E-10 |
| 31    | 124.943781 | -203.903515 | 84.4659292 | 0   | 6.68895E-11 |
| 32    | 124.943781 | -209.40971  | 90.2683964 | 0   | 5.81056E-12 |
| 33    | 124.943781 | -215.212177 | 96.3796051 | 0   | 4.75153E-13 |
| 34    | 124.943781 | -221.323386 | 102.812773 | 0   | 3.66107E-14 |
| 35    | 124.943781 | -227.756553 | 109.581976 | 0   | 2.66028E-15 |
| 36    | 124.943781 | -234.525756 | 116.702283 | 0   | 1.82439E-16 |
| 37    | 124.943781 | -241.646063 | 140.188023 | 0   | 1.17966E-17 |
| 38    | 124.943781 | -215.547323 | 0          | 0   | 6.27313E-19 |





## ANEXO I: DATOS DE TOLUENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 30 Valores A, B, C y D para el tolueno

### TOLUENO

| Etapa | A          | B           | C          | D   | X           |
|-------|------------|-------------|------------|-----|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 3.81260816 | 0   | 1.75285E+16 |
| 2     | 24.9437806 | -28.7563888 | 4.33311777 | 0   | 3.40482E+15 |
| 3     | 24.9437806 | -29.2768984 | 4.91198393 | 0   | 5.95046E+14 |
| 4     | 24.9437806 | -29.8557645 | 5.55429975 | 0   | 9.37766E+13 |
| 5     | 24.9437806 | -30.4980804 | 6.26547594 | 0   | 1.3356E+13  |
| 6     | 24.9437806 | -31.2092566 | 7.05125486 | 0   | 1.72272E+12 |
| 7     | 24.9437806 | -31.9950355 | 7.91772622 | 0   | 2.01652E+11 |
| 8     | 24.9437806 | -32.8615068 | 8.87134468 | 0   | 21463508550 |
| 9     | 24.9437806 | -33.8151253 | 9.9189499  | 0   | 2081364930  |
| 10    | 24.9437806 | -34.8627305 | 11.0677897 | 0   | 184228271.7 |
| 11    | 24.9437806 | -36.0115704 | 12.3255472 | 0   | 14911187.13 |
| 12    | 24.9437806 | -37.2693278 | 13.7003722 | 0   | 1105554.127 |
| 13    | 24.9437806 | -38.6441528 | 10.5062165 | 0   | 75214.45001 |
| 14    | 24.9437806 | -135.449997 | 10.963068  | -19 | 4703.265943 |
| 15    | 124.943781 | -135.906849 | 12.0632665 | 0   | 1356.180178 |
| 16    | 124.943781 | -137.007047 | 13.2496377 | 0   | 360.5665922 |
| 17    | 124.943781 | -138.193418 | 14.5268652 | 0   | 88.52439526 |
| 18    | 124.943781 | -139.470646 | 15.8997518 | 0   | 20.09973016 |
| 19    | 124.943781 | -140.843532 | 17.3732161 | 0   | 4.226584083 |
| 20    | 124.943781 | -142.316997 | 18.9522896 | 0   | 0.824262518 |
| 21    | 124.943781 | -143.89607  | 20.6421124 | 0   | 0.149281539 |
| 22    | 124.943781 | -145.585893 | 22.4479301 | 0   | 0.025140998 |
| 23    | 124.943781 | -147.391711 | 24.3750896 | 0   | 0.003942305 |
| 24    | 124.943781 | -149.31887  | 26.4290352 | 0   | 0.000576301 |
| 25    | 124.943781 | -151.372816 | 28.6153042 | 0   | 7.86329E-05 |
| 26    | 124.943781 | -153.559085 | 30.9395234 | 0   | 1.0026E-05  |
| 27    | 124.943781 | -155.883304 | 33.4074044 | 0   | 1.19594E-06 |
| 28    | 124.943781 | -158.351185 | 36.0247392 | 0   | 1.3361E-07  |
| 29    | 124.943781 | -160.96852  | 38.7973965 | 0   | 1.39952E-08 |
| 30    | 124.943781 | -163.741177 | 41.7313166 | 0   | 1.37591E-09 |
| 31    | 124.943781 | -166.675097 | 44.832508  | 0   | 1.2709E-10  |
| 32    | 124.943781 | -169.776289 | 48.1070424 | 0   | 1.10401E-11 |
| 33    | 124.943781 | -173.050823 | 51.5610509 | 0   | 9.02791E-13 |
| 34    | 124.943781 | -176.504831 | 55.2007196 | 0   | 6.95603E-14 |
| 35    | 124.943781 | -180.1445   | 59.0322859 | 0   | 5.05453E-15 |
| 36    | 124.943781 | -183.976067 | 63.0620345 | 0   | 3.46633E-16 |
| 37    | 124.943781 | -188.005815 | 76.3190756 | 0   | 2.24136E-17 |
| 38    | 124.943781 | -151.678376 | 0          | 0   | 1.1919E-18  |





