



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**SIMULACIÓN DE LA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE MTBE DE LA
REFINERÍA LÁZARO CÁRDENAS UBICADA EN MINATITLÁN
VERACRUZ**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA

Noe Guadarrama Pérez



CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX .

AÑO 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.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: Profesor: CELESTINO MONTIEL MALDONADO

VOCAL: Profesor: MARTIN RIVERA TOLEDO

SECRETARIO: Profesor: MILTON THADEU GARCIA MEDEIROS DE OLIVEIRA

1er. SUPLENTE: Profesor: JOSE LUIS LOPEZ CERVANTES

2° SUPLENTE: Profesor: ILEANA RODRÍGUEZ CASTAÑEDA

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

LABORATORIO DE SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS (LSYOP)

EDIFICIO DE INGENIERÍA QUÍMICA, CONJUNTO E

FACULTAD DE QUÍMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

ASESOR DEL TEMA:

Ing. Celestino Montiel Maldonado

SUPERVISOR TÉCNICO:

Ing. Ileana Rodríguez Castañeda

SUSTENTANTE:

Noe Guadarrama Pérez

Contenido

Capítulo 1 introducción.....	1
Objetivos.....	1
Objetivo General	1
Objetivos específicos	1
Introducción	1
Propiedades del MTBE y materias primas.....	3
Estructura del catalizador	3
Capítulo 2 Antecedentes	8
Simulación de procesos.....	8
Tipos de simulación.....	8
Reacciones de producción de MTBE.....	9
Reacciones secundarias.....	9
Modelos termodinámicos.....	10
Termodinámica de equilibrio.....	10
Procesos de producción de Éteres.....	11
Proceso Snamprogetti.....	12
Proceso EL Erdöchemie/Lurgi.....	12
Proceso IFP (Instituto Francés del Petróleo).....	13
Proceso UOP/Hüls	14
Proceso CR&L (Chemical Research and Licensing Company).....	15
Proceso Ethermax (UOP).....	15
Metodología	16
Diagrama de proceso.....	19
Descripción de proceso.....	22
Sección de purificación.....	22
Sección principal de reacción.....	23
Sección de torre catalítica.....	23
Sección de lavado de metanol.....	25
Sección de recuperación de metanol.....	25
Modelos matemáticos para simulación.....	27
Columnas de lavado de la fracción C4 (02-E-101).....	27
Reactor principal (02-D-101).....	29
Torre de destilación catalítica modelo RadFrac (02-E-102).....	33
Capítulo 3 refinería Gral. Lázaro Cárdenas.....	36
Refinería Lázaro Cárdenas en Minatitlán Veracruz.....	36
Destilación catalítica.....	37
Esquema de la torre catalítica	39
Capítulo 4 simulación de la planta de MTBE.....	40

Secuencia de simulación de la planta de MTBE	40
Selección de modelo termodinámico	40
Especificación de alimentación	44
Selección de modelos de simulación y condiciones de operación.....	45
Torres.....	46
Intercambiadores	46
Bombas	46
Tanques flash.....	47
Mezcladores.....	47
Spliters	47
Válvulas.....	47
Cinética de reacción	48
Capítulo 5 análisis de resultados y conclusiones.	50
Resultados.....	50
Perfil de flujo de la columna 02-E-101	50
Perfil de temperatura del reactor 02-D-101.....	51
Perfil de concentración en el reactor 02-D-101.....	51
Perfil de temperatura de la columna 02-E-102	52
Perfil de concentración en la columna 02-E-102	52
Perfil de flujos de la columna 02-E-102	53
Cargas de intercambiadores de calor.	53
Análisis de las corrientes de productos.	54
Conclusiones.....	57
Bibliografía	59
Anexos	62
Cuadro de balance obtenidos	62
Diagrama de flujo de proceso de simulación	66

Tabla de ilustraciones y esquemas

Tabla 1 Propiedades del MTBE y materias Primas	3
Tabla 2 Caracterización de alimentaciones.....	45
Tabla 3 Modelos de equipos de simulación.....	46
Tabla 4 Condiciones de operación de las torres	46
Tabla 5 Condiciones de operación de intercambiadores.....	46
Tabla 6 Condiciones de descarga de las bombas	47
Tabla 7 Condiciones del tanque flash	47
Tabla 8 Relación de corrientes en los mezcladores	47
Tabla 9 Relación de corrientes y flujos de salida	47
Tabla 10 Presiones de salida de las válvulas.....	47

Tabla 11 Resultado de cargas de simulación y diseño	53
Tabla 12 Producción de MTBE.....	54
Tabla 13 Fracción de C4 sobrante	55
Tabla 14 Metanol para recuperación.....	56
Figura 1 Formula General de la Zeolitas (Zúñiga, 2016).....	4
Figura 2 Estructura química de la zeolita (Zúñiga, 2016).....	5
Figura 3 Tipo de acides en zeolitas (Zúñiga, 2016).....	6
Figura 4 Tipo de Selectividad de poros (Uso de las zeolitas, 2016).....	7
Figura 5 Proceso Snamprogetti.....	12
Figura 6 Proceso Erdöchemie/Lurgi	13
Figura 7 Proceso IFP	13
Figura 8 Proceso UOP/Hüls	14
Figura 9 Proceso CR&L	15
Figura 10 Proceso Ethermax.....	16
Figura 11 Metodología de simulación.....	18
Figura 12 Zona de reacción principal	19
Figura 13 Zona de Destilación Catalítica.....	20
Figura 14 Zona de recuperación de Metanol.....	21
Figura 15 Etapa de transferencia del extractor Liquido-Liquido	27
Figura 16 Reactor.....	29
Figura 17 Platos al equilibrio de las torres de destilación.....	33
Figura 18 Ubicación de la refinería Gral. Lázaro Cárdenas en Minatitlán Veracruz	37
Figura 19 Diagrama T-xy para el par metanol-mtbe.....	41
Figura 20 Diagrama P-xy para el par metanol-agua.....	42
Figura 21 Diagrama T-xy para el par metanol-agua.....	42
Figura 22 Diagrama P-x para el par isobutileno-isobutano	43
Figura 23 Diagrama T-xx para el par MTBE-agua.....	43
Figura 24 Perfil de flujo torre 02-E-101	50
Figura 25 Perfil de temperatura del reactor 02-D-101	51

Figura 26 Perfil de concentración másica del reactor 02-D-101.....	51
Figura 27 Perfil de temperatura del reactor 02-E-102	52
Figura 28 Perfil de concentración columna 02-E-102.....	52
Figura 29 Perfil de flujo torre 02-E-102	53



Capítulo 1 introducción

Objetivos

Objetivo General

El objetivo de este proyecto es la simulación de la sección de producción de MTBE de la Refinería “Gral. Lázaro Cárdenas” ubicada en Minatitlán Veracruz con la plataforma de simulación ASPEN V8.8

Objetivos específicos

- Simular las condiciones la producción de MTBE de la Refinería “Gral. Lázaro cárdenas”
- Analizar las similitudes y diferencias en las corrientes de productos y cargas de los equipos de intercambio de calor para los datos obtenidos con la simulación y los datos de diseño.
- Analizar los perfiles de temperatura, presión, composición y de flujo en los equipos más importantes para verificar que tienen un comportamiento razonable y ver los efectos de las alimentaciones y reacciones.

Introducción

El MTBE (Metil Tert-Butil Éter) ha sido utilizado cerca de 40 años para mejorar el funcionamiento de los motores de combustión interna y hacer que los combustibles tengan una combustión completa, disminuyendo el impacto sobre la calidad del aire. Las primeras investigaciones sobre los éteres para mejorar el rendimiento de



las gasolinas comenzaron cerca de los 1920's. Al iniciar los 1930's las compañías productoras de gasolina iniciaron a añadir alcoholes para incrementar el octanaje de la mezcla, la cual fue vendida en los Estados Unidos hasta los años 1940's.

En 1950 el American Institute of Petroleum empieza a hablar sobre las posibles aplicaciones del MTBE para mejorar las gasolinas, y en 1969 el Alcohol tertbutílico, un derivado del MTBE, comienza a ser añadido en las gasolinas en los Estados Unidos, pero no fue sino hasta 1973 cuando el MTBE comienza a ser usado comercialmente en las gasolinas en Italia.

A mediados de los 1970's durante el embargo de petróleo de Arabia, el uso del MTBE como aditivo para el incremento del octanaje en las gasolinas tuvo una expansión, y en 1979 el MTBE comenzó a ser añadido a las gasolinas para remplazar el plomo y evitar las detonaciones no deseadas en el motor. En 1990 el "Clean Air Act Amendments" se publica en Estados Unidos especificando el uso de compuestos oxigenados para incrementar la combustión de los combustibles y minimizar la contaminación del aire.

Existen otros usos del MTBE menores, entre ellos su uso como disolvente de cálculos renales, usando inyecciones de 2 a 8 cm³ directo en el cálculo renal. El MTBE también se ha utilizado en los laboratorios analíticos como un extractante, sin embargo, se prefieren otros productos químicos, y su uso en laboratorios no está muy extendido. El MTBE se ha utilizado en menor medida en la síntesis química, por ejemplo, puede ser hidrolizado para generar TBA. Aparte de estas



pequeñas cantidades, casi todo el MTBE producidos o importados a los Estados Unidos se utiliza como un aditivo de la gasolina¹.

Propiedades del MTBE y materias primas

Para el presente trabajo es necesario el uso de varias propiedades del MTBE, Metanol y la Fracción de C4, por ello estas se especifican en la tabla 1².

		MTBE	Metanol	C4
Peso molecular	g/gmol	88.15	32.04	56.61
punto de ebullición	°C	54	65	
Gravedad especifica	Kg/m ³	0.74	0.8	0.58
Solubilidad en agua	mg/L	50000	infinito	0
presión de vapor	mmHg	251	122	28726.69
Viscosidad	cP	0.2627	0.5	0.1317

Tabla 1 Propiedades del MTBE y materias Primas (hojas de seguridad UNAM, 2016), (Meyers)

Estructura del catalizador

El catalizador usado en los elementos de reacción consiste en una resina sintética de intercambio iónico, conocida como zeolita. Para definir lo que es una zeolita antes describiremos lo que son silicatos y cuál es su estructura química. La estructura de los silicatos tiene como fundamento el tetraedro de silicio (SiO₄)⁴⁻ que resulta la unidad primaria de construcción. Cada silicio, en los silicatos, se une a cuatro oxígenos. La fórmula molecular se esos tetraedros es (SiO₄)⁴⁻

El (SiO₄)⁴⁻ se une a otros tetraedros (SiO₄)⁴⁻ a través de oxígenos compartidos y de esta forma se producen numerosas estructuras en forma de islas, cadenas,

¹ (E. Moller & T.Kostecki, 2003)

² (Gary, 2001), (hojas de seguridad UNAM, 2016),



láminas o redes tridimensionales. Cuando las redes formadas son tridimensionales (caso de las zeolitas), el catión, alrededor del cual se ordenan los cuatro oxígenos que sirven para formar la red puede ser también Aluminio, Galio o Germanio, aunque las cargas no queden equilibradas, quedando una carga negativa.

La carga negativa debido a la presencia de un Al^{3+} , Ga^{3+} o Ge^{3+} en el centro de un tetraedro de oxígenos se debe balancear con otro catión, es decir con un ion cargado positivamente que, por lo general, es un elemento alcalino o alcalinotérreo (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} o Mg^{2+}). Para no tener que aclarar constantemente de que catión se trata, se designa como “átomos T” a los átomos rodeados por cuatro átomos de oxígeno en forma de tetraedro, trátase del Si, Ga, Ge y Al.

La fórmula general para la composición de la zeolita es:



Figura 1 Fórmula General de la Zeolitas
(Zúñiga, 2016)

Los tetraedros de silicio son eléctricamente neutros (ejem. cuarzo) la sustitución de Si(IV) por Al(III) crea un desbalance de carga y la neutralidad se consigue con iones intercambiables como se muestra en la figura 2.

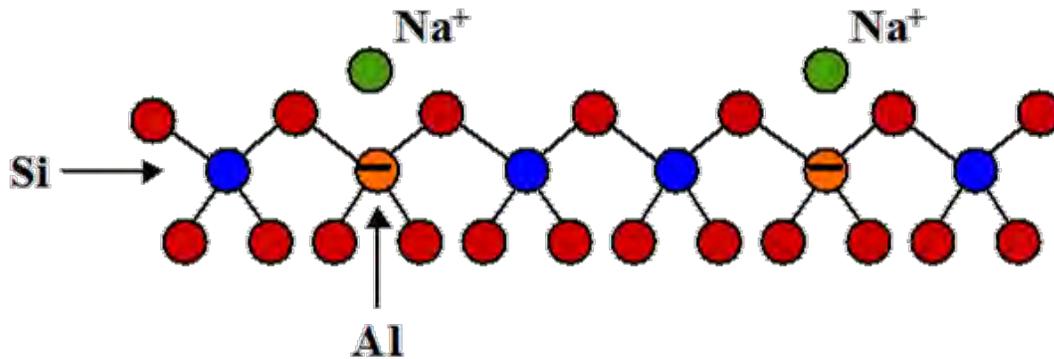


Figura 2 Estructura química de la zeolita
(Zúñiga, 2016)

Esta estructura se presenta como un ácido. La regulación del poder ácido de la zeolita depende en gran medida de la proporción de tetraedros de silicio y aluminio. Uno de los criterios básicos para la síntesis de este tipo de catalizadores es que están prohibidos los enlaces aluminio- aluminio, por ello la relación Al/Si siempre debe de ser menor o igual a uno.

Otro de los aspectos de la zeolita es que puede presentar 3 tipos de acidez en la estructura. El primero es cuando al contra ion usado para compensar la carga, es un ion alcalinotérreo, es entonces cuando se presenta la acidez común de la zeolita. Otro tipo de acidez se presenta cuando el ion alcalinotérreo que se usa para compensar la carga es sustituido por un protón, es ahí cuando la estructura cambia su tipo de acidez por la acidez de Bronstead.

Finalmente se presenta el último tipo de acidez al deshidroxilar a elevadas temperaturas la estructura de zeolita con protones como contra ion, formando estructuras con aluminio cargado y descubierto, formando un ácido de Lewis.

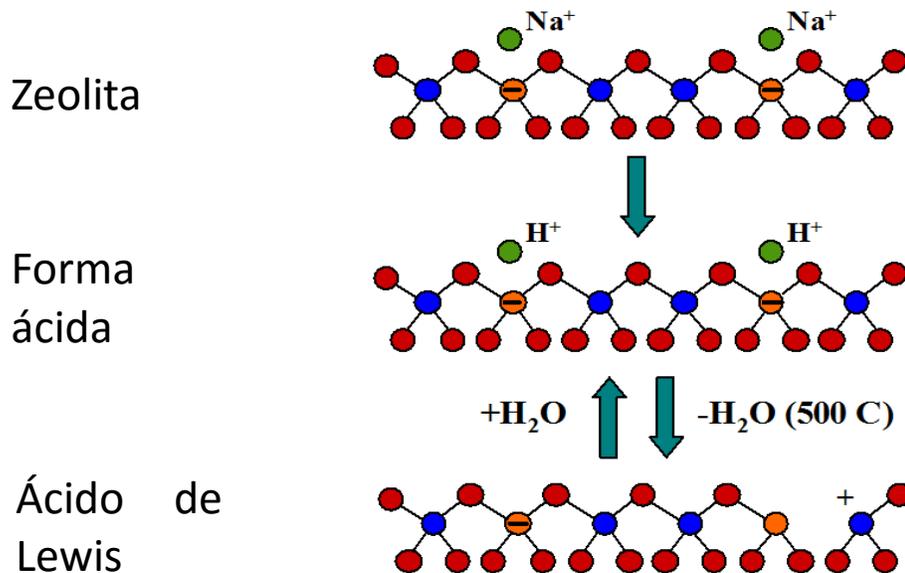


Figura 3 Tipo de acides en zeolitas
(Zúñiga, 2016)

Las zeolitas también son excelentes catalizadores debido a la selectividad del tamiz molecular que le otorga su forma. Esta selectividad se puede clasificar en 4 tipos:

- Selectividad al reaccionante: solo moléculas realmente pequeñas pueden entrar y difundirse por todos los poros. En la figura 4 se muestra este tipo de selectividad en el inciso a.
- Selectividad de productos: las moléculas de gran tamaño que se forman en el interior de la zeolita ya no se pueden difundir hacia el exterior de los poros y es descompuesta en moléculas más pequeñas o queda atrapada envenenando al catalizador. En la figura 4 se muestra este tipo de selectividad en el inciso b.
- Selectividad de estado de transición: este tipo de selectividad sucede cuando los intermediarios de las reacciones secundarias son voluminosos y es casi

imposible que se generen en el interior de la zeolita. En este tipo de selectividad las reacciones cuyos intermediarios son demasiado grandes solo son formados en la superficie del catalizador. En la figura 4 se muestra este tipo de selectividad en el inciso c.

- Selectividad por control de movimiento molecular: este tipo de selectividad se da en sistemas en los que la zeolita presenta poros de diferentes tamaños, esta situación hace que los reactivos y productos puedan acceder y salir de forma dirigida por cada uno de los tipos de poros.

