

139



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

es.

FACULTAD DE QUIMICA

SIMULACION DE LA PLANTA DE METANOL II DEL
COMPLEJO PETROQUIMICO INDEPENDENCIA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERA QUIMICA

P R E S E N T A :

FLOR REBECA SIPERSTEIN BLUMOVICZ



MEXICO, D. F.

1995

FALLA DE ORIGEN

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Jurado asignado

Presidente	Prof. Alejandro Anaya Durand
Vocal	Prof. Enrique Bazúa Rueda
Secretario	Prof. José Antonio Ortiz Ramirez
1er. suplente	Prof. Alejandro Iñiguez Hernández
2do. suplente	Prof. Mariano Pérez Camacho

Sitio donde se desarrolló el tema:

Laboratorio de Cómputo
Edificio E
Facultad de Química
Ciudad Universitaria

Asesor:



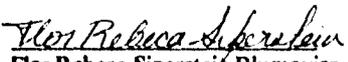
Dr. Enrique Bazúa Rueda

Supervisor Técnico:



Ing. Celso Montiel Maldonado

Sustentante:



Flor Rebeca Siperstein Blumovicz

A mis padres

AGRADECIMIENTOS

A mis padres, por su ejemplo y apoyo en todo momento. A Moy, por su ayuda y consejos.

Al Dr. Enrique Bazúa, con toda mi admiración, por su ejemplo, apoyo, paciencia y dirección de este trabajo.

Al Ing. Celestino Montiel, por el apoyo y facilidades brindadas para la elaboración de este trabajo.

Al M en IQ Néstor Espinoza, jefe de la planta Metanol II del Complejo Petroquímico Independencia de PEMEX, por toda la información proporcionada, por su tiempo y paciencia.

Al jurado, M en IQ Alejandro Anaya Durand, Dr. Enrique Bazúa Rueda, Ing. José Antonio Ortiz Ramírez, Ing. Alejandro Iñiguez Hernández, Ing. Mariano Pérez Camacho, por las valiosas observaciones y por el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo.

A los profesores de la Facultad de Química, de quienes tuve la oportunidad de aprender.

A Isaac y Moy Malo, mis amigos de siempre; a Carlos, José Luis, Víctor y Federico, por soportarme durante toda la carrera.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por haberme dado la oportunidad de ser parte de ella.

NOMENCLATURA

He	Entalpía específica de las corrientes de entrada
Hs	Entalpía específica de las corrientes de salida
Me	Flujo másico de las corrientes de entrada
Ms	Flujo másico de las corrientes de salida
Q	Flujo de calor suministrado al sistema
Sc	Entropía específica de las corrientes de entrada
Ss	Entropía específica de las corrientes de salida
ΔS_{gen}	Generación total de entropía
Text	Temperatura del sistema que recibe calor del exterior
To	Temperatura del medio ambiente
W	Potencia suministrada al sistema
We	Trabajo mecánico equivalente
$(We)_{min}$	Trabajo mecánico equivalente mínimo
Wp	Trabajo mecánico perdido

ÍNDICE

Introducción	1
Generalidades	3
Ingeniería de procesos.....	3
Simulación de procesos	4
Simulador de procesos Aspen Plus	7
Descripción del Proceso.....	10
Perspectiva histórica.....	10
Descripción del proceso de producción de Metanol a partir de gas natural.....	13
Producción de gas de síntesis	13
Sección de síntesis de metanol.....	15
Purificación.....	17
Simulación del Proceso	19
Sección de reformación.....	21
Sección de síntesis de metanol.....	23
Sección de purificación	25
Comparación de resultados	26
Análisis Termodinámico de Procesos	33
Metodología utilizada.....	34
Propuestas para la modificación del proceso.....	39
Control en torres de destilación.....	45
Medición de flujos	45
Medición de niveles.....	46
Medición de presión	46
Medición de temperatura	47
Control de composición del producto.....	49
Regulación del balance de materia.....	49
Regulación del balance de energía	49
Diseño de sistemas de control para columnas de destilación.....	50
Objetivos	54
Selección del sistema de control.....	54
Localización del plato de control.....	57
Evaluación de la controlabilidad de la columna	57
Columna de purificación de metanol.....	58

Índice

Conclusiones y recomendaciones	62
Bibliografía.....	65
Apéndice 1	67
Apéndice 2	68
Apéndice 3	79

INTRODUCCIÓN

La simulación de procesos se ha convertido en parte integral en la práctica de la ingeniería química. Los avances en la simulación permiten modelar rigurosamente una gran variedad de procesos; en particular, los sorprendentes avances en el desarrollo de termodinámica y los métodos para predecir propiedades físicas, han llevado al desarrollo de sistemas de simulación generales que pueden manejar una gran variedad de compuestos.