## ANEXO J: DATOS DE OCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 32 Valores A, B, C y D para el octano

### OCTANO

| <i>Etapa</i> | A          | B           | C          | D  | X           |
|--------------|------------|-------------|------------|----|-------------|
| 1            | 0          | -24.9437806 | 1.40795585 | 0  | 5.53532E+15 |
| 2            | 24.9437806 | -26.3517365 | 1.61746273 | 0  | 1.07521E+15 |
| 3            | 24.9437806 | -26.5612433 | 1.8526267  | 0  | 1.87909E+14 |
| 4            | 24.9437806 | -26.7964073 | 2.11590074 | 0  | 2.96137E+13 |
| 5            | 24.9437806 | -27.0596813 | 2.40990462 | 0  | 4.21768E+12 |
| 6            | 24.9437806 | -27.3536852 | 2.737432   | 0  | 5.44017E+11 |
| 7            | 24.9437806 | -27.6812126 | 3.10145796 | 0  | 63679498692 |
| 8            | 24.9437806 | -28.0452386 | 3.50514711 | 0  | 6777950069  |
| 9            | 24.9437806 | -28.4489277 | 3.95186252 | 0  | 657273135.8 |
| 10           | 24.9437806 | -28.8956431 | 4.44517574 | 0  | 58177348.94 |
| 11           | 24.9437806 | -29.3889563 | 4.988878   | 0  | 4708795.935 |
| 12           | 24.9437806 | -29.9326586 | 5.58699331 | 0  | 349122.3558 |
| 13           | 24.9437806 | -30.5307739 | 6.15082138 | 0  | 23751.93158 |
| 14           | 24.9437806 | -131.094602 | 7.48660343 | -6 | 1485.241877 |
| 15           | 124.943781 | -132.430384 | 8.29437855 | 0  | 428.2674247 |
| 16           | 124.943781 | -133.238159 | 9.17088041 | 0  | 113.8631344 |
| 17           | 124.943781 | -134.114661 | 10.1202653 | 0  | 27.95507219 |
| 18           | 124.943781 | -135.064046 | 11.1468203 | 0  | 6.347283208 |
| 19           | 124.943781 | -136.090601 | 12.2549608 | 0  | 1.334710763 |
| 20           | 124.943781 | -137.198741 | 13.4492286 | 0  | 0.260293427 |
| 21           | 124.943781 | -138.393009 | 14.7342894 | 0  | 0.047141539 |
| 22           | 124.943781 | -139.67807  | 16.1149301 | 0  | 0.007939262 |
| 23           | 124.943781 | -141.058711 | 17.5960562 | 0  | 0.001244938 |
| 24           | 124.943781 | -142.539837 | 19.182689  | 0  | 0.00018199  |
| 25           | 124.943781 | -144.12647  | 20.8799629 | 0  | 2.48314E-05 |
| 26           | 124.943781 | -145.823744 | 22.6931227 | 0  | 3.16609E-06 |
| 27           | 124.943781 | -147.636903 | 24.6275203 | 0  | 3.77665E-07 |
| 28           | 124.943781 | -149.571301 | 26.6886128 | 0  | 4.21926E-08 |
| 29           | 124.943781 | -151.632393 | 28.8819595 | 0  | 4.41955E-09 |
| 30           | 124.943781 | -153.82574  | 31.2132197 | 0  | 4.34498E-10 |
| 31           | 124.943781 | -156.157    | 33.6881506 | 0  | 4.01337E-11 |
| 32           | 124.943781 | -158.631931 | 36.3126055 | 0  | 3.48633E-12 |
| 33           | 124.943781 | -161.256386 | 39.0925323 | 0  | 2.85092E-13 |
| 34           | 124.943781 | -164.036313 | 42.0339725 | 0  | 2.19664E-14 |
| 35           | 124.943781 | -166.977753 | 45.1430609 | 0  | 1.59617E-15 |
| 36           | 124.943781 | -170.086841 | 48.4260248 | 0  | 1.09463E-16 |
| 37           | 124.943781 | -173.369805 | 59.3118538 | 0  | 7.07797E-18 |
| 38           | 124.943781 | -134.671154 | 0          | 0  | 3.76388E-19 |