En la figura 3 se ilustran 3 de los 4 tipos de selectividad.

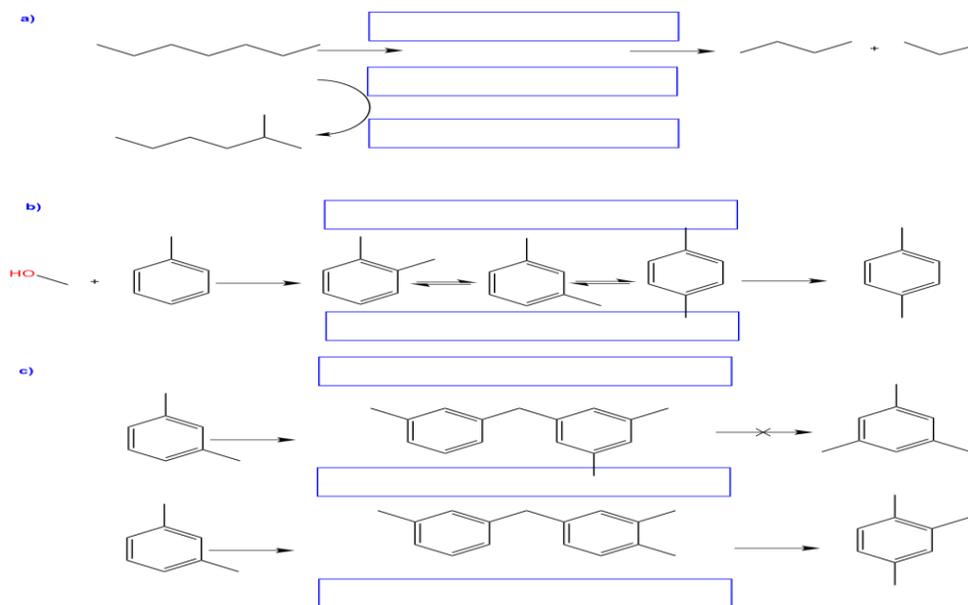


Figura 4 Tipo de Selectividad de poros
(Uso de las zeolitas, 2016)



Capítulo 2 Antecedentes

Simulación de procesos

La simulación es la representación de un proceso mediante modelos matemáticos, lógicos o físicos que al integrarse arrojan información sobre el comportamiento de las variables de proceso.

Una simulación de proceso puede ayudar al análisis y predicción del estado estacionario o el efecto de algún cambio en las condiciones de operación. Es útil para la optimización del proceso en cuanto a producción, uso de servicios y de costos de operación.

Tipos de simulación.

Existen 2 tipos o modalidades de simulación con características específicas a saber:

Simulación en estado estacionario: este tipo de simulación permite el modelado de las operaciones a régimen permanente. En otras palabras modela el proceso considerando que todas las corrientes de proceso y condiciones de operación permanecen constantes durante todo el periodo de operación.

Simulación dinámica: Este tipo de simulación permite el modelado de sistemas en los cuales las variables y flujos de proceso son variables con el tiempo (régimen transitorio). En cuanto a sus aplicaciones, es adecuada para simular el arranque y paro de la planta, producción en lotes, semi-lotes, realizar análisis dinámico e idear sistemas de control y sistemas de seguridad.

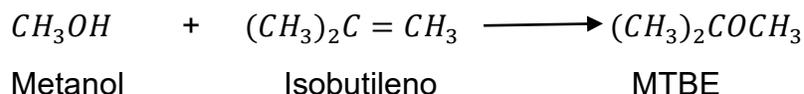


En una simulación se debe resolver una gran cantidad de ecuaciones simultáneamente. Se han creado softwares especializados para este tipo de proyectos. Estos softwares son los llamados simuladores de proceso. Algunos de estos simuladores de procesos son: Aspen Plus, Aspen Hysys, Pro II etc. En este trabajo se usó el simulador Aspen Plus versión 8.8.

Reacciones de producción de MTBE.

El MTBE se produce por una simple reacción de adición del metanol al Isobutileno sobre la superficie del catalizador, el cual es una resina de intercambio iónico descrita en la sección anterior. El esquema de reacción es el siguiente³.

Reacción principal.

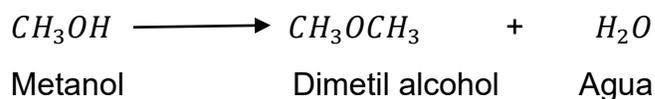


Reacciones secundarias.

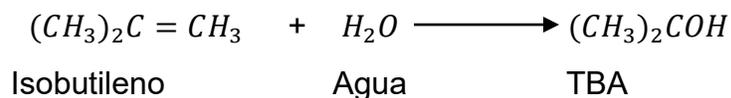
Dimerización de isobutileno



Deshidratación de Metanol.



Hidratación de isobutileno



³ (Espitia, 1998)



Modelos termodinámicos

Para todas las simulaciones de proceso es necesario disponer de ciertos valores de propiedades físicas y termodinámicas de los componentes que circulan por cada equipo, en cada una de las condiciones de presión, temperatura y composición a las que han de ser manipuladas las corrientes. Para ello es que se necesitan modelos que permitan predecir esos valores.

Pero la disponibilidad de estos modelos no representa gran problema, sino más bien la correcta selección del modelo adecuado para el proceso, es decir que no importa la robustez del simulador, si la elección del método de predicción no es la adecuada los resultados de la simulación estarán alejados de lo que sucede en el proceso real.

Termodinámica de equilibrio

El equilibrio entre 2 fases, sin reacción química, se caracteriza por 3 condiciones:

1. Equilibrio térmico: temperatura igual en ambas fases.
2. Equilibrio mecánico: presión igual en ambas fases.
3. Equilibrio de fase: igualdad de fugacidad de cada componente en cada fase.

Con respecto a este último punto, la termodinámica, provee métodos y modelos para el cálculo de fugacidades a partir de las condiciones de proceso. Entre estos las ecuaciones de estado, que relacionan la presión, la temperatura, el volumen molar y la composición de las corrientes de proceso. Entre las principales ecuaciones de estado consideradas por el simulador Aspen están.



- Soave-Redlich-Kwong (SRK)
- Peng-Robinson (PR)

Otra forma de evaluar fugacidades es a través del cálculo de al comportamiento de solución ideal. Para ello se calculan los coeficientes actividad de cada componente a partir de modelos de solución. Entre estos modelos podemos mencionar:

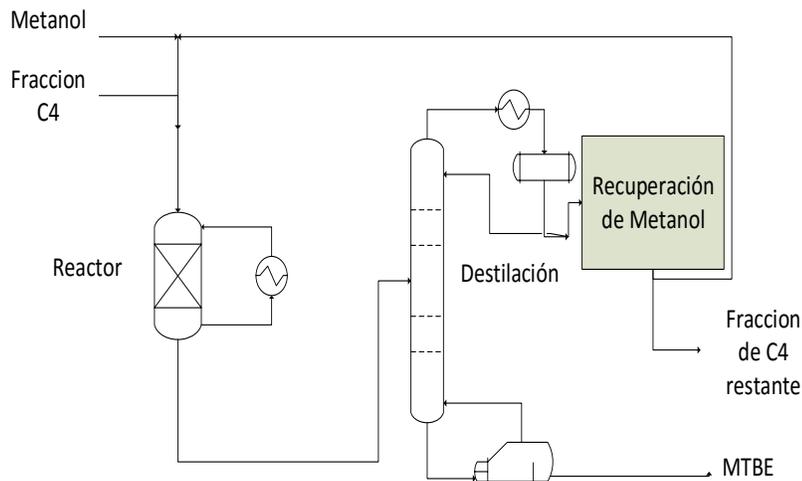
- Ecuación de Wilson
- Ecuaciones de Margules
- Modelo Non Random Two Liquids (NRTL)
- Modelo UNiversal QUAsi Chemical (UNIQUAC)
- Modelo UNIquac Functional group Activity Coefficient (UNIFAC)

Procesos de producción de Éteres.

En la actualidad la producción de éteres para uso comercial es una necesidad inherente para la sociedad, por ello es que a través de los años se han propuesto diferentes procesos industriales para su producción. A continuación se describirán algunas tecnologías posibles.

Proceso Snamprogetti

Este es el más antiguo de los procesos de producción de éteres el cual consta de un solo reactor catalítico, en el cual se controla la temperatura mediante la refrigeración con agua. La separación de los productos de reacción se realiza en una sola columna de destilación.



*Figura 5 Proceso Snamprogetti
(Procesos industriales para la obtención de MTBE, 1993)*

Proceso EL Erdöchemie/Lurgi

Usa 2 reactores de lecho fijo en serie y 2 columnas de adsorción. El metanol restante de la reacción que sale del reactor junto con la fracción de C4 se adsorbe en una columna y posteriormente se desorbe para reutilizarlo.

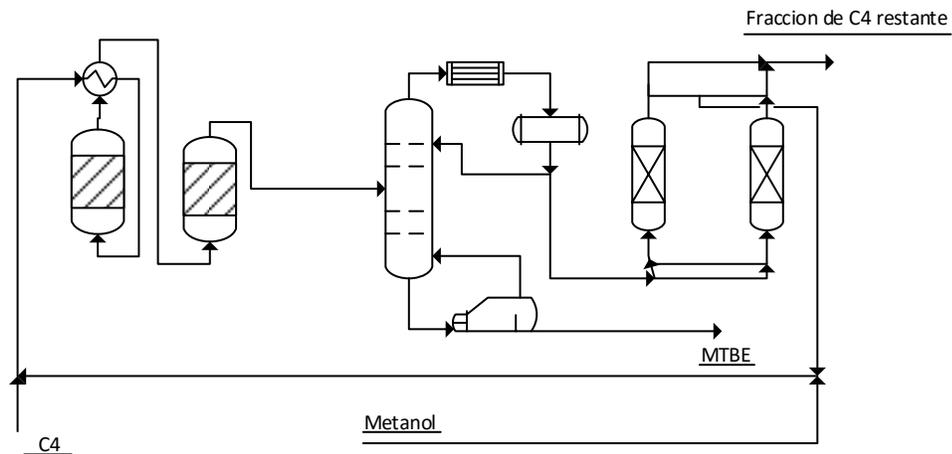


Figura 6 Proceso Erdöchemie/Lurgi
(Procesos industriales para la obtención de MTBE, 1993)

Proceso IFP (Instituto Francés del Petróleo)

Usa 2 reactores, uno de lecho expandido y otro de lecho fijo. Además, usa 2 columnas, una de destilación y la otra de absorción. En la columna de destilación se separa el MTBE y en la de absorción se recupera el metanol sobrante mediante un lavado químico con amina.

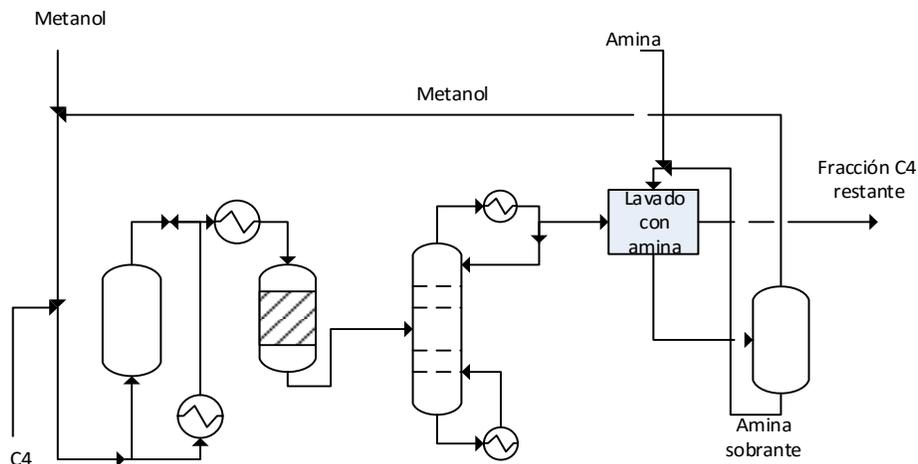


Figura 7 Proceso IFP
(Procesos industriales para la obtención de MTBE, 1993)

Proceso UOP/Hüls

Este proceso usa 2 tipos de reactores en serie, el primero es uno tubular, y el segundo es un reactor de lecho fijo. Además este proceso contiene una serie de pasos para la separación de los productos. Primero se separa el MTBE de la fracción sobrante de C4 y el Metanol sobrante en una columna de destilación, posteriormente se absorbe el metanol con agua de proceso en una columna de absorción para separarlo del gas. Finalmente se recupera el metanol para reutilizarlo en el proceso.

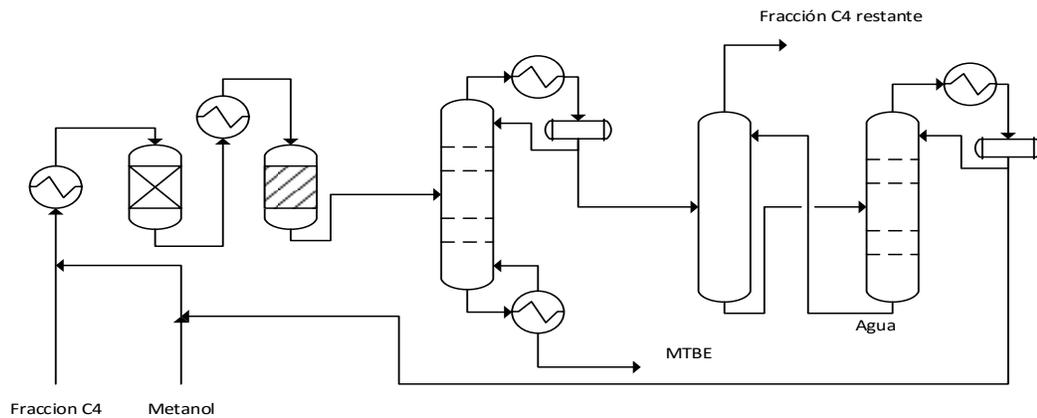


Figura 8 Proceso UOP/Hüls

(Procesos industriales para la obtención de MTBE, 1993)

Proceso CR&L (Chemical Research and Licensing Company)

En este proceso la reacción química y la separación de productos se dan en un mismo equipo. Esto hace que solo se requieran 3 equipos esenciales: la torre catalítica, la torre de lavado de metanol y la torre de destilación para la recuperación de metanol.

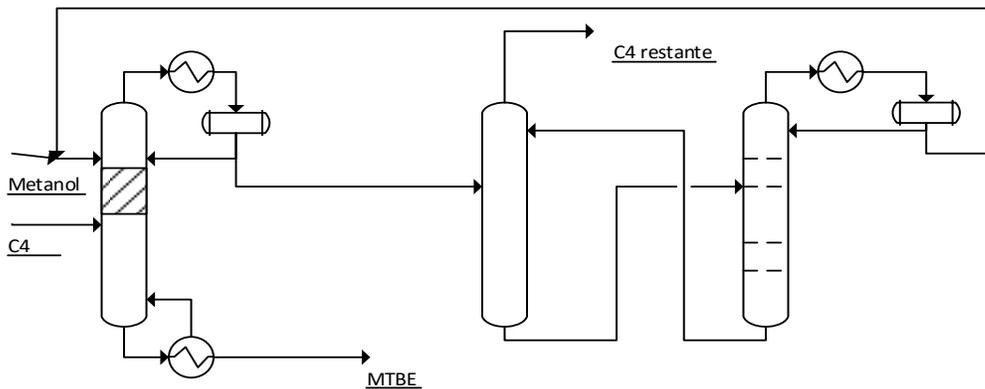


Figura 9 Proceso CR&L
(Procesos industriales para la obtención de MTBE, 1993)

Proceso Ethermax (UOP)

Este proceso agrega una ligera modificación al proceso anterior. Un reactor de lecho fijo realiza parte de la reacción antes de la torre catalítica donde se completa la reacción de producción del MTBE y lo separa. De esta forma la torre catalítica es más pequeña.

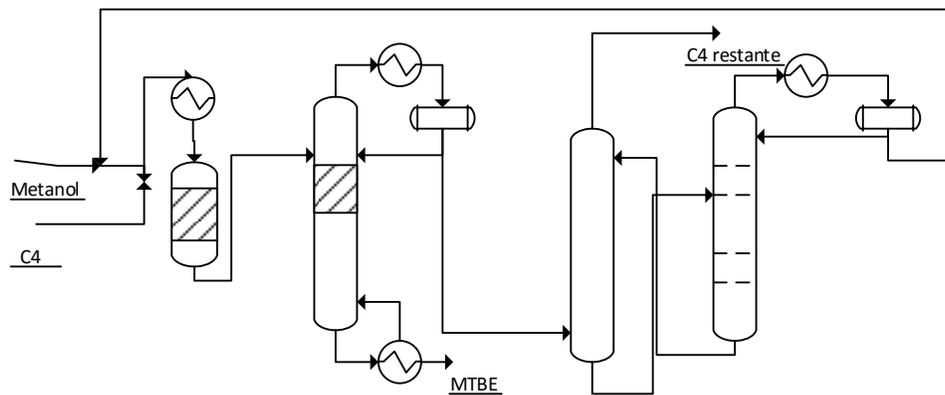


Figura 10 Proceso Ethermax
(Procesos industriales para la obtención de MTBE, 1993)

La planta de producción de MetilTertButil Éter ubicada en la Refinería Gral. Lázaro Cárdenas en Minatitlán Veracruz está diseñada con las especificaciones del proceso Ethermax. Por ello el presente trabajo contempla la simulación de dicho proceso. El proceso está ilustrado en las figuras 12 a 14..