Los sistemas de simulación de procesos son una herramienta eficaz que puede ser utilizada para realizar el análisis de plantas existentes con el fin de implementar modificaciones en sus condiciones de operación o en su estructura que puedan llevarlas a una operación más eficiente. En este trabajo se presentan algunas de las aplicaciones que tiene la simulación de procesos a régimen permanente, para lo cual se utilizó información de la planta Metanol II de PEMEX.

Los objetivos que se persiguen en este trabajo son:

- a) Utilizar los cálculos de trabajo perdido para proponer mejoras al proceso que redunden en un consumo menor de energía, y
- b) Realizar un análisis para determinar el sistema de control que proporcione una operación adecuada de una torre de destilación, para asegurar la pureza del producto.

En el capítulo dos de este trabajo se presentan los conceptos básicos sobre la ingeniería de procesos y la simulación de procesos y, en particular sobre el simulador de procesos ASPEN PLUS, que fue el simulador que se utilizó para la realización de este trabajo.

En el capítulo tres se expone la evolución que ha tenido el proceso de síntesis de metanol, así como una explicación al mismo para entender las bases que se utilizaron para llevar a cabo la simulación, que se encuentra explicada en el capítulo cuatro.

Una vez entendido el proceso y realizada la simulación, de dónde se obtienen las propiedades de todas las corrientes del proceso así como las características de los equipos, se puede utilizar la información resultante en distintas formas.

Introducción

En el capítulo cinco se muestra la importancia que tiene la simulación en el análisis termodinámico de procesos como herramienta básicamente para el cálculo de propiedades para después poder calcular la generación de entropía y el trabajo perdido, y proponer modificaciones al proceso que reduzcan el consumo de energía.

En el capítulo seis, se expone la utilidad que puede tener la simulación a régimen permanente en el diseño de sistemas de control para torres de destilación. En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de la simulación que permiten determinar la localización del plato de control de temperatura (control indirecto de la composición) en la columna de purificación de metanol.

Finalmente, se presentan las conclusiones y recomendaciones para trabajos posteriores.

GENERALIDADES

Ingeniería de procesos

La ingeniería de procesos es la creación, cuantificación y análisis de esquemas de flujo de proceso, que formarán parte de un planta de proceso económica, segura y de fácil operación y control.

La creación de esquemas de flujo de proceso, implica la creación y el desarrollo de la configuración del sistema que permita llevar a cabo todas las transformaciones requeridas. En este sentido, esta actividad, se ha practicado desde hace muchos años.

Hasta antes de 1950, el desarrollo y la creación de plantas de proceso químico se basaba en los conocimientos provenientes de la experiencia de los diseñadores, esto se debía a que la producción de bienes y productos químicos tenía como único objetivo satisfacer la demanda creciente de las diferentes economías en desarrollo.

El concepto moderno de la ingeniería de procesos surge a partir de 1950, como resultado de la necesidad de aplicar en forma ordenada la información existente y fijar las directrices para el diseño de procesos, utilizando para ello nuevos procedimientos y técnicas que han permitido abandonar el enfoque empírico, para dar lugar al científico.

En el sentido actual, la ingeniería de procesos implica la consideración de todos los posibles arreglos de los diferentes pasos del proceso, siendo su objetivo el de identificar la estructura y condiciones de operación óptimas, por lo que el avance de la ingeniería de procesos se ha visto sujeto al desarrollo de nuevas metodologías de cálculo y al de sistemas de cómputo para implementarlas.