## ANEXO K: DATOS DE ETILBENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 34 Valores A, B, C y D para el etilbenceno

### ETILBENCENO

| Etapa | A          | B           | C          | D  | X           |
|-------|------------|-------------|------------|----|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 1.61194862 | 0  | 4.61276E+15 |
| 2     | 24.9437806 | -26.5557292 | 1.86049447 | 0  | 8.96005E+14 |
| 3     | 24.9437806 | -26.8042751 | 2.14123317 | 0  | 1.56591E+14 |
| 4     | 24.9437806 | -27.0850138 | 2.45754687 | 0  | 2.4678E+13  |
| 5     | 24.9437806 | -27.4013275 | 2.81309308 | 0  | 3.51473E+12 |
| 6     | 24.9437806 | -27.7568737 | 3.2118222  | 0  | 4.53348E+11 |
| 7     | 24.9437806 | -28.1556028 | 3.65799664 | 0  | 53066248910 |
| 8     | 24.9437806 | -28.6017773 | 4.1562118  | 0  | 5648291724  |
| 9     | 24.9437806 | -29.0999924 | 4.71141936 | 0  | 547727613.1 |
| 10    | 24.9437806 | -29.6552    | 5.32895343 | 0  | 48481124.12 |
| 11    | 24.9437806 | -30.272734  | 6.01456019 | 0  | 3923996.612 |
| 12    | 24.9437806 | -30.9583408 | 6.77443181 | 0  | 290935.2965 |
| 13    | 24.9437806 | -31.7182124 | 4.91880144 | 0  | 19793.27632 |
| 14    | 24.9437806 | -129.862582 | 5.11684661 | -5 | 1237.701564 |
| 15    | 124.943781 | -130.060627 | 5.68728555 | 0  | 356.8895206 |
| 16    | 124.943781 | -130.631066 | 6.30841585 | 0  | 94.88594531 |
| 17    | 124.943781 | -131.252196 | 6.98351189 | 0  | 23.29589349 |
| 18    | 124.943781 | -131.927292 | 7.71596758 | 0  | 5.289402673 |
| 19    | 124.943781 | -132.659748 | 8.50929577 | 0  | 1.112258969 |
| 20    | 124.943781 | -133.453076 | 9.36712751 | 0  | 0.216911189 |
| 21    | 124.943781 | -134.310908 | 10.2932113 | 0  | 0.039284616 |
| 22    | 124.943781 | -135.236992 | 11.2914119 | 0  | 0.006616052 |
| 23    | 124.943781 | -136.235192 | 12.3657096 | 0  | 0.001037449 |
| 24    | 124.943781 | -137.30949  | 13.5201991 | 0  | 0.000151658 |
| 25    | 124.943781 | -138.46398  | 14.7590882 | 0  | 2.06929E-05 |
| 26    | 124.943781 | -139.702869 | 16.0866967 | 0  | 2.63841E-06 |
| 27    | 124.943781 | -141.030477 | 17.5074558 | 0  | 3.14721E-07 |
| 28    | 124.943781 | -142.451236 | 19.0259069 | 0  | 3.51605E-08 |
| 29    | 124.943781 | -143.969687 | 20.6467008 | 0  | 3.68296E-09 |
| 30    | 124.943781 | -145.590481 | 22.3745974 | 0  | 3.62082E-10 |
| 31    | 124.943781 | -147.318378 | 24.2144656 | 0  | 3.34447E-11 |
| 32    | 124.943781 | -149.158246 | 26.1712828 | 0  | 2.90528E-12 |
| 33    | 124.943781 | -151.115063 | 28.2501365 | 0  | 2.37576E-13 |
| 34    | 124.943781 | -153.193917 | 30.4562245 | 0  | 1.83053E-14 |
| 35    | 124.943781 | -155.400005 | 32.7948573 | 0  | 1.33014E-15 |
| 36    | 124.943781 | -157.738638 | 35.2714603 | 0  | 9.12193E-17 |
| 37    | 124.943781 | -160.215241 | 43.5318078 | 0  | 5.89831E-18 |
| 38    | 124.943781 | -118.891108 | 0          | 0  | 3.13657E-19 |