Metodología

La metodología de este proyecto consiste en cinco pasos, los cuales son:

1. Recopilación de información: esta parte consiste en recopilar toda la información necesaria para introducir al simulador de procesos. Desde la correcta selección del modelo termodinámico, hasta las especificaciones de corrientes de alimentación y equipos.
2. Análisis de proceso: este paso consiste en analizar cada uno de los equipos, las consistencias de las corrientes de alimentación, las operaciones unitarias realizados para la obtención de producto y las condiciones y pureza de los productos.



3. Simulación del proceso: esta parte consiste en la introducción de los datos recopilados para simular el proceso de obtención de MTBE.
4. Análisis de resultados: aquí es donde se extraen los datos de la simulación resultantes y se comparan con los datos diseño del proceso..
5. Conclusiones y recomendaciones: en este punto y con ayuda del análisis realizado, se dirá si la simulación es válida, cuales son las diferencias y similitudes con los datos de diseño y se emitirá un juicio de valor que mencione cuales son los posibles cambios a realizar en el proceso para mejorarlo.

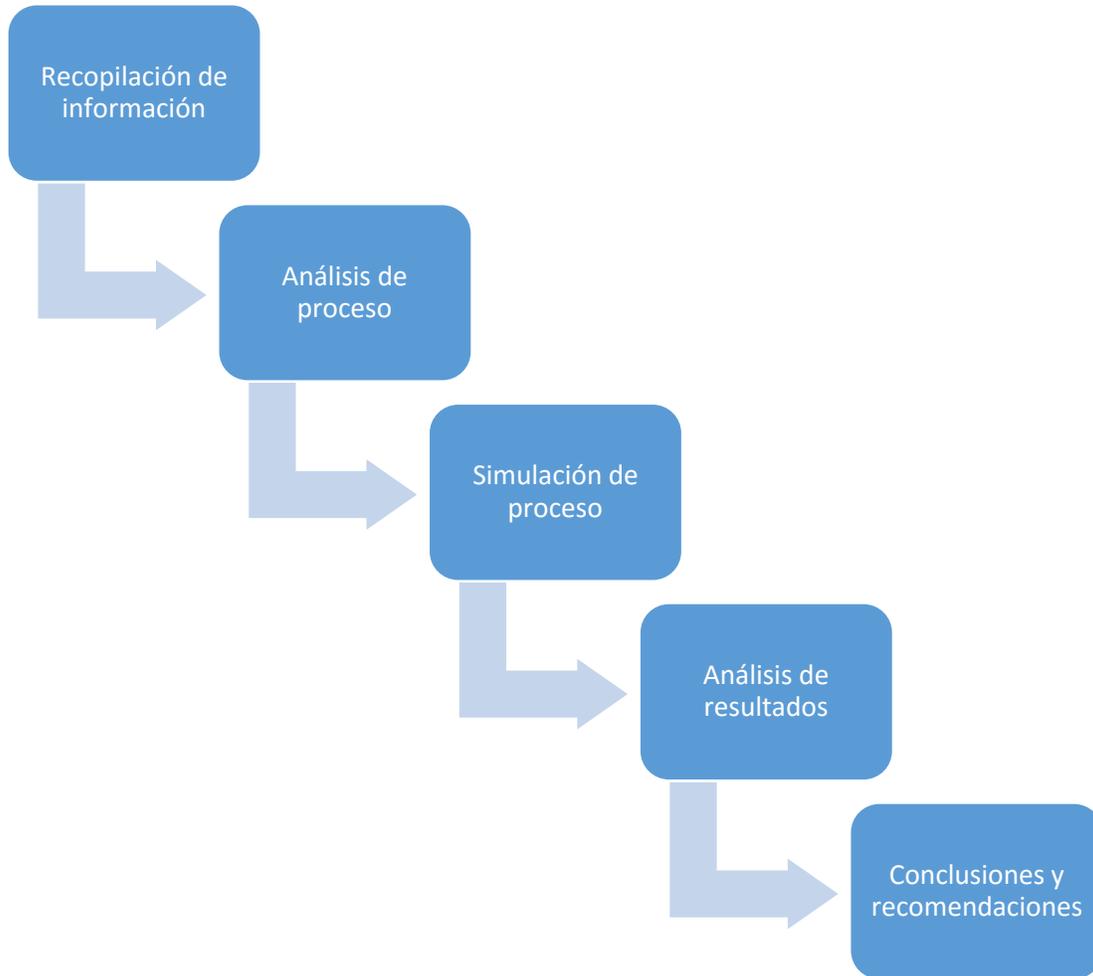


Figura 11 Metodología de simulación

Diagrama de proceso.

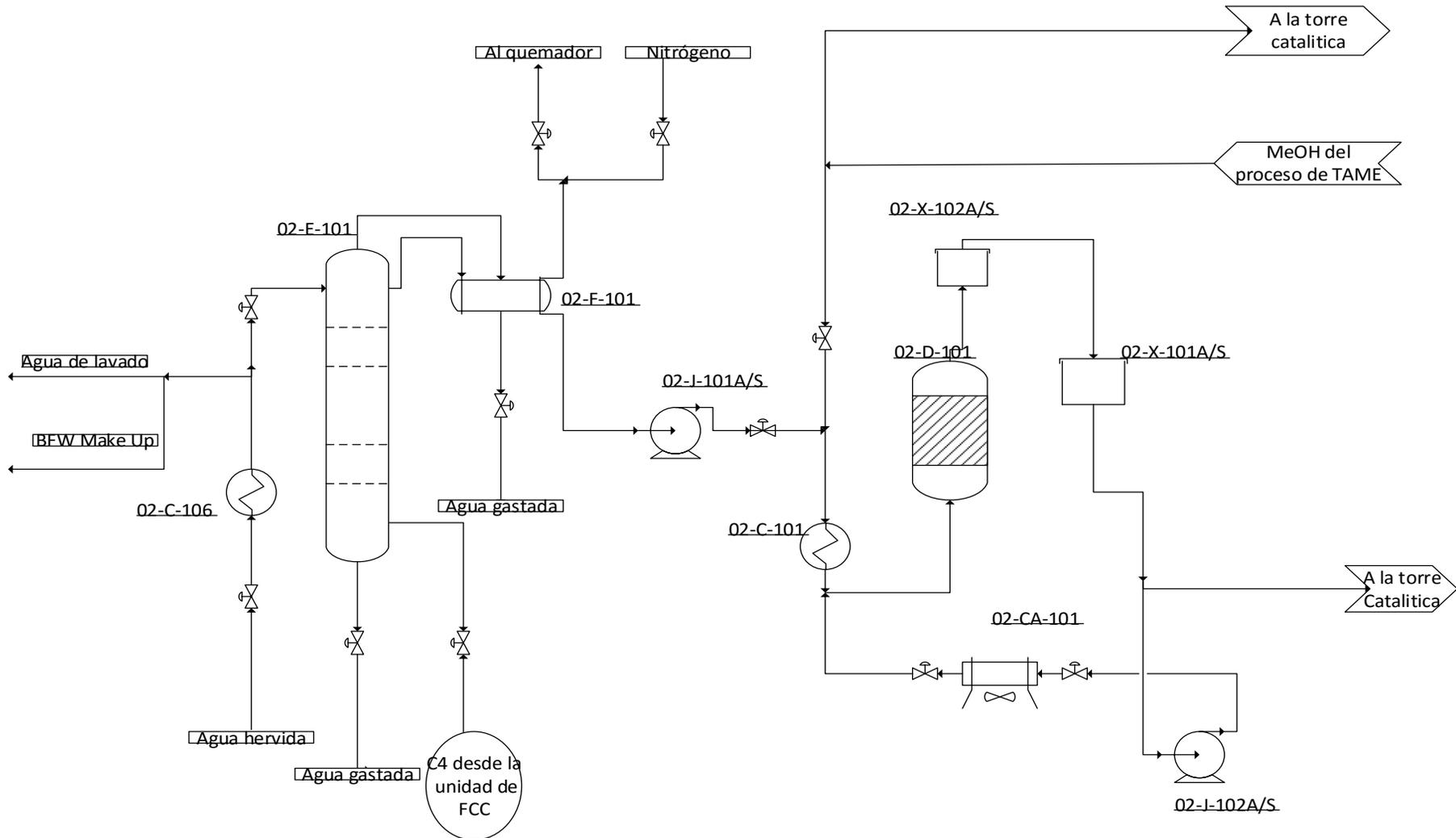


Figura 12 Zona de reacción principal
(PIPING AND INSTRUMENT DIAGRAM FOR MTBE/TAME PROJECT SALINA CRUZ)

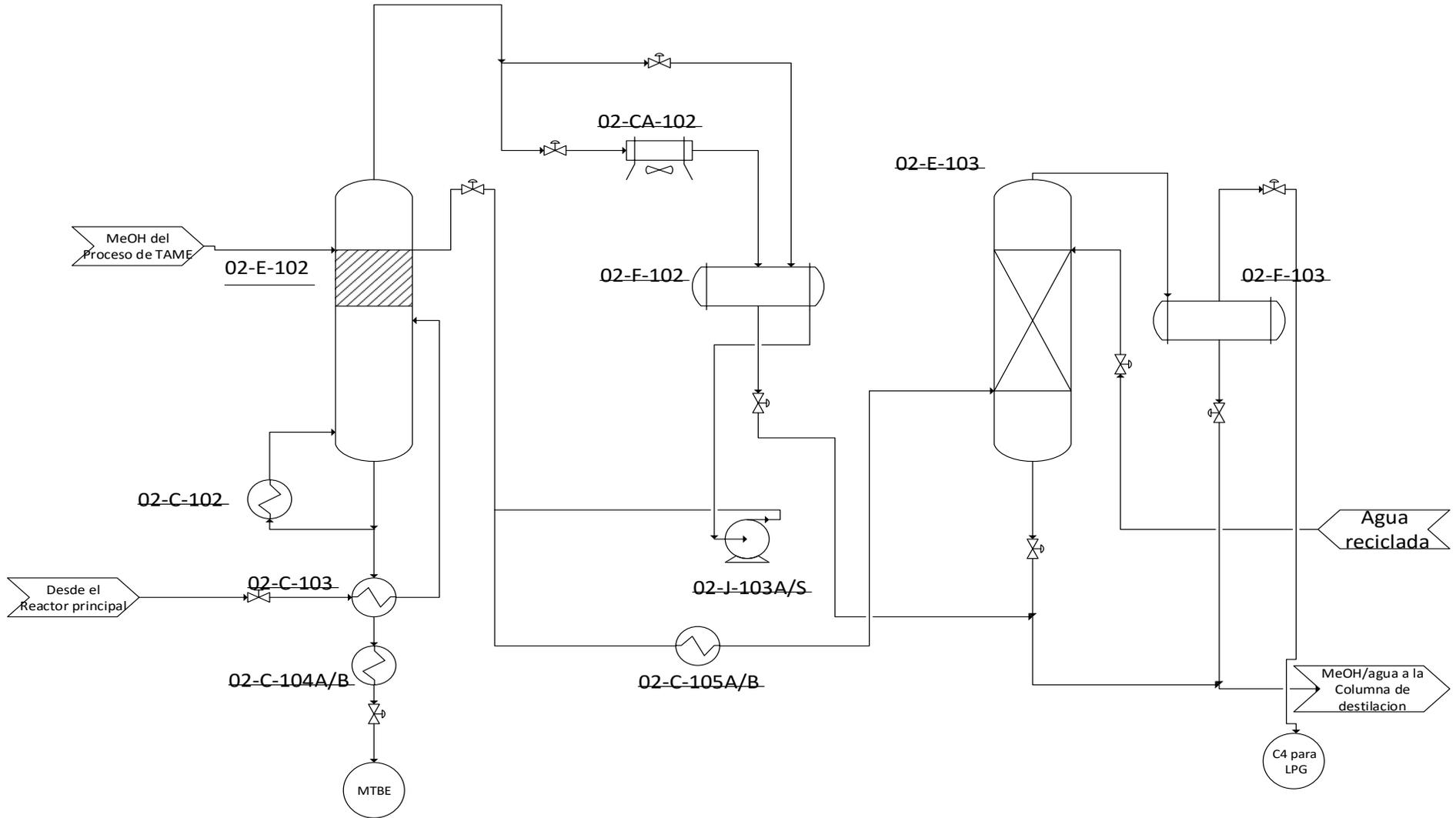


Figura 13 Zona de Destilación Catalítica
(PIPING AND INSTRUMENT DIAGRAM FOR MTBE/TAME PROJECT SALINA CRUZ)

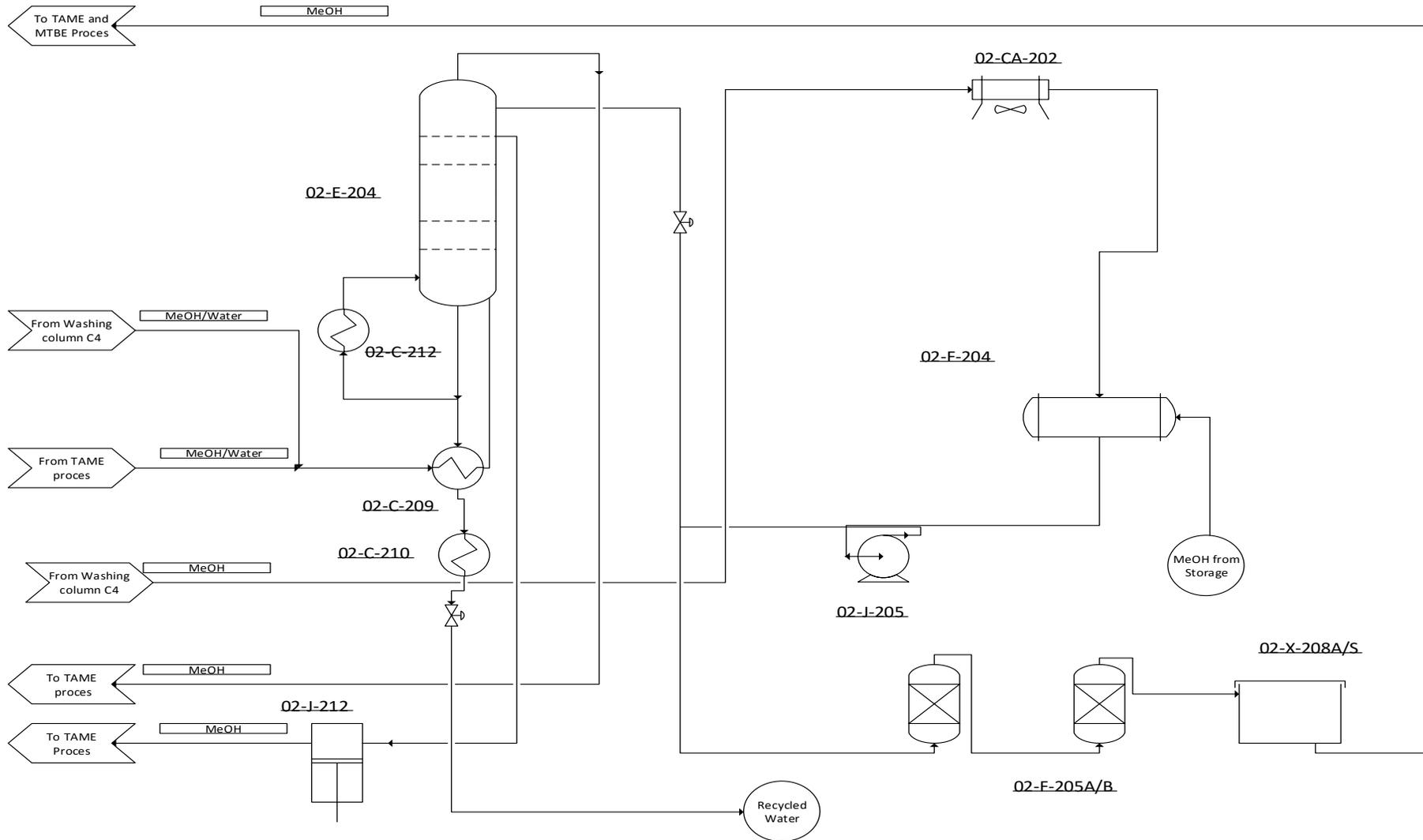


Figura 14 Zona de recuperación de Metanol
(PIPING AND INSTRUMENT DIAGRAM FOR MTBE/TAME PROJECT SALINA CRUZ)1



Descripción de proceso.

La planta de producción de MTBE cuenta con 3 diferentes secciones, en las cuales se llevan a cabo los procesos para purificar las materias primas, reaccionar y separar los productos de reacción. Hay que mencionar que la planta de producción de MTBE se encuentra a un lado de la planta productora de TAME o metil ter amil eter, el cual es también un éter usado como aditivo para gasolinas. Por ello en este texto se hará referencia a él en ocasiones próximas.