Actualmente, tomando en cuenta que la creación de procesos nuevos implica la determinación de su estructura y condiciones óptimas de operación, casi se puede asegurar que ninguna planta de proceso químico se construye sin que para su análisis se haya utilizado un sistema de cómputo especializado.

En un principio los sistemas de cómputo se constituyeron como herramientas para la resolución de operaciones simples dentro de procesos complejos, posteriormente al estudiar con más detalle las operaciones unitarias se aplicaron los sistemas de cómputo a procesos pequeños y sencillos.

Simulación de procesos

La simulación de procesos es la representación de un sistema con modelos matemáticos. En el caso de un proceso químico, los modelos se basan en los fenómenos fundamentales que describen cada operación. Cuanto mejor sea el modelo, tanto más eficiente y confiable será la simulación, al igual que la interpretación de los resultados obtenidos. En la actualidad, la simulación forma parte importante del análisis de procesos.

Existen dos modalidades para implementar la simulación de procesos químicos. La primera se conoce como simulación dinámica, la cual trata de representar sistemas con régimen transitorio en su operación; caso común en el arranque o paro de una planta, en los casos en que ésta opera bajo condiciones no contempladas en su diseño y cuando se requiere conocer la respuesta del proceso bajo condiciones de operación anormales con el fin de formular los sistemas de control.

La otra forma se refiere a la simulación de procesos en estado estacionario o a régimen permanente, es decir, se considera que las condiciones de operación y los flujos de las corrientes de proceso son constantes (no cambian con el tiempo), esta situación incluye las condiciones de diseño y de operación normal del proceso.

Debido a que la representación de un proceso usando modelos matemáticos implica el manejo de un gran número de operaciones matemáticas, la simulación de procesos ha tomado como herramienta la existencia de sistemas de cómputo capaces de realizarlas, dado que el avance en materia de computación permite el manejo de procesos completos con sistemas especializados (sistemas de simulación de procesos o simuladores de procesos).

Un sistema de simulación de procesos se define como un sistema que acepta información acerca de un proceso a nivel de diagrama de flujo del mismo y es capaz de implementar en detalle los análisis utilizados en el desarrollo, diseño y operación de procesos.

Desde finales de la década de los cincuentas se han utilizado sistemas basados en modelos matemáticos sobre los fenómenos físicos y químicos para simular el funcionamiento de procesos de producción. Estos sistemas ejecutan balances de materia y energía en estado estacionario, calculan el tamaño y el costo de equipos y permiten optimizar el proceso.

El ímpetu al que se debe la expansión de la simulación de procesos ha sido su habilidad para ayudar a generar diseños y estrategias de operación superiores. Tres fuerzas

Generalidades

han apoyado esta tendencia: el desarrollo de sistemas que son muy sencillos de utilizar, el mejoramiento en las capacidades de los sistemas de ingeniería y la descentralización de la infraestructura de las computadoras.

Los datos de entrada de un sistema de simulación de procesos generalmente son la información contenida en el diagrama de flujo de proceso, mientras que los datos de salida, son todas las características de las corrientes de proceso, los parámetros y dimensiones de los equipos y una evaluación económica del mismo. Por lo que un sistema de simulación ayuda a tomar decisiones concernientes al desarrollo, diseño y operación de procesos químicos.

Los cuatro elementos principales de un sistema de simulación de procesos son:

- Modelos
- Algoritmos
- Apoyo computacional
- Interfase con el usuario

Los modelos son el fundamento de cualquier sistema de simulación, éstos son la base del análisis. Los modelos utilizados en la representación de un proceso químico son todas aquellas relaciones matemáticas derivadas a partir de las leyes de la conservación, ecuaciones de velocidad de reacción, ecuaciones de cálculo de propiedades fisicoquímicas, relaciones de conexión y restricciones de diseño y control.

Los modelos matemáticos que describen un proceso se representan por ecuaciones algebraicas o diferenciales, estos deben ser rigurosos, detallados, precisos, válidos y generales, es decir, aplicables a todo tipo de proceso.