## ANEXO L: DATOS DE XILENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 36 Valores A, B, C y D para el xileno

### XILENO

| Etapa | A          | B           | C          | D   | X           |
|-------|------------|-------------|------------|-----|-------------|
| 1     | 0          | -24.9437806 | 1.39466079 | 0   | 3.22893E+16 |
| 2     | 24.9437806 | -26.3384414 | 1.61324675 | 0   | 6.27203E+15 |
| 3     | 24.9437806 | -26.5570274 | 1.8607135  | 0   | 1.09614E+15 |
| 4     | 24.9437806 | -26.8044941 | 2.14017259 | 0   | 1.72746E+14 |
| 5     | 24.9437806 | -27.0839532 | 2.45499742 | 0   | 2.46031E+13 |
| 6     | 24.9437806 | -27.398778  | 2.80884054 | 0   | 3.17343E+12 |
| 7     | 24.9437806 | -27.7526211 | 3.20565247 | 0   | 3.71464E+11 |
| 8     | 24.9437806 | -28.1494331 | 3.64970233 | 0   | 39538042067 |
| 9     | 24.9437806 | -28.5934829 | 4.1456006  | 0   | 3834093292  |
| 10    | 24.9437806 | -29.0893812 | 4.69832466 | 0   | 339367868.8 |
| 11    | 24.9437806 | -29.6421053 | 5.31324761 | 0   | 27467976.29 |
| 12    | 24.9437806 | -30.2570282 | 5.99617109 | 0   | 2036547.075 |
| 13    | 24.9437806 | -30.9399517 | 4.36880315 | 0   | 138552.9342 |
| 14    | 24.9437806 | -129.312584 | 4.55948593 | -35 | 8663.910948 |
| 15    | 124.943781 | -129.503267 | 5.07680239 | 0   | 2498.226644 |
| 16    | 124.943781 | -130.020583 | 5.6411386  | 0   | 664.2016171 |
| 17    | 124.943781 | -130.584919 | 6.25563252 | 0   | 163.0712544 |
| 18    | 124.943781 | -131.199413 | 6.92354436 | 0   | 37.02581871 |
| 19    | 124.943781 | -131.867325 | 7.64825652 | 0   | 7.785812784 |
| 20    | 124.943781 | -132.592037 | 8.43327336 | 0   | 1.518378322 |
| 21    | 124.943781 | -133.377054 | 9.28222077 | 0   | 0.274992309 |
| 22    | 124.943781 | -134.226001 | 10.1988458 | 0   | 0.046312364 |
| 23    | 124.943781 | -135.142626 | 11.1870159 | 0   | 0.00726214  |
| 24    | 124.943781 | -136.130796 | 12.2507183 | 0   | 0.001061606 |
| 25    | 124.943781 | -137.194499 | 13.3940597 | 0   | 0.00014485  |
| 26    | 124.943781 | -138.33784  | 14.6212648 | 0   | 1.84689E-05 |
| 27    | 124.943781 | -139.565045 | 15.9366763 | 0   | 2.20305E-06 |
| 28    | 124.943781 | -140.880457 | 17.3447543 | 0   | 2.46123E-07 |
| 29    | 124.943781 | -142.288535 | 18.8500754 | 0   | 2.57807E-08 |
| 30    | 124.943781 | -143.793856 | 20.4573328 | 0   | 2.53457E-09 |
| 31    | 124.943781 | -145.401113 | 22.1713364 | 0   | 2.34113E-10 |
| 32    | 124.943781 | -147.115117 | 23.9970128 | 0   | 2.03369E-11 |
| 33    | 124.943781 | -148.940793 | 25.9394064 | 0   | 1.66304E-12 |
| 34    | 124.943781 | -150.883187 | 28.0036803 | 0   | 1.28137E-13 |
| 35    | 124.943781 | -152.947461 | 30.1951183 | 0   | 9.31098E-15 |
| 36    | 124.943781 | -155.138899 | 32.5191275 | 0   | 6.38535E-16 |
| 37    | 124.943781 | -157.462908 | 40.2922833 | 0   | 4.12882E-17 |
| 38    | 124.943781 | -115.651583 | 0          | 0   | 2.1956E-18  |