Sección de purificación.

Está pensada para la eliminación de contaminantes que pueden envenenar al catalizador, como son el cloruro de sodio, hidróxido de sodio, mono etanol amina, dietil amina, dietilformamida, n-etil pirrolidina, acetonitrilo, sales de amonio, y beta-metoxypionitrilo.

La corriente de agua para lavado entra al proceso a una temperatura de 100°C y $26.7\text{Kg}/\text{cm}^2$, pasa a través de una válvula, la cual reduce su presión a $8.5\text{Kg}/\text{cm}^2$ y posteriormente pasa por el intercambiador 02-C-106 A/B que disminuye su temperatura a 38°C . La corriente se divide y un 76.46% de la corriente original es enviada hacia el proceso de producción TAME. El resto se introduce a la torre de lavado 02-E-101 en el plato 30, pasando previamente por una válvula para reducir su presión a $6.3\text{Kg}/\text{cm}^2$. Esta columna cuenta con 30 platos.

Por otro lado la corriente de alimentación de C4 entra al proceso con una presión de $7.2\text{Kg}/\text{cm}^2$ y una temperatura de 38°C , cruza una válvula la cual reduce su presión a $6.2\text{Kg}/\text{cm}^2$ y entra en el plato 1 de la columna.



El agua resultante de la purificación es enviada a tratamiento para posteriormente ser reutilizada en el proceso. La mezcla de C4 se envía a un tanque flash a 38°C y $3.5\text{Kg}/\text{cm}^2$ para eliminar los residuos de humedad. Después es enviada a la sección de reacción, no sin antes ser comprimida a $21.7\text{Kg}/\text{cm}^2$. Una vez a esas condiciones se mezcla con la corriente de metanol proveniente del proceso de TAME con un caudal de $1711\text{Kg}/\text{h}$. El caudal de metanol se divide para proveer $1571\text{Kg}/\text{h}$ al reactor principal y el resto a la columna catalítica.

Sección principal de reacción

Una gran parte de la conversión de isobutileno se lleva a cabo en el reactor principal 02-D-101.

Antes de la entrada al reactor la corriente de C4 mezclada con el metanol pasa por un calentador que acondiciona la corriente a 36.8°C y $21.2\text{Kg}/\text{cm}^2$. Esta corriente se mezcla con la recirculación de la salida del reactor que se encuentra a una temperatura de 74.5°C y presión de $21.3\text{Kg}/\text{cm}^2$.

Ya mezcladas las alimentaciones del reactor la corriente entra al reactor donde se lleva a cabo la reacción de producción de MTBE además de las reacciones paralelas. La corriente de salida del reactor se divide para dar origen a una recirculación del 60% masa que irá dirigida a la entrada del reactor. La recirculación pasa por un enfriador de aire que disminuye su temperatura a 74.5°C .

Sección de torre catalítica.

La corriente producto del reactor 02-D-101 se precalienta con la corriente de fondos de la columna catalítica 02-E-102, hasta una temperatura de 75.5°C y presión de



9.9Kg/cm², mediante el intercambiador proceso-proceso 02-C-103. Posteriormente se alimenta a la Columna Catalítica 02-E-102.

La columna 02-E-102 cuenta con 58 platos, un condensador total y un rehervidor.

Estos platos se dividen de la siguiente manera:

1. Enriquecimiento: platos 1 a 11
2. Reacción: platos 12 a 18
3. Agotamiento: platos 19 a 58

La alimentación de la corriente proveniente del reactor entra en la etapa 36 de la columna, y la corriente restante de metanol proveniente del proceso de TAME es alimentada sobre la etapa 12, lo cual garantiza el contacto de ambos reactivos en la sección de reacción.

En los fondos de la columna es obtenido el MTBE, el cual es enfriado en el intercambiador 02-C-103 hasta 100°C y 9.1Kg/cm². Posteriormente entra en el enfriador 02-C-104 A/B y alcanza una temperatura de 38°C y presión de 3.6Kg/cm², listo para enviarlo a almacenamiento con la gasolina. En el domo de la columna 02-E-102 se obtienen el resto de C4 y metanol que no reaccionó. Esta corriente es enviada al intercambiador 02-C-105 A/B en el cual se enfría a 38°C y presión de 12.5Kg/cm² para llevarla a recuperación de metanol.



Sección de lavado de metanol.

Debido a que la corriente de domos de la columna catalítica se encuentra saturada de metanol, este debe de ser recuperado y reutilizado. La recuperación del metanol se lleva a cabo en la columna 02-E-103.

La columna 02-E-103 cuenta con 30 platos. La corriente de C4 y metanol entra a la torre de lavado en la etapa número 1 y el agua de lavado proveniente del proceso de TAME es alimentado en la etapa 30. La corriente de C4 libre de metanol es llevada a almacenaje con una temperatura de 38°C y una presión de 6.6Kg/cm² para venderla como gas licuado LPG. La corriente de metanol y agua es llevada a la zona de recuperación de metanol a temperatura de 38°C y presión de 4.9Kg/cm².

Sección de recuperación de metanol.

Aunque esta sección se encuentra en la planta de producción TAME es una parte importante en la producción de MTBE. Por ello es necesario describir el proceso en esta sección.

En esta sección las corrientes de metanol-agua provenientes de la producción de TAME; con flujo de metanol 1526Kg/h, flujo de agua 343Kg/h, a 38°C y 6.9Kg/cm²; se une a la corriente de metanol y agua del proceso de MTBE, formando una corriente que es precalentada en el intercambiador 02-C-209 A/B hasta 107°C y 6.1Kg/cm², para ser alimentada en la columna 02-E-204. La columna 02-E-204 cuenta con 42 platos, un condensador total y un rehervidor. Se alimenta en la etapa 25. La corriente de domos es extraída y llevada al proceso de TAME para aprovechar su energía y es regresada al condensador. Además, una corriente extra es extraída desde la etapa 21, para ayudar a uno de los impulsores de las bombas



usados en el proceso de TAME. Posteriormente, esta última corriente es dirigida al intercambiador al cual fue enviada la corriente de domos en el proceso de TAME. Posteriormente es regresada al condensador. Al final esta corriente lleva en un tanque flash donde se inyecta la corriente nueva de metanol. En cambio, los fondos son enfriados para poder reutilizarlos en los procesos de refinación de C4.

Modelos matemáticos para simulación.

Columnas de lavado de la fracción C4 (02-E-101)

Para la columna de lavado se consideró la operación de manera isotérmica y que, en las etapas de transferencia, las fases líquidas se encuentran en equilibrio termodinámico.

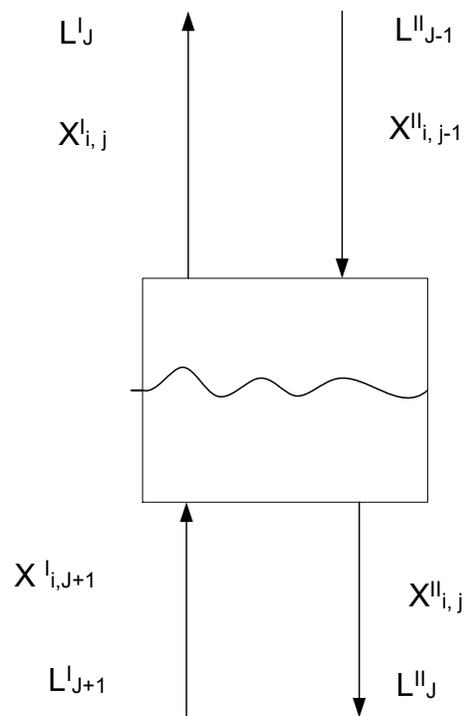


Figura 15 Etapa de transferencia del extractor Líquido-Líquido (TREYBAL, 1968)

Balace de masa General

$$L_J^I + L_{J-1}^{II} = L_{J+1}^I + L_J^{II} \quad \text{Ec 1.1}$$



Balance de masa por componente

$$L_j^I X_j^I + L_{j-1}^{II} X_{j-1}^{II} = L_{j+1}^I X_{j+1}^I + L_j^{II} X_j^{II} \quad \text{Ec 1.2}$$

Equilibrio de Fases

El equilibrio de fase es descrito por la relación de concentración de componentes clave entre los 2 solventes. Ya que la temperatura a través de las columnas es constante, que no se presentan cambios moleculares en los solventes ni soluto en ninguno de los puntos en el la columna, que la disociación de solutos es de un 100% y que el pH de los disolventes es un parámetro controlado antes de la operación de la columna, la expresión del equilibrio de reparto líquido-líquido se expresa de la siguiente manera⁴.

$$K_j^{L-L} = X_i^I / X_i^{II} \quad \text{Ec 1.3}$$

⁴ (TREYBAL, 1968)

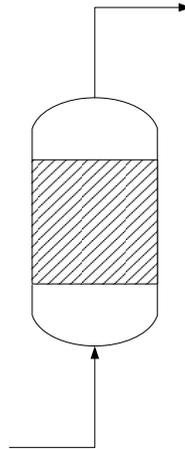
Reactor principal (02-D-101)

Figura 16 Reactor
(FOGLER, 2001)

El balance de masa para el reactor esta descrito por:

$$\left[\begin{array}{l} \text{velocidad de flujo} \\ \text{de A a la entrada} \\ \text{del reactor} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{Consumo de A} \\ \text{dentro del reactor} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de flujo} \\ \text{de A a la salida} \\ \text{del reactor} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{flujo de acumulación} \\ \text{dentro del reactor} \end{array} \right]$$

Ec 2.1

En régimen permanente esta ecuación se reduce a:

$$\left[\begin{array}{l} \text{velocidad de flujo} \\ \text{de A a la entrada} \\ \text{del reactor} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{consumo de A} \\ \text{en el reactor} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de flujo} \\ \text{de A a la salida} \\ \text{del reactor} \end{array} \right] \quad \text{Ec 2.2}$$

Cuando cambiamos los términos por las variables del proceso se obtienen las siguientes ecuaciones⁵:

⁵ (FOGLER, 2001)



$$F_{A0} - F_A(X_A) = F_A \quad \text{Ec 2.3}$$

$$F_A = F_{A0}(1 - X_A) \quad \text{Ec 2.3.1}$$

En donde F_{A0} es el flujo molar de "A" a la entrada del reactor, F_A es el flujo molar de A la salida y X_A es la es la conversión del componente A definida mediante la siguiente ecuación:

$$X_A = \frac{\text{moles de A que reaccionaron}}{\text{moles de A alimentados al reactor}} \quad \text{Ec 2.4}$$

La ecuación diferencial que expresa la velocidad de reacción en términos de la masa de catalizador es la siguiente:

$$-\frac{dF_A}{dW} = -r_A \quad \text{Ec 2.5}$$

donde

W : Masa de catalizador

$-r_A$: Velocidad de reacción

Si derivamos la ecuación 2.3.1 e igualamos con la ecuación 2.5 obtenemos:

$$F_{A0} \frac{dX_A}{dW} = -r_A \quad \text{Ec 2.6}$$

Finalmente separando variables tenemos que la ecuación de diseño de un reactor empacado está dada por:



$$\frac{dW}{F_{A0}} = \frac{dX}{-r_A} \quad \text{Ec 2.7}$$

El balance de energía para el reactor se expresa de la siguiente manera.

$$\left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación de} \\ \text{energía en el sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{flujo de entrada} \\ \text{de energía al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{flujo de salida} \\ \text{de energía al sistema} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{l} \text{consumo o desprendimiento} \\ \text{de enegía por reacción} \\ \text{química} \end{array} \right]$$

Ec 2.8

Expresando esta ecuación en términos matemáticos tenemos⁶:

$$\sum_j m_j c_{pj} \frac{dT}{dt} = \sum_j F_{j0} (H_{j0} - H_j) + W \sum_i (-\Delta H_i) [-r_i(T, X_j)] + A_K U (Tr - T) \quad \text{Ec 2.9}$$

El término $\sum_j m_j c_{pj} \frac{dT}{dt}$ representa la acumulación de energía en el reactor.

$A_K U (Tr - T)$ es la energía que se extrae o ingresa al reactor a través de las paredes del reactor. $\sum_j F_{j0} (H_{j0} - H_j)$ es la diferencia de energía entre el flujo de entrada y

salida del reactor, y el termino $W \sum_i (-\Delta H_i) [-r_i(T, X_j)]$ es el termino de generación de energía por reacción.

Los símbolos empleados en esta ecuación se describen a continuación.

m_j : es el flujo de cada componente.

c_{pj} : es la capacidad calorífica da cada componente.

⁶ (FOGLER, 2001)



F_{j0} : es el flujo de entrada de cada componente.

H_{j0} : es la entalpia de entrada de cada componente al reactor.

H_j : es la entalpia de salida de cada componente al reactor.

W : es la masa de catalizador.

$(-\Delta H_i)$: es el calor de reacción de cada reacción que se lleva a cabo.

$[-r_i(T, X_j)]$: es la velocidad de generación o consumo de componente i.

A_k : es el área de contacto del reactor con el ambiente.

U : es el coeficiente de transferencia de energía entre el reactor y el ambiente.

$(T_r - T)$: es la diferencia de temperaturas entre el reactor y el ambiente.

Ya que el reactor opera a régimen permanente y de forma adiabática, los términos de acumulación de energía y calor hacia el ambiente quedan anulados, quedando:

$$\sum_j F_{j0} (H_{j0} - H_j) + W \sum_i (-\Delta H_i) [-r_i(T, X_j)] = 0 \quad \text{Ec 2.10}$$

Torre de destilación catalítica modelo RadFrac (02-E-102)

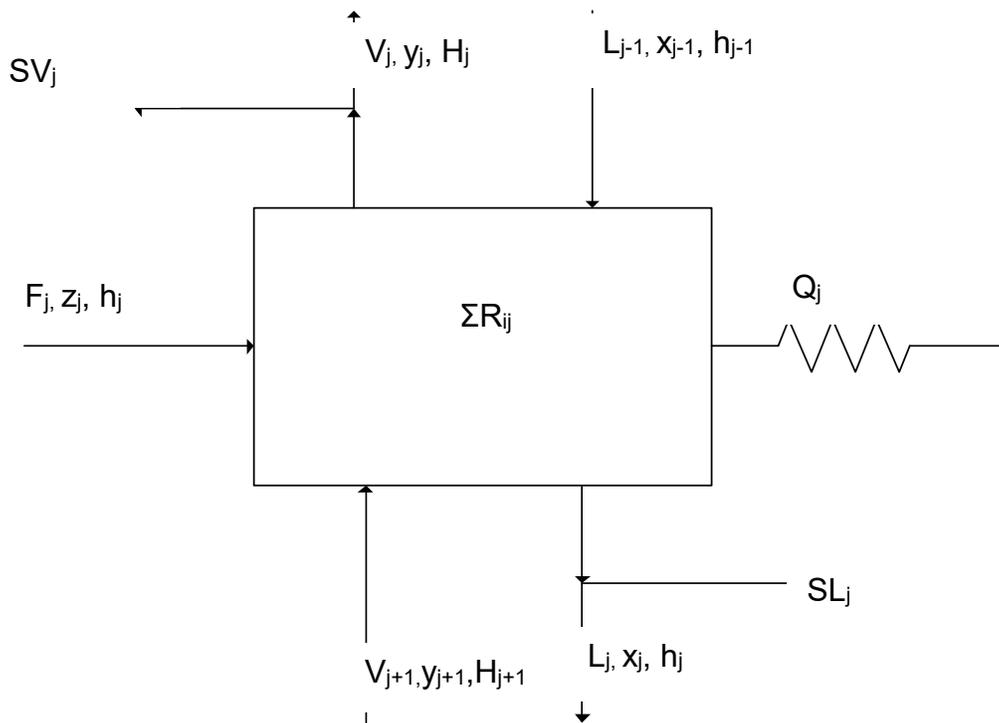


Figura 17 Platos al equilibrio de las torres de destilación
(C. WANKAT, 2008)

El balance general de materia tiene la siguiente forma.

$$\left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación de} \\ \text{materia en el sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{flujo de entrada} \\ \text{de materia al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{flujo de salida} \\ \text{de materia al sistema} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{l} \text{consumo o generación} \\ \text{de materia por reacción} \\ \text{química} \end{array} \right]$$

Ec 3.1

Agregando los términos matemáticos de cada elemento de la ecuación anterior conseguimos la siguiente ecuación⁷:

⁷ (C. WANKAT, 2008)



$$\frac{dM_j}{dt} = F_j + V_{j+1} + L_{j-1} - (V_j + SV_j) - (L_j + SL_j) + \sum R_{ij} \quad \text{Ec 3.2}$$

El balance de materia por componente se presenta de la siguiente manera:

$$\frac{d(M_j X_j)}{dt} = F_j z_j + V_{j+1} y_{j+1} + L_{j-1} x_{j-1} - (V_j y_j + SV_j y_j) - (L_j x_j + SL_j x_j) + \sum R_{ij} \quad \text{Ec 3.3}$$

En la torre de destilación 02-E-102 no existen pumparounds o splitters, por lo que los términos de SL y SV tienen un valor de cero. Además, la torre opera en régimen permanente, por lo que el balance se convierte:

$$V_j y_j + L_j x_j - V_{j+1} y_{j+1} - L_{j-1} x_{j-1} - \sum R_{ij} = F_j z_j \quad \text{Ec 3.4}$$

Las composiciones desconocidas de vapor y_j y y_{j+1} se pueden sustituir usando las ecuaciones de equilibrio liquido-gas⁸.

$$y_{ij} = \gamma_{ij} K_{ij} x_{ij} \quad \text{y} \quad y_{ij+1} = \gamma_{ij+1} K_{ij+1} x_{ij+1} \quad \text{Ec 3.5}$$

Donde los valores de K dependen de la temperatura y presión.

El balance de energía para cada plato en la torre de destilación queda como:

$$\left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación de} \\ \text{energía en el sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{flujo de entrada} \\ \text{de energía al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{flujo de salida} \\ \text{de energía al sistema} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{l} \text{consumo o desprendimiento} \\ \text{de enegía por reacción} \\ \text{química} \end{array} \right]$$

Ec 3.6

⁸ (C. WANKAT, 2008)



Expresándolo en variables:

$$\frac{d(M_j h_j)}{dt} = F_j h_j + V_{j+1} H_{j+1} + L_{j-1} h_{j-1} - (V_j + SV_j) H_j - (L_j + SL_j) h_j + \sum R_{ij} \Delta H_i \quad \text{Ec 3.7}$$

Ya que las corrientes SL y SV son iguales a cero y la torre opera a régimen permanente la ecuación de balance de energía queda expresada como:

$$F_j h_j = V_j H_j + L_j h_j - V_{j+1} H_{j+1} - L_{j-1} h_{j-1} - \sum R_{ij} \Delta H_i \quad \text{Ec 3.8}$$



Capítulo 3 refinería Gral. Lázaro Cárdenas

Refinería Lázaro Cárdenas en Minatitlán Veracruz.

La refinería Gral. Lázaro Cárdenas nace en el año de 1906 como la primera refinería en América latina. Actualmente esta refinería cuenta con 27 plantas industriales con un total de 800 hectáreas de terreno, donde se procesan diariamente 190,000 barriles de petróleo crudo, así como 30,000 barriles de mezcla de butanos.

Además de esto posee un anexo ubicado en la Cangrejera Veracruz, donde cuenta con 3 plantas que procesan diariamente 170,000 barriles de petróleo crudo tipo maya.

La producción de esta refinería está destinada para el consumo de la zona suroeste del país, así como parte del consumo de la Ciudad de México. Entre los estados que reciben los energéticos de la Refinería Gral. Lázaro Cárdenas se encuentran los siguientes: Puebla, sur de Veracruz, Tabasco, Campeche, Yucatán y Quintana Roo.



Figura 18 Ubicación de la Refinería Gral. Lázaro Cárdenas en Minatitlán Veracruz
(Google maps, 2016)

Destilación catalítica.

El proceso de destilación catalítica está diseñado para reacciones limitadas por el equilibrio. Un ejemplo de ello es la producción de MTBE. El proceso CR&L (Chemical Research and Licensing Company) integra por primera vez esta tecnología a la producción de ésteres, incrementando la eficiencia energética del proceso, pues el calor de reacción es utilizado para ayudar a la destilación.

La destilación catalítica presenta varios beneficios al proceso, algunos de ellos son los siguientes:

1. La reacción y separación de los productos se lleva a cabo en un solo equipo.
2. Es un proceso muy eficiente en el uso de reactivos y energía, haciendo que los costos de servicios y materia prima disminuyan considerablemente.

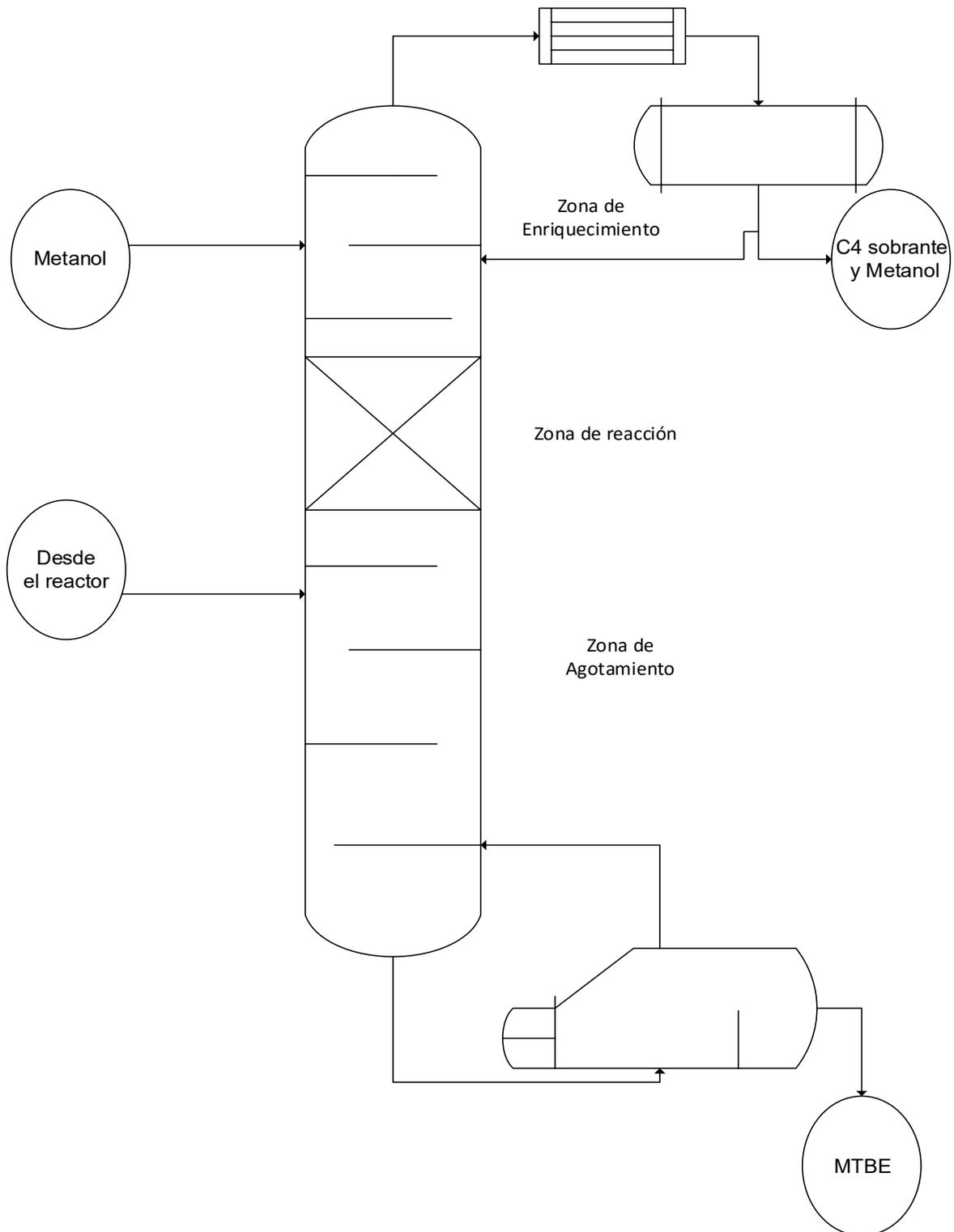


3. Mejora la conversión y selectividad de los productos y reactivos.
4. En caso de la aparición de inhibidores, el proceso puede removerlos continuamente del catalizador, aumentando su tiempo de vida.
5. Disminuye los costos operativos del equipo.

Para llevar a cabo el proceso de destilación reactiva es necesario reunir ciertas características operativas, entre estas características se encuentran las siguientes:

1. Volatilidades- es necesario que los reactivos se encuentren en la fase líquida. Por ello es necesario operar la zona catalítica en los platos en donde las concentraciones de los reactivos sea alta en la fase líquida. Además de que la concentración de los productos sea baja.
2. Tiempos de residencia- para que la reacción sea llevada a cabo conforme a la conversión especificada es necesario diseñar estas columnas conforme a los tiempos de residencia requeridos. Si una reacción requiere tiempos de reacción grandes se necesita diseñar la zona de reacción con volúmenes grandes de catalizador, y si requiere tiempos bajos de reacción es necesario diseñar la zona de reacción con volúmenes pequeños de catalizador.
3. Condiciones de operación- es posible que las condiciones de operación para la destilación (presión y temperatura) no sean las necesarias para operar la reacción y viceversa, por ello es necesario que en la fase de diseño de la columna se verifique que las condiciones necesarias para la destilación sean las mismas que para la reacción.

Esquema de la torre catalítica



Esquema 2 Torre Catalítica



Capítulo 4 simulación de la planta de MTBE

Secuencia de simulación de la planta de MTBE

Para realizar el presente trabajo se utilizó el simulador de procesos ASPEN PLUS versión 8.8, el cual cuenta con modelos precargados para la solución de operaciones unitarias. Además, de los algoritmos para la detección de ciclos y creación de conjuntos de corte para la solución de dichos ciclos.

Para la creación de la simulación fue necesario obtener la siguiente información:

1. Composición de las corrientes de alimentación, así como las condiciones de entrada de esta (presión y temperatura).
2. Diagrama de Flujo de Proceso para especificar la conectividad y secuencia de cada uno de los equipos.
3. Especificaciones principales de los equipos a simular. Estas especificaciones son: temperatura, presión, diámetro, longitud, no. de platos, etc.
4. Criterios de convergencia para la solución de ciclos.

Selección de modelo termodinámico

Uno de los requisitos para la simulación de la producción de MTBE. Es la selección de modelos termodinámicos para la generación de propiedades. Debido a que existe reacción química para la producción de MTBE y reacciones secundarias, también es necesario conocer la cinética de reacción para el modelaje del reactor y torre catalítica.

El modelo seleccionado para la simulación de este caso fue el modelo PSRK, una derivación de la ecuación de estado de Soave Redlich Kwong. Este modelo permite predecir tanto las interacciones entre compuestos no polares, polares e interacciones entre compuestos polares y no polares. Es una opción útil al momento de modelar las operaciones de producción, ya en la mayoría de estas se encuentran presentes tanto componentes no polares (fracción de C4) como componentes polares (MeOH, agua, MTBE, etc.).

En las figuras 19 a la 23 se muestra la comparación entre las predicciones del modelo PSRK contra datos experimentales en los equilibrios líquido-vapor y líquido-líquido para algunos pares presentes en el proceso de producción de MTBE.

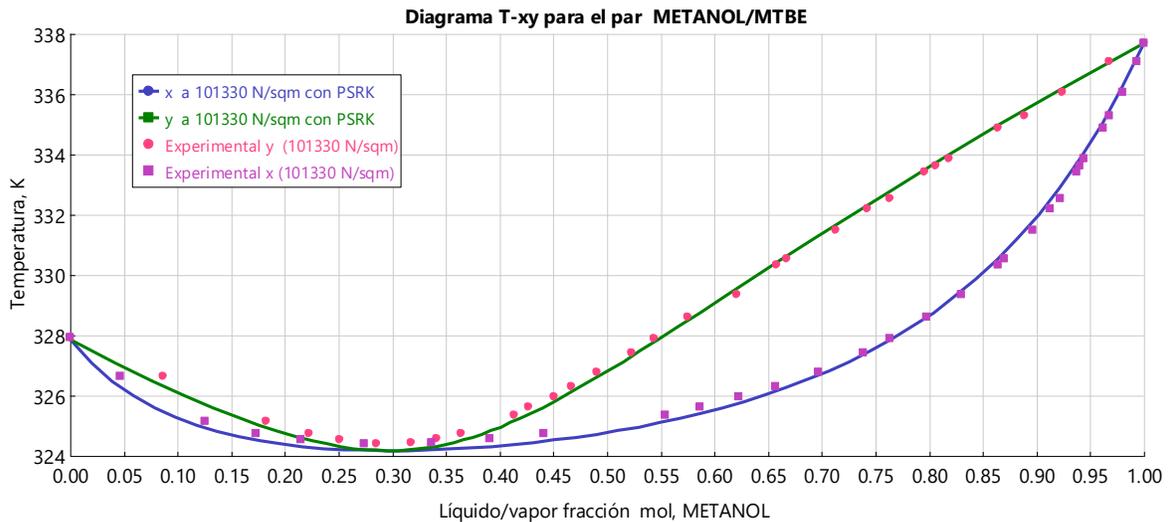


Figura 19 Diagrama T-xy para el par metanol-mtbe
(Toghiani, Toghiani, & Venkateswarlu, 1996)

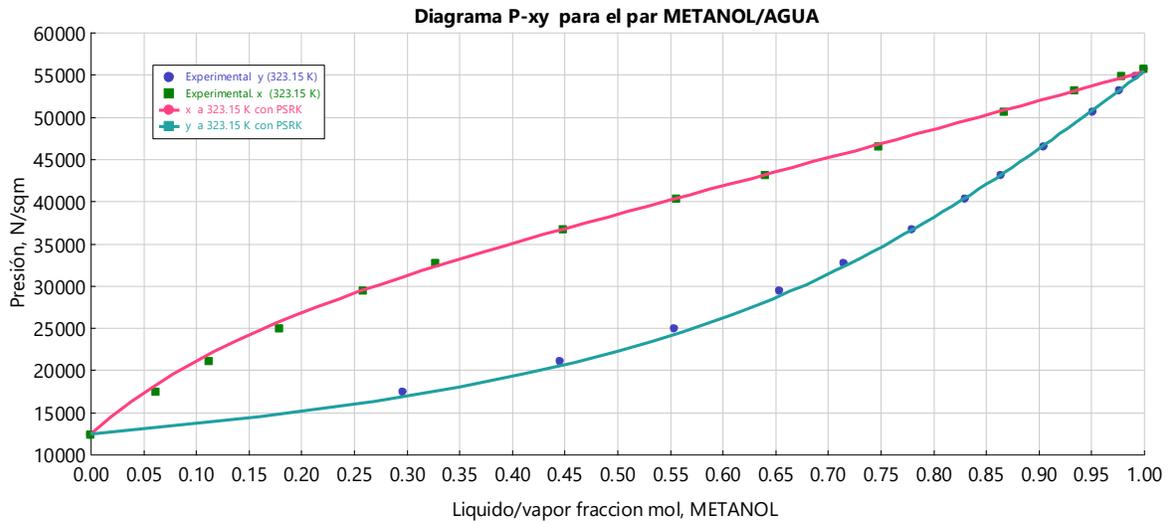


Figura 20 Diagrama P-xy para el par metanol-agua (Bernatova, Aim, & Wichterle, 2006)

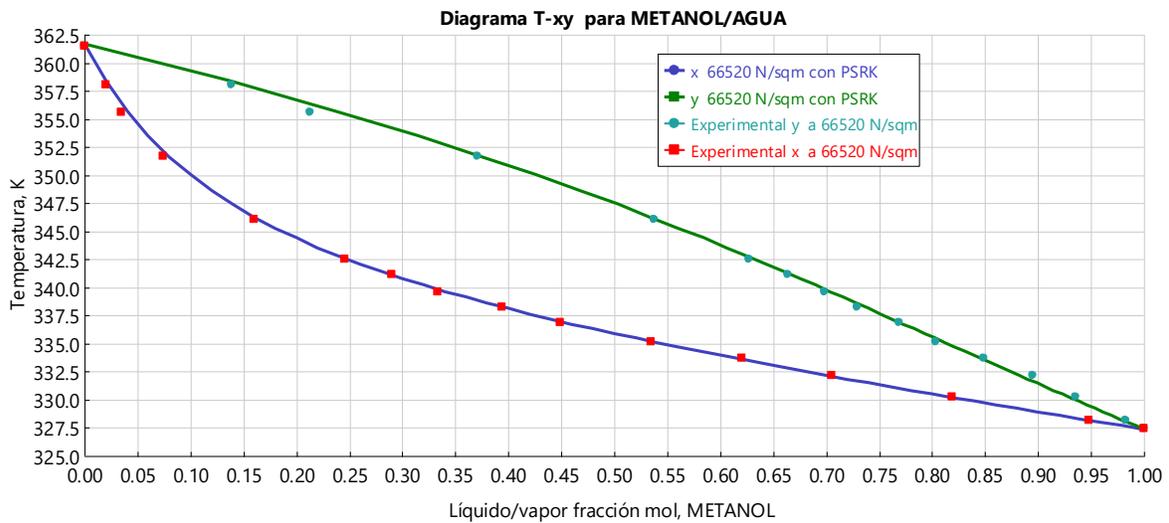


Figura 21 Diagrama T-xy para el par metanol-agua (Yang, Sun, Ma, Yin, & Zeng, 2012)