## BIBLIOGRAFÍA

---

- ATSDR. (20 de Enero de 2016). *Toxic Substances Portal* . Obtenido de <http://www.atsdr.cdc.gov/substances/toxsubstance.asp?toxid=14>
- Balzhiser, R., Samuels, M., & Eliassen, J. (1974). *Termodinámica Química para Ingenieros*. Prentice Hall.
- EPA. (Octubre de 2005). *United States Environment Protection Agency*. Obtenido de [www.epa.gov/iris/subst/index.html](http://www.epa.gov/iris/subst/index.html)
- GeoSalud. (20 de Enero de 2016). *Benceno y su Impacto en la Salud Humana*. Obtenido de <http://www.geosalud.com/Ambiente/benceno.htm>
- Henley, E. J., & Seader, J. D. (1994). *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. España: Editorial Reverté.
- King, C. J. (1988). *Separation Processes. Chemical Engineering Series*. Nueva York: McGraw-Hill.
- Kister, H. Z. (1992). *Distillation Design*. McGraw-Hill.
- Kyle, B. G. (1992). *Chemical and Process Thermodynamics*. USA: Prentice Hall.
- NORMA OFICIAL MEXICANA. (30 de enero de 2005). Especificaciones de los combustibles fosiles para la proteccion ambiental. *NOM-086-SEMARNAT-SENER-SCFI-2005*. México.
- Pemex, R. (2004). *Auditoria de seguridad industrial y proteccion ambiental, Gasolina Pemex Magna*.
- Pemex, R. (07 de 2010). *Pemex refinacion. Terminal de almacenamiento y distribución en Toluca*. Obtenido de <http://www.ref.pemex.com/octanaje/octa29/29termi.htm>
- Prosen, E. J., & Rossini, F. D. (1945). *Heats of combustion and formation of the paraffin hydrocarbons at 25° C*. J. Res. NBS.
- Smith, J., & Ness, H. V. (1989). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. México: McGraw-Hill.



webbook. (25 de enero de 2016). *webbook*. Obtenido de  
<http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C540841&Units=SI&Mask=7FF>

Wiberg, K. B., Wasserman, D. J., & Martin, E. (1984). *Enthalpies of hydration of alkenes. 2. The n-heptenes and n-pentenes*. Phys. Chem.