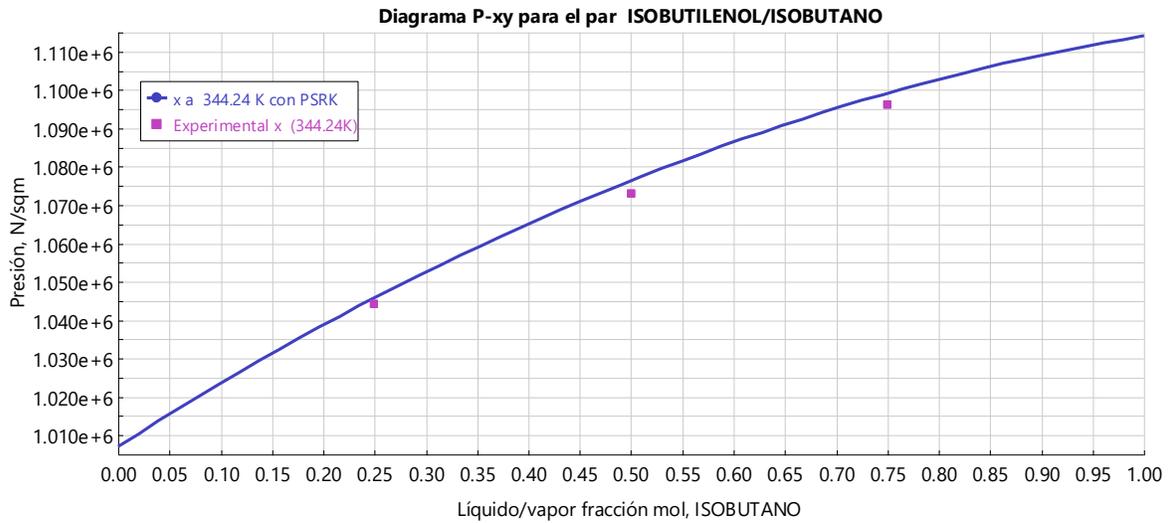


Figura 22 Diagrama P-x para el par isobutileno-isobutano (Martinez-Ortiz & Manley, 1978)

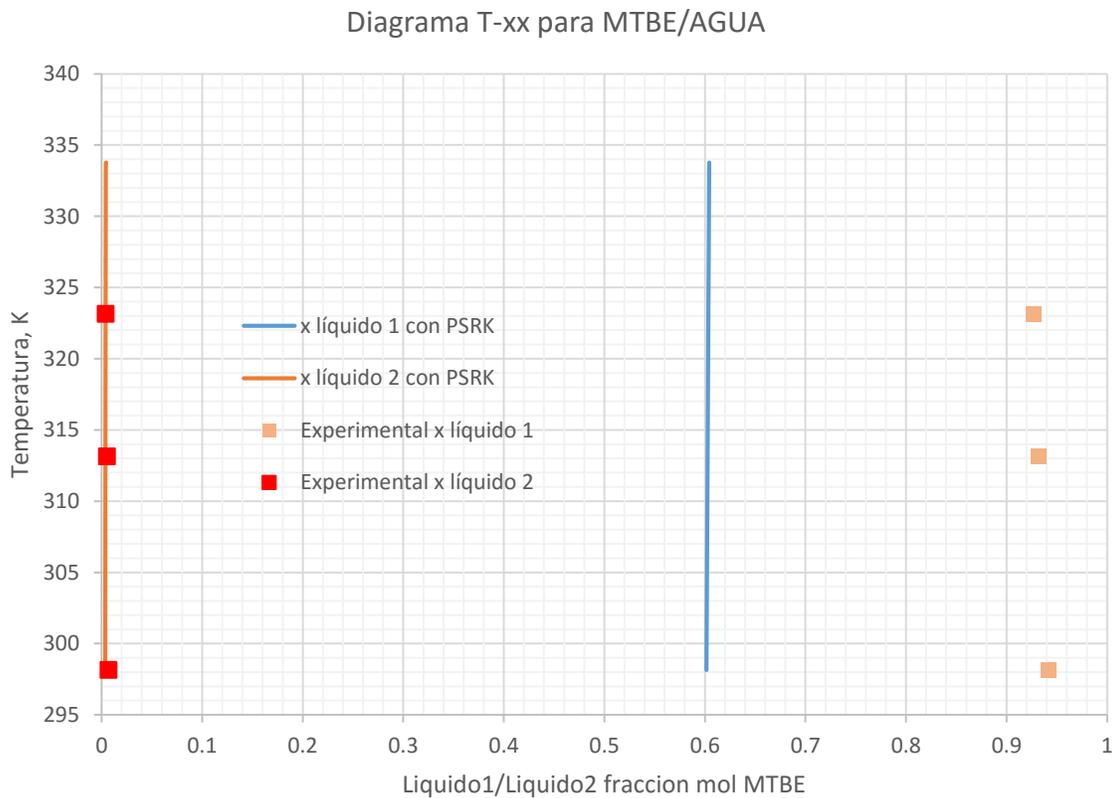


Figura 23 Diagrama T-xx para el par MTBE-agua (Lei, y otros, 2013)



En las figuras 19 a 23 se observa que las predicciones del modelo PSRK se asemejan a los datos experimentales, a excepción de la figura 23, la cual muestra que en la fracción orgánica resultante de la mezcla en equilibrio termodinámico entre agua y MTBE presenta concentraciones menores a las experimentales de MTBE, y por ende mayor cantidad de agua.

Especificación de alimentación

Es preciso especificar la composición y condiciones de las corrientes de alimentación. En la tabla 2 se muestran la caracterización de las corrientes de alimentación.

corriente	FLUJOS EN KG/H	corriente	FLUJOS EN KG/H	
1	C3's	286	C3's	
	ISOBUTANE	3832	ISOBUTANE	
	ISOBUTYLENE	2423	ISOBUTYLENE	
	NBUTANE	2032	NBUTANE	
	1-BUTENE	2345	1-BUTENE	
	2TBUTENE	1718	2TBUTENE	
	2CBUTENE	1133	2CBUTENE	
	C5'S	29	C5'S	
	MTBE	0	MTBE	
	METANOL	0	METANOL	
	WATER	10	WATER	8799
	DIMERS	0	DIMERS	
	TBA	0	TBA	
	DME	0	DME	
	BUTADIENE		BUTADIENE	
	MSBE		MSBE	
SUMA FLUJOS	13808	SUMA FLUJOS	8799	
TEMP(°C)	38	TEMP(°C)	100	
PRESS(Kg/cm ² A)	7.2	PRESS(Kg/cm ² A)	25.7	
7	C3's		C3's	
	ISOBUTANE		ISOBUTANE	
	ISOBUTYLENE		ISOBUTYLENE	
30	C3's		C3's	
	ISOBUTANE		ISOBUTANE	
	ISOBUTYLENE		ISOBUTYLENE	



NBUTANE		NBUTANE	
1-BUTENE		1-BUTENE	
2TBUTENE		2TBUTENE	
2CBUTENE		2CBUTENE	
C5'S		C5'S	
MTBE		MTBE	
METANOL	1711	METANOL	2
WATER		WATER	1525
DIMERS		DIMERS	
TBA		TBA	
DME		DME	
BUTADIENE		BUTADIENE	
MSBE		MSBE	
SUMA FLUJOS	1711	SUMA FLUJOS	1527
TEMP(°C)	41	TEMP(°C)	38
PRESS(Kg/cm ² A)	25.3	PRESS(Kg/cm ² A)	10.1

Tabla 2 Caracterización de alimentaciones

Selección de modelos de simulación y condiciones de operación

La reproducción de los resultados en la simulación del proceso de producción depende firmemente de los modelos de operaciones unitarias en los equipos, los cuales se presentan en la tabla 3:

lista de equipos		
Tag	Modelo	Servicio
02-C-101	Heater	precalentador de la alimentación al reactor
02-C-103	HeatX	intercambiador limentación/fondos de la columna catalítica
02-C-104	Heater	enfriador de productos
02-C-105	Heater	enfriador de los refinados de c4
02-C-106	Heater	bfw cooler
02-CA-101	Heater	enfriador de la recirculación del reactor
02-D-101	RPlug	reactor principal
02-E-101	Extract	columna de lavado de la alimentación de c4
02-E-102	RadFrac	columna catalítica
02-E-103	Extract	columna de lavado de los refinados de c4
02-F-101	Flash3	tanque flash
02-J-101	Pump	bomba de alimentación de c4
02-J-102	Pump	bomba de reciclado al reactor principal
02-J-103	Pump	bomba de condensados de la columna
02-M-101	Mixer	mezclador



02-M-102	Mixer	mezclador
02-M-103	Mixer	mezclador
02-S-101	FSplit	divisor de efluente
02-S-102	FSplit	divisor de efluente
02-S-103	FSplit	divisor de efluente
02-V-101	Valve	válvula
02-V-102	Valve	válvula
02-V-103	Valve	válvula
02-V-104	Valve	válvula

Tabla 3 Modelos de equipos de simulación

Las especificaciones principales de los equipos para su correcta simulación se muestran en las tablas 4 a la 10.

Torres

Tag	tipo	Número de etapas (N)	Etapas de alimentación	Presión etapa 1 (Kg/cm ²)	Presión etapa (N) (Kg/cm ²)	Temperatura a Etapa 1 (°C)	Temperatura a etapa N (°C)	Etapas de reacción
02-E-101	columna de lavado	30	1,30	3.5	6.8	38	38	
02-E-102	columna catalítica	58	12,36	7.6	9.6			12-18
02-E-103	columna de lavado	30	1,30	9.2	11.2	38	38	

Tabla 4 Condiciones de operación de las torres

Intercambiadores

Tag	tipo	Temperatura de salida (°C)	caída de presión (Kg/cm ²)
02-C-101	precalentador de la alimentación al reactor	36.8	-0.5
02-C-103	intercambiador alimentación/fondos de la columna catalítica	100	-0.5
02-C-104	enfriador de productos	38	-5.5
02-C-105	enfriador de los refinados de c4	55	-0.7
02-C-106	bfw cooler	38	-1.2
02-CA-101	enfriador de la recirculación del reactor	74.5	-2.4

Tabla 5 Condiciones de operación de intercambiadores

Bombas

Tag	tipo	Presión de salida (Kg/cm ²)
02-J-101	bomba de alimentación de c4	24.5



02-J-102	bomba de reciclado al reactor principal	23.7
02-J-103	bomba de condensados de la columna	13.2

Tabla 6 Condiciones de descarga de las bombas

Tanques flash

Tag	Tipo	Presión (Kg/cm ²)	Temperatura (°C)
02-F-101	tanque flash	4.7	38

Tabla 7 Condiciones del tanque flash

Mezcladores

Tag	Tipo	corrientes mezcladas	Corriente de salida
02-M-101	mezclador	10,11	12
02-M-102	mezclador	S3,17	13

Tabla 8 Relación de corrientes en los mezcladores

Spliters

Tag	tipo	corriente de entrada	corrientes de salida/efluente (Kg/h)
02-S-101	divisor de efluente	S40	03/114.96, Waste Water/ 373.46
02-S-102	divisor de efluente	7	09/1573, 08/138
02-S-103	divisor de efluente	14	15/23144.4,S1/15429.6

Tabla 9 Relación de corrientes y flujos de salida

Válvulas

Tag	Tipo	presión de salida (Kg/cm ²)
02-V-101	válvula	8.5
02-V-102	válvula	21.7
02-V-103	válvula	21.7
02-V-104	válvula	10.2

Tabla 10 Presiones de salida de las válvulas



Cinética de reacción

La reacción de formación del MTBE es reversible y exotérmica, por ello el equilibrio químico es desplazado a los productos a temperaturas bajas. Por otro lado, la cinética de producción es más rápida a temperaturas altas, por ello se puede tener grandes avances de reacción con reactores de dimensiones pequeñas. Para que el equilibrio químico sea favorable a la formación de productos y que el avance de reacción sea razonable, se sugiere que la operación del reactor principal (02-D-101) se lleve a cabo con un intervalo de temperatura de 60 a 80°C.

La siguiente cinética de reacción es la cinética para la reacción de producción de MTBE. En ella se considera que la reacción es reversible y que, a causa del exceso del metanol, este tiene un pseudo orden cero. La cinética que se muestra es exclusiva para el cálculo del avance de reacción en el reactor 02-D-101.

$$r_{MTBE} = k_1 [C_{Isobutileno}] - k_{-1} [C_{MTBE}] \quad \text{Ec 4.1}$$

Donde:

$$k_1 = 2.5152 \times 10^7 \exp\left(-\frac{6844}{T}\right)$$

$$k_{-1} = 8.2680 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{11381}{T}\right)$$

T es la temperatura en K

r_{MTBE} : Rapidez de reacción en (Kmol/Kg de catalizador*hr)

Esta cinética fue extraída de la siguiente fuente: Espitia, M. G. (1998). *Modelamiento de las plantas de MTBE y TAME de la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca tesis*



*que para obtener el grado de Maestro en Ingeniería Química (Procesos),
presenta Martha Garcia Espitia . Distrito Federal.*

En el caso de la torre catalítica no se usó ningún tipo de cinética. En lugar de ello se consideró que en la torre catalítica, específicamente en la zona de reacción, la reacción ha llegado al equilibrio. El uso de las torres catalíticas se debe a que por el principio de Le Chatelier, el cual expresa que: si un sistema en equilibrio se somete a un cambio de condiciones, éste se desplazará hacia una nueva posición a fin de contrarrestar el efecto que lo perturbó y recuperar el estado de equilibrio. La forma de utilizar este principio, es removiendo el MTBE de la zona de reacción, y de esta manera el equilibrio trata de reestablecerse desplazando la reacción hacia la formación de más MTBE para reestablecer las concentraciones de equilibrio.

Para las reacciones secundarias se consideró que gracias a la selectividad del catalizador usado hacia la formación de MTBE, y que las condiciones de operación (temperatura y presión) ayudan a la inhibición de la formación de los productos secundarios, no es necesario el uso de la cinética de estas reacciones. Podemos despreciar la formación de los productos secundarios en los equipos de reacción.

Capítulo 5 análisis de resultados y conclusiones.

Resultados.

A continuación se muestran los resultados de la simulación. Estos resultados son el balance de masa, balance de energía y los perfiles de concentración, temperatura y presión en las torres de destilación y absorción.

Perfil de flujo de la columna 02-E-101

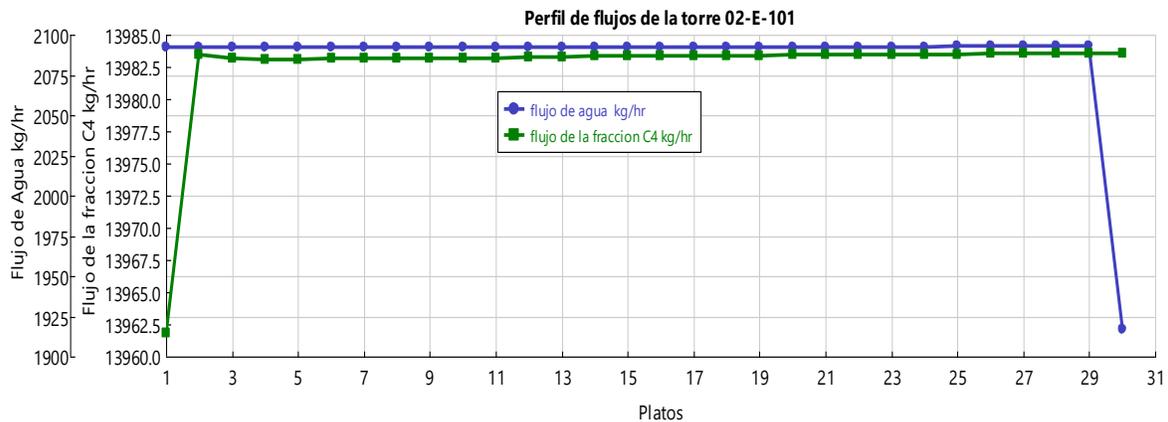


Figura 24 Perfil de flujo torre 02-E-101

El perfil de flujos de la columna 02-E-101 mostrado en la figura 24 que los flujos de ambos líquidos se mantienen prácticamente constantes, exceptuando los platos 1 y 30.

Perfil de temperatura del reactor 02-D-101

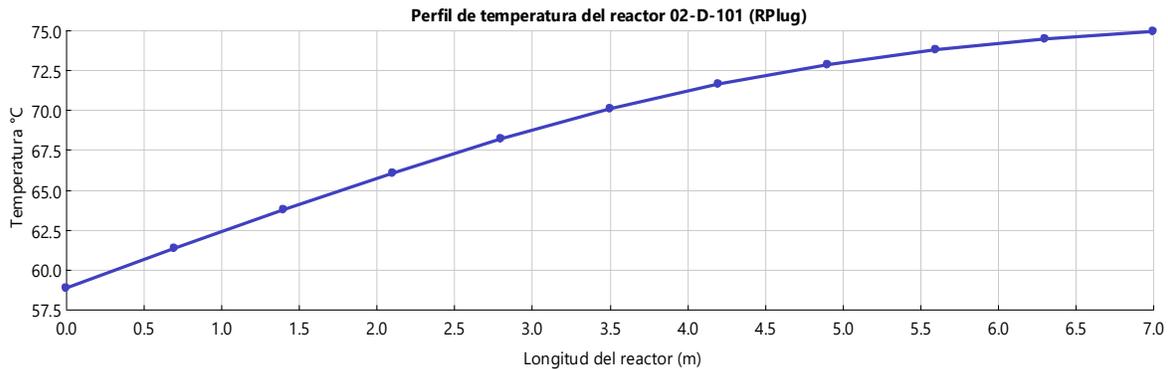


Figura 25 Perfil de temperatura del reactor 02-D-101

En cuanto la temperatura en el reactor se muestra en la figura 25 que tiene una tendencia creciente. En la parte final es apreciable un leve cambio de pendiente, señal de que se comienza a alcanzar la condición de equilibrio químico.

Perfil de concentración en el reactor 02-D-101

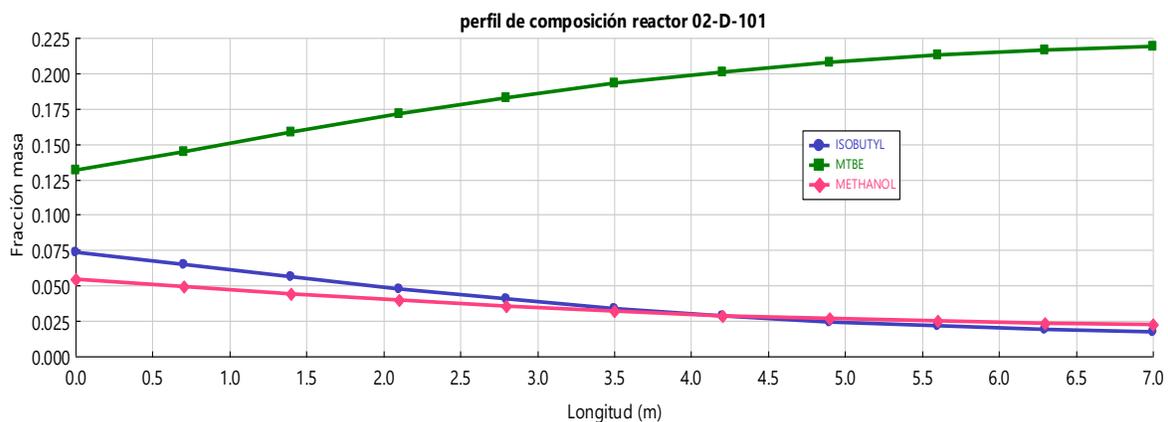


Figura 26 Perfil de concentración másica del reactor 02-D-101

Es apreciable el incremento de la concentración de MTBE en el reactor y la disminución de los reactivos observados en la figura 26. En esta figura también se puede ver el cambio de pendiente en los últimos tramos del reactor.

Perfil de temperatura de la columna 02-E-102

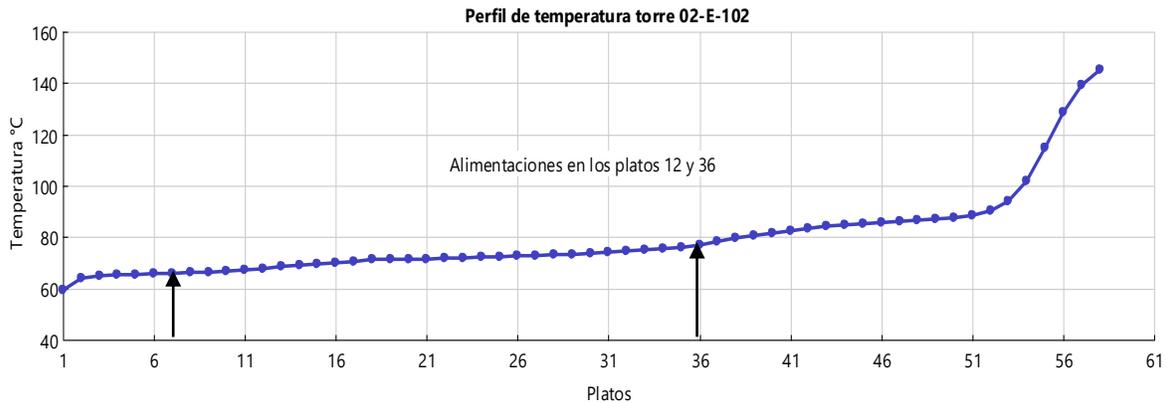


Figura 27 Perfil de temperatura del reactor 02-E-102

Para el perfil de temperatura en la columna se observa sin saltos de temperatura. Esto indica que las condiciones de alimentaciones son prácticamente iguales a las condiciones en la columna.

Perfil de concentración en la columna 02-E-102

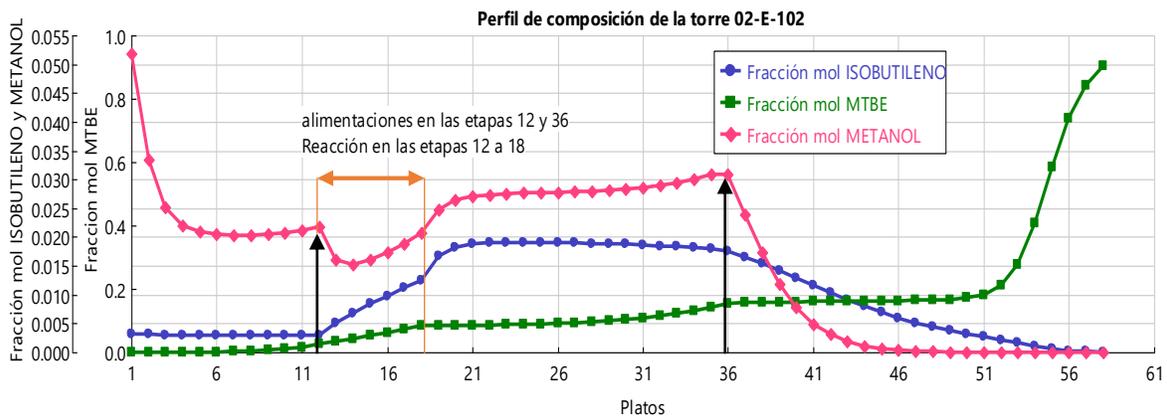


Figura 28 Perfil de concentración columna 02-E-102

Como se observa en la figura 28 la concentración de MTBE aumenta conforme se acerca a los fondos, esto se debe a que el MTBE es el fluido clave pesado. También

de observa que entre los platos 12 a 18 una disminución en la concentración de metanol, pues, en estos platos es donde se lleva a cabo la reacción que lo consume.

Perfil de flujos de la columna 02-E-102

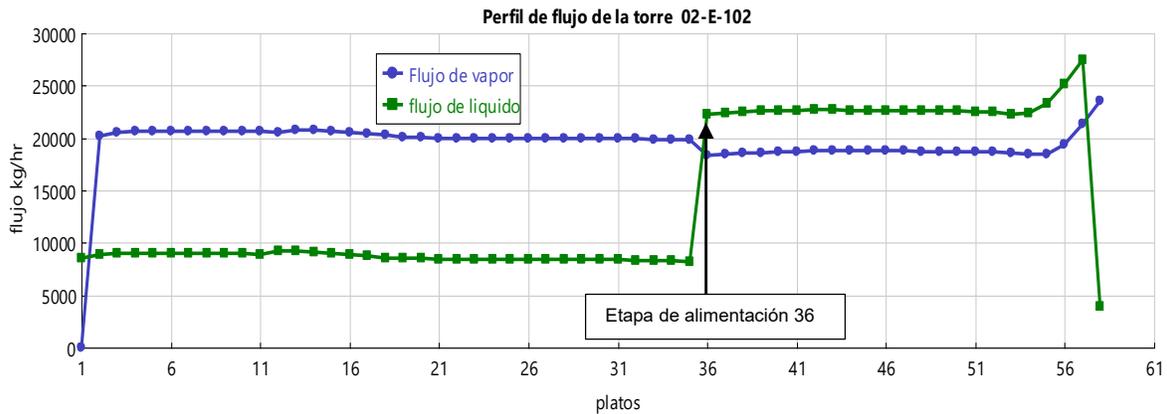


Figura 29 Perfil de flujo torre 02-E-102

En cuanto al perfil de flujo es visible que el flujo de vapor es casi constante durante la columna, pero el de líquido se incrementa súbitamente en el plato 36 correspondiente el de alimentación proveniente del reactor.

Cargas de intercambiadores de calor.

ÍTEM	Servicio	GCAL/H	
		carga de diseño	Carga simulada
02-C-101	precalentador de la alimentación al reactor	0.195	0.027
02-CA-101	Enfriador de la recirculación del reactor	-0.670	-0.014
02-C-103	intercambiador Alimentación/fondos de la columna catalítica	0.114	0.113
02-C-102	Rehervidor de la columna catalítica	2.223	1.649
02-CA-102	Condensador de la columna catalítica	2.217	1.554
02-C-104	enfriador de productos	-0.179	-0.138
02-C-105 A/B	Enfriador de los refinados de C4	-0.211	-0.039
02-C-106 A/B	BFW Cooler	-0.562	-0.551

Tabla 11 Resultado de cargas de simulación y diseño



Como se puede ver en la tabla 11 las cargas de simulación de los calentadores se asemejan a las cargas de diseño. Además de que algunas cargas son menores a las especificadas en el diseño, esto refleja un menor uso de servicios en la planta y por ende un menor costo de operación.

Análisis de las corrientes de productos.

Corriente de producto MTBE obtenida

FLUJOS EN KG/H		FLUJO DE DISEÑO	FLUJO SIMULADO	%desviación
corriente		Fracción masa		
22	C3's			
	ISOBUTANE	2.64E-04	3.33E-05	87.39%
	ISOBUTYLENE		2.82E-05	
	NBUTANE		2.95E-04	
	1-BUTENE		2.78E-03	
	2TBUTENE		6.00E-03	
	2CBUTENE		1.30E-02	
	C5'S	4.49E-03	7.22E-03	60.80%
	MTBE	9.88E-01	9.59E-01	2.94%
	METANOL			
	WATER		1.17E-02	
	DIMERS	2.11E-03		
	TBA	2.91E-03		
	DME			
	BUTADIENE			
	MSBE	1.85E-03		
	SUMA FLUJOS (Kg/h)	3786	3900.25	3.02%
	TEMP(°C)	38	38	0.00%
PRESS(Kg/cm ² A)	3.6	3.6	0.00%	

Tabla 12 Producción de MTBE

Algunas desviaciones son considerablemente altas, a pesar de eso estas desviaciones se presentan en las trazas, las cuales presentan menos de un 1% de la corriente total.



Corriente de fracción de C4 sobrante del proceso

FLUJOS EN KG/H		FLUJO DE DISEÑO	FLUJO SIMULADO	%desviación
corriente	Fracción masa			
27	C3's	2.51E-02	2.51E-02	0.01%
	ISOBUTANE	3.36E-01	3.37E-01	0.31%
	ISOBUTYLENE	2.11E-03	3.33E-03	57.91%
	NBUTANE	1.78E-01	1.79E-01	0.24%
	1-BUTENE	2.06E-01	2.05E-01	0.21%
	2TBUTENE	1.51E-01	1.49E-01	1.08%
	2CBUTENE	9.94E-02	9.52E-02	4.23%
	C5'S	1.05E-03	7.06E-05	93.30%
	MTBE		3.53E-05	
	METANOL	8.78E-05	3.89E-05	55.76%
	WATER	7.02E-04	4.64E-03	560.53%
	DIMERS			
	TBA			
	DME	2.63E-04		
	BUTADIENE			
	MSBE			
	SUMA FLUJOS (Kg/h)	3786	3900.25	3.02%
	TEMP(°C)	38	38	0.00%
PRESS(Kg/cm ² A)	3.6	3.6	0.00%	

Tabla 13 Fracción de C4 sobrante

Nuevamente se observan desviaciones altas. Aunque, nuevamente al comparar con la corriente total podemos ver que realmente son trazas y no tienen gran impacto sobre los valores de simulación.



Corriente de metanol y agua en la salida de la torre de absorción 02-E-103.

FLUJOS EN KG/H		FLUJO DE DISEÑO	FLUJO SIMULADO	%desviación
corriente				
29	C3's		5.99E-04	
	ISOBUTANE		3.62E-03	
	ISOBUTYLENE		5.35E-05	
	NBUTANE		2.73E-03	
	1-BUTENE		2.34E-03	
	2TBUTENE		2.37E-03	
	2CBUTENE		1.53E-03	
	C5'S			
	MTBE			
	METANOL	1.83E-01	1.89E-01	2.83%
	WATER	8.17E-01	7.98E-01	2.26%
	DIMERS			
	TBA			
	DME			
	BUTADIENE			
	MSBE			
	SUMA FLUJOS	1870	1869.75	0.01%
	TEMP(°C)	38	38	0.00%
	PRESS(Kg/cm ² A)	12	12	0.00%

Tabla 14 Metanol para recuperación

Como se puede apreciar en las tablas 12, 13 y 14 la desviación de las composiciones de los elementos clave; como lo son el MTBE, metanol y etileno; y condiciones de operación se encuentran en un rango menor a un 10%, por esta razón podemos concluir que se ha logrado realizar una simulación satisfactoria.



Conclusiones

En base a la información mostrada anteriormente, podemos observar que los resultados muestran similitud con las especificaciones de diseño de la planta de MTBE de la Refinería Gral. Lázaro Cárdenas. A pesar de esto existen algunas desviaciones en las corrientes como los son la cantidad de agua contenida en la corriente de la fracción de C4 después del proceso de lavado y en la corriente de MTBE. Esto se debe a que el modelo termodinámico predice que la solubilidad entre estos pares es mayor que la reportada en los datos experimentales.

En cuanto a las corrientes de productos como lo son el MTBE y la corriente sobrante de C4 para gas licuado, se puede apreciar una buena similitud de la simulación con respecto a los datos de diseño a pesar de que ciertos productos como los dímeros y el TBA no se encuentran presentes en la simulación. Esto se debe a que la cinética de producción de subproductos es despreciable, ya que la selectividad del catalizador zeolita permite la baja formación de subproductos y la selectividad guiada hacia el MTBE.

Además de lo anteriormente mencionado es apreciable en los perfiles de flujo y temperatura de los equipos, que las condiciones de operación permiten alcanzar el objetivo de producción de 3788 Kg/hr de MTBE.

Una de las observaciones que más destaca en el presente trabajo es que los intercambiadores de calor especificados en los datos de diseño presentan una carga térmica superior a lo calculado en la simulación. Una conclusión a la que se



puede llegar con esta observación es que la planta fue diseñada pensando en futuras expansiones de producción.

Aportaciones.

Las aportaciones de este trabajo son las siguientes:

- Este trabajo servirá como futura referencia a estudiantes y docentes sobre el uso de simuladores, el proceso de producción de MTBE y la evolución de los procesos de producción de éteres.
- En el trabajo presente se encuentran plasmadas las recomendaciones para el uso de termodinámica en procesos que contienen compuestos polares y no polares, por eso es una referencia palpable a futuros investigadores del tema sobre dicho proceso.
- La simulación realizada para el trabajo puede ser posteriormente utilizada como referencia para realizar estudios del comportamiento de la planta en futuras modificaciones como lo son el aumento de producción o el cambio de las condiciones de operación.



Bibliografía

1. AL-HARTHI, F. S. (2008). MODELING AND SIMULATION OF A REACTIVE. *KINGDOM OF SAUDI ARABIA COLLEGE OF ENGINEERING DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING* .
2. Aspen Technology, I. (1994). *ASPEN PLUS Reference Manual: Physical property, methods and models, Volume 2*.
3. BERMEJO, A. S.-M. (1993). TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN INGENIERIA QUIMICA OBTENCION CATALITICA DE MTBE. *UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID*.
4. Bernatova, S., Aim, K., & Wichterle, I. (2006). Isothermal vapour liquid equilibrium with chemical reaction in the quaternary water + methanol + acetic acid + methyl acetate system, and in five binary subsystems. *Fluid Phase Equilib.*, 247, 96-101.
5. Black, C., Joris, G. G., & Taylor, H. S. (1948). The Solubility of Water in Hydrocarbons. *The Journal of Chemical Physics*, 16, 537.
6. C. WANKAT, P. (2008). *Ingeniería de procesos de separación*. México: PEARSON.
7. E. Moller, E., & T.Kostecki, P. (2003). *MTBE Remediation Handbok*. New York: Springer Science + Bussines Media.
8. Espitia, M. G. (1998). *Modelamiento de las plantas de MTBE y TAME de la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca tesis que para obtener el grado de Maestro en Ingeniería Química (Procesos), presenta Martha Garcia Espitia*. Distrito Federal.
9. FOGLER, S. H. (2001). *Elementos de Ingeniería de las reacciones químicas*. México: Pearson Educacion.
10. Gary, J. H. (2001). *Petroleum Refining Technology and Economics* . New York: Marcel Dekker, Inc.



11. *Google maps*. (20 de febrero de 2016). Obtenido de Google maps: maps.google.com.mx
12. *hojas de seguridad UNAM*. (10 de febrero de 2016). Obtenido de hojas de seguridad UNAM: <http://www.quimica.unam.mx/IMG/pdf/9metanol.pdf>
13. *International Chemical Safety Card 1027*. (10 de febrero de 2016). Obtenido de International Chemical Safety Card 1027: <http://www.inchem.org/documents/icsc/icsc/eics1027.htm>
14. Lei, Y., Chen, Y., Li, X., Qian, Y., Yang, S., & Yang, C. (2013). Liquid Liquid Equilibria for the Ternary System 2-Methoxy-2-methylpropane + Phenol + Water. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 58, 1874-1878.
15. Martinez-Ortiz, J. A., & Manley, D. B. (1978). Vapor Pressures for the System Isobutane-Isobutylene-n-Butane. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 23, 165-7.
16. Meyers, R. A. (s.f.). *Handbook of Petroleum Refining Processes Tercera edición* (tercera ed.).
17. (s.f.). *PIPING AND INSTRUMENT DIAGRAM FOR MTBE/TAME PROJECT SALINA CRUZ*.
18. Procesos industriales para la obtención de MTBE. (1993). En A. S.-M. Bermejo, *Obtención catalítica de MTBE* (págs. 31-34). Madrid: Universidad de Madrid.
19. Robert H. Perry, D. W. (2001). *Manual del Ingeniero Químico*. McGraw-Hill.
20. *The European Fuel Oxygenates Association*. (4 de marzo de 2016). Obtenido de The European Fuel Oxygenates Association: <http://www.efoa.eu/>
21. Toghiani, R. K., Toghiani, H., & Venkateswarlu. (1996). Vapor-liquid equilibria for methyl tert-butyl ether + methanol and tert- amyl methyl ether + methanol. *G. Fluid Phase Equilibria*, 122, 157-168.



22. TREYBAL, R. E. (1968). *EXTRACCIÓN EN FASE LIQUIDA* . MEXICO: McGraw Hills.
23. *Uso de las zeolitas*. (24 de febrero de 2016). Obtenido de Uso de las zeolitas: http://datateca.unad.edu.co/contenidos/401540/exe/leccin_4_uso_de_las_zeolitas.html
24. Yang, C., Sun, F., Ma, S., Yin, X., & Zeng. (2012). Organic Salt Effect on Vapor Liquid Equilibrium of the Methanol + Water System at Subatmospheric Pressure. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 57, 2696-2701.
25. Zúñiga, O. M. (4 de marzo de 2016). Zeolitas. *Zeolitas*. Distrito Federal.



Anexos

Cuadro de balance obtenidos

	UNITS	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
FROM				02-S-101	02-E-101	02-F-101	02-J-101		02-S-102	02-S-102	02-V-102
TO		02-E-101	02-V-101	02-E-101		02-J-101	02-V-102	02-S-102	02-E-102	02-V-103	02-M-101
SUBSTREAM: MIXED											
PHASE:		Liquid									
COMPONENT MASS FLOW											
C3	KG/HR	286.00	0.00	0.00	0.62	285.36	285.36	0.00	0.00	0.00	285.36
ISOBUTAN	KG/HR	3832.00	0.00	0.00	4.65	3827.25	3827.25	0.00	0.00	0.00	3827.25
ISOBUTYL	KG/HR	2423.00	0.00	0.00	3.89	2419.02	2419.02	0.00	0.00	0.00	2419.02
1-BUTENE	KG/HR	2032.00	0.00	0.00	2.94	2028.99	2028.99	0.00	0.00	0.00	2028.99
N-BUTANE	KG/HR	2345.00	0.00	0.00	3.29	2341.64	2341.64	0.00	0.00	0.00	2341.64
2TBUTENE	KG/HR	1718.00	0.00	0.00	2.90	1715.03	1715.03	0.00	0.00	0.00	1715.03
2CBUTENE	KG/HR	1133.00	0.00	0.00	1.97	1130.98	1130.98	0.00	0.00	0.00	1130.98
C5	KG/HR	29.00	0.00	0.00	0.03	28.97	28.97	0.00	0.00	0.00	28.97
MTBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
METHANOL	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1711.00	138.00	1573.00	0.00
WATER	KG/HR	10.00	8799.00	2071.00	1896.88	79.39	79.39	0.00	0.00	0.00	79.39
BUTADIEN	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MSBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TBA	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MOLE FLOW	KMOL/HR	243.93	488.42	114.96	105.65	247.41	247.41	53.40	4.31	49.09	247.41
MASS FLOW	KG/HR	13808.0	8799.00	2071.00	1917.18	13856.6	13856.6	1711.00	138.00	1573.00	13856.63
VOLUME FLOW	CUM/HR	23.65	12.41	2.78	2.28	26.77	26.62	2.92	0.24	2.69	26.67
TEMPERATURE	C	38	100	38	35.4488	38	40.5175	41	41	41	40.5516
PRESSURE	KG/SQCM G	7.2	25.7	7.3	5.8	4.7	24.5	25.3	25.3	25.3	21.7
VAPOR FRACTION		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MOLAR ENTHALPY	J/KMOL	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-8.8E+07
MASS ENTHALPY	J/KG	8.5E+07	2.8E+08	2.8E+08	2.8E+08	8.8E+07	8.8E+07	2.4E+08	2.4E+08	2.4E+08	-
MASS DENSITY	KG/CUM	1501400	1.6E+07	1.6E+07	1.6E+07	1571700	1564900	7430200	7430200	7430200	1564900
AVERAGE MOLECULAR WEIGHT		583.90	709.05	746.17	841.76	517.54	520.57	585.25	585.25	585.25	519.61



UNITS	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	
FROM	02-V-103	02-M-101	02-C-101	02-M-102	02-D-101	02-M-103	02-J-102	02-CA101	02-M-103	02-V-104	
TO	02-M-101	02-C-101	02-M-102	02-D-101	02-M-103	02-J-102	02-CA101	02-M-102	02-V-104	02-C-103	
SUBSTREAM: MIXED PHASE:	Liquid										
COMPONENT MASS FLOW C3	KG/HR	0.00	285.36	285.36	713.41	713.41	428.04	428.04	428.04	285.36	285.36
ISOBTAN	KG/HR	0.00	3827.25	3827.25	9568.11	9568.11	5740.87	5740.87	5740.87	3827.25	3827.25
ISOBTYL	KG/HR	0.00	2419.02	2419.02	2825.73	677.43	406.71	406.71	406.71	270.97	270.97
1-BUTENE	KG/HR	0.00	2028.99	2028.99	5072.47	5072.47	3043.48	3043.48	3043.48	2028.99	2028.99
N-BUTANE	KG/HR	0.00	2341.64	2341.64	5854.10	5854.10	3512.46	3512.46	3512.46	2341.64	2341.64
2TBUTENE	KG/HR	0.00	1715.03	1715.03	4287.58	4287.58	2572.55	2572.55	2572.55	1715.03	1715.03
2CBUTENE	KG/HR	0.00	1130.98	1130.98	2827.46	2827.46	1696.47	1696.47	1696.47	1130.98	1130.98
C5	KG/HR	0.00	28.97	28.97	72.43	72.43	43.46	43.46	43.46	28.97	28.97
MTBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00	5061.84	8436.99	5061.84	5061.84	5061.84	3374.80	3374.80
METHANOL	KG/HR	1573.00	1573.00	1573.00	2092.54	865.68	519.54	519.54	519.54	346.27	346.27
WATER	KG/HR	0.00	79.39	79.39	198.47	198.47	119.08	119.08	119.08	79.39	79.39
BUTADIEN	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MSBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TBA	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MOLE FLOW	KMOL/HR	49.09	296.51	296.51	683.84	645.55	387.34	387.34	387.34	258.22	258.22
MASS FLOW	KG/HR	1573.00	15429.63	15429.63	38574.13	38574.13	23144.50	23144.50	23144.50	15429.65	15429.65
VOLUME FLOW	CUM/HR	2.69	28.96	29.18	76.14	78.90	47.34	47.22	47.17	31.56	31.86
TEMPERATURE	C	41.1314	34.0161	36.8	58.8767	74.9261	74.9261	75.4857	74.5	74.9261	74.7234
PRESSURE	KG/SQCMG	21.7	21.7	21.2	21.2	19.4	19.4	23.7	21.3	19.4	10.2
VAPOR FRACTION		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MOLAR ENTHALPY	J/KMOL	-2.4E+08	-1.1E+08	-1.1E+08	-1.2E+08	-1.3E+08	-1.3E+08	-1.3E+08	-1.3E+08	-1.3E+08	-1.3E+08
MASS ENTHALPY	J/KG	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
MASS DENSITY	KG/CUM	7430200	2162900	2155600	2157500	2157500	2157600	2156200	2158700	2157500	2157500
AVERAGE MOLECULAR WEIGHT		32.04	52.04	52.04	56.41	59.75	59.75	59.75	59.75	59.75	59.75



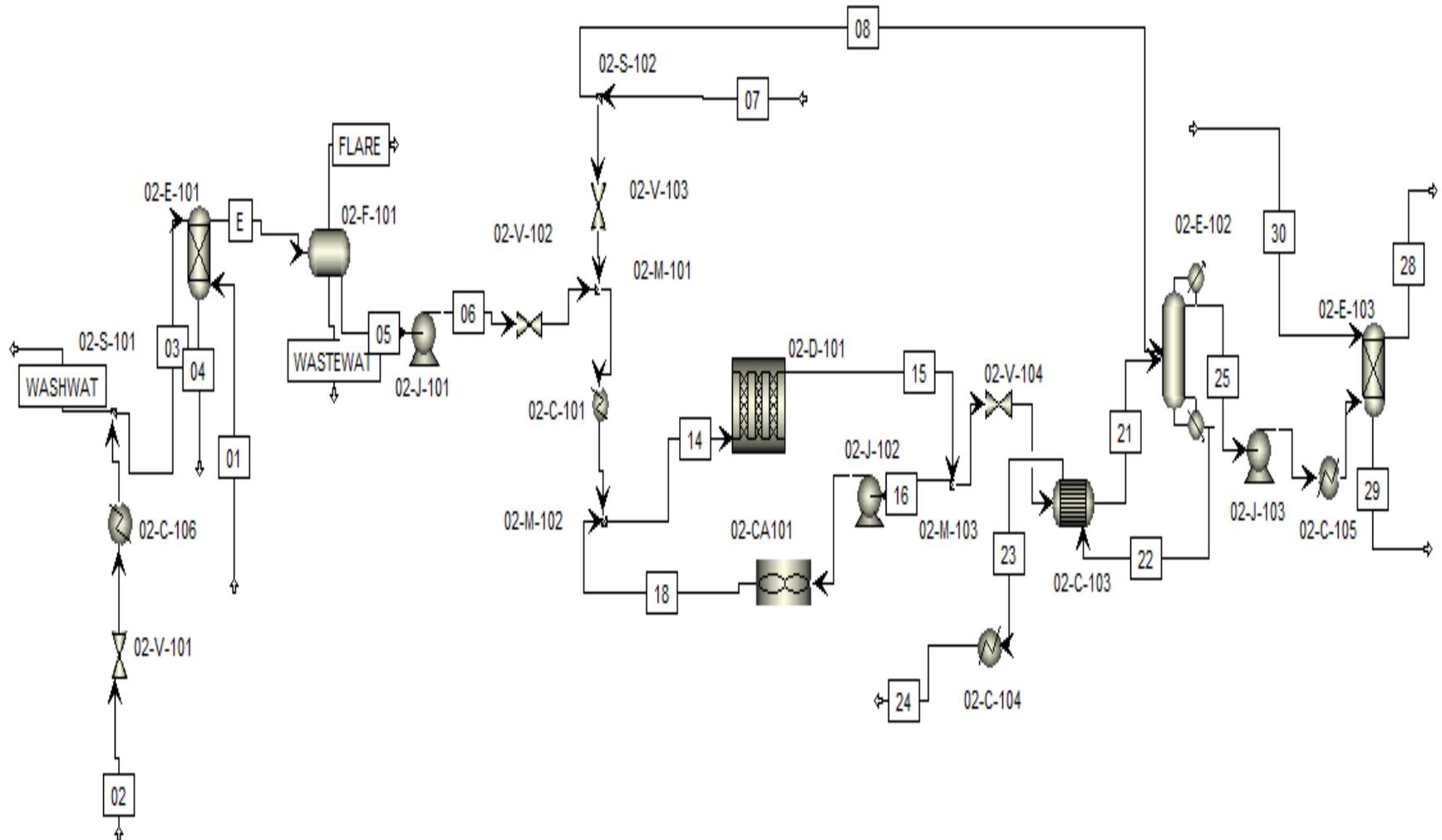
UNITS	21	22	23	24	25	26	27	28	29	S1	
FROM	02-C-103	02-E-102	02-C-103	02-C-104	02-E-102	02-J-103	02-C-105	02-E-103	02-E-103	02-V-101	
TO	02-E-102	02-C-103	02-C-104		02-J-103	02-C-105	02-E-103		02-M-104	02-C-106	
SUBSTREAM: MIXED PHASE:	Mixed	Liquid									
COMPONENT MASS FLOW											
C3	KG/HR	285.36	0.00	0.00	0.00	285.36	285.36	285.36	284.38	0.98	0.00
ISOBUTAN	KG/HR	3827.25	0.13	0.13	0.13	3827.12	3827.12	3827.12	3821.55	5.58	0.00
ISOBUTYL	KG/HR	270.97	0.11	0.11	0.11	37.78	37.78	37.78	37.69	0.08	0.00
1-BUTENE	KG/HR	2028.99	1.15	1.15	1.15	2027.84	2027.84	2027.84	2023.66	4.18	0.00
N-BUTANE	KG/HR	2341.64	10.81	10.81	10.81	2330.83	2330.83	2330.83	2327.24	3.58	0.00
2TBUTENE	KG/HR	1715.03	23.34	23.34	23.34	1691.69	1691.69	1691.69	1688.06	3.63	0.00
2CBUTENE	KG/HR	1130.98	50.54	50.54	50.54	1080.45	1080.45	1080.45	1078.10	2.35	0.00
C5	KG/HR	28.97	28.17	28.17	28.17	0.80	0.80	0.80	0.80	0.00	0.00
MTBE	KG/HR	3374.80	3740.61	3740.61	3740.61	0.40	0.40	0.40	0.40	0.00	0.00
METHANOL	KG/HR	346.27	0.00	0.00	0.00	351.16	351.16	351.16	0.44	352.72	0.00
WATER	KG/HR	79.39	45.43	45.43	45.43	33.95	33.95	33.95	52.55	1506.41	8799.00
BUTADIEN	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MSBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TBA	KG/HR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MOLE FLOW	KMOL/HR	258.22	46.87	46.87	46.87	211.50	211.50	211.50	201.22	94.99	488.42
MASS FLOW	KG/HR	15429.65	3900.29	3900.29	3900.29	11667.38	11667.38	11667.38	11314.86	1879.52	8799.00
VOLUME FLOW	CUM/HR	65.72	7.84	6.81	6.07	24.27	24.20	23.78	21.89	2.64	12.42
TEMPERATURE	C	79.4159	145.346	100	38	59.2584	60.2056	55	38	38	100.367
PRESSURE	KG/SQCMG	9.9	9.6	9.1	3.6	7.1	13.2	12.5	9.2	11.2	8.5
VAPOR FRACTION		0.06117	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MOLAR ENTHALPY	J/KMOL	-1.3E+08	-2.8E+08	-2.9E+08	-3E+08	-1E+08	-1E+08	-1E+08	-9.8E+07	-2.8E+08	-2.8E+08
MASS ENTHALPY	J/KG	-2126800	-3322200	-3443400	-3591200	-1824000	-1821800	-1835700	-1738300	-1.4E+07	-1.6E+07
MASS DENSITY	KG/CUM	234.78	497.62	572.41	642.70	480.71	482.03	490.65	516.86	711.41	708.43
AVERAGE MOLECULAR WEIGHT		59.75	83.21	83.21	83.21	55.16	55.16	55.16	56.23	19.79	18.02



	UNITS	S2	WASHWAT	WASTEWAT
FROM		02-C-106	02-S-101	02-F-101
TO		02-S-101		
SUBSTREAM:				
MIXED				
PHASE:		Liquid	Liquid	Liquid
COMPONENT				
MASS FLOW				
C3	KG/HR	0.00	0.00	0.02
ISOBUTAN	KG/HR	0.00	0.00	0.11
ISOBUTYL	KG/HR	0.00	0.00	0.09
1-BUTENE	KG/HR	0.00	0.00	0.07
N-BUTANE	KG/HR	0.00	0.00	0.07
2TBUTENE	KG/HR	0.00	0.00	0.06
2CBUTENE	KG/HR	0.00	0.00	0.04
C5	KG/HR	0.00	0.00	0.00
MTBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00
METHANOL	KG/HR	0.00	0.00	0.00
WATER	KG/HR	8799.00	6728.00	104.73
BUTADIEN	KG/HR	0.00	0.00	0.00
MSBE	KG/HR	0.00	0.00	0.00
TBA	KG/HR	0.00	0.00	0.00
MOLE FLOW	KMOL/HR	488.42	373.46	5.82
MASS FLOW	KG/HR	8799.00	6728.00	105.19
VOLUME FLOW	CUM/HR	11.79	9.02	0.14
TEMPERATURE	C	38	38	38
PRESSURE	KG/SQCMG	7.3	7.3	4.7
VAPOR FRACTION		0	0	0
MOLAR ENTHALPY	J/KMOL	-2.8E+08	-2.8E+08	-2.8E+08
MASS ENTHALPY	J/KG	-1.6E+07	-1.6E+07	-1.6E+07
MASS DENSITY	KG/CUM	746.17	746.17	745.40
AVERAGE MOLECULAR WEIGHT		18.02	18.02	18.07



Diagrama de flujo de proceso de simulación





Universidad Nacional Autónoma de México