Ya se ha mencionado que los modelos de las diferentes operaciones unitarias son el fundamento de los sistemas de simulación (véase la estructura del modelo de una operación unitaria en la figura 1), éstos están formados por conjuntos de ecuaciones de la forma:

$$\text{variables de salida} = f(\text{variables de entrada})$$

Las variables de entrada son los valores de las corrientes de alimentación al proceso y los parámetros de los diferentes modelos utilizados para determinar las diversas unidades de proceso. Las variables de salida son los valores de todas las corrientes de salida del proceso y los resultados de las variables de operación que no fueron especificados.

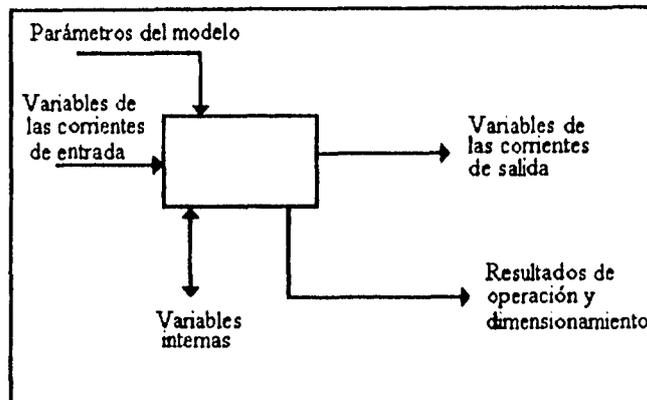


Figura 1. Estructura del modelo de una operación unitaria.

El siguiente bloque lo componen los algoritmos, estos utilizan los modelos para producir los resultados requeridos. Con los algoritmos se resuelven los problemas matemáticos generados por los modelos. El tipo de problema matemático que debe resolverse depende significativamente del tipo de análisis que interese, aunque casi siempre hay que resolver conjuntos de ecuaciones diferenciales y algebraicas (lineales y no lineales) por lo que el algoritmo a ser utilizado debe cumplir con ciertos requisitos.

Los algoritmos utilizados deben ser robustos, tan generales como sea posible, eficientes en su ejecución, almacenamiento y manejo de información, claros y elegantes. Continuamente todos estos requisitos se contraponen unos con otros, por lo que se debe hacer un análisis con objeto de encontrar su mejor combinación.

El apoyo computacional incluye todos aquellos implementos que se requieran para ejecutar los algoritmos en una computadora y un sistema operativo en especial, está conformado principalmente por los lenguajes de programación, el sistema de documentación, estructura de datos, interfase con el sistema de archivos, todo lo relativo a los programas y a la arquitectura del sistema. El apoyo computacional debe entenderse, ser de fácil mantenimiento, sencillo de ser modificado y ser tan transportable como sea posible.

El domo de la estructura es ocupado por la interfase con el usuario la cual incluye el lenguaje de entrada por medio del cual se describe el problema, informes que contienen los

Generalidades

resultados, la documentación que explica el funcionamiento y como usar el sistema y los protocolos de interacción con otros programas y sistemas. La interfase con el usuario debe de permitir la introducción de información tan natural como sea posible así como verter los resultados de la forma más útil.

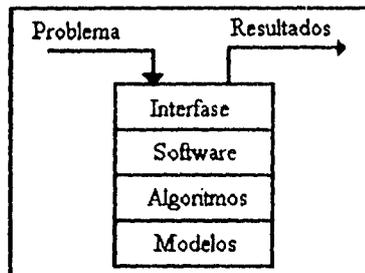


Figura 2. Elementos de un sistema de simulación.

Simulador de procesos Aspen Plus

La década de los cincuentas puede ser considerada como el período de transición de los cálculos manuales hacia los cálculos mecanizados, esto, debido al desarrollo de las computadoras digitales de alta velocidad y al uso generalizado de las computadoras analógicas.

En un principio sólo fueron diseñados sistemas capaces de simular operaciones individuales dentro de un proceso. En este punto fue de vital importancia la participación de las diversas compañías en el desarrollo de programas que pudiesen ser utilizados.

A partir de 1960 se resaltó la necesidad de construir sistemas capaces de simular procesos completos. En este ámbito alrededor de 1963 se dieron a conocer dos simuladores de proceso, el primero desarrollado por la compañía M W Kellogg y otro llamado CHEOPS (Chemical Engineering Optimization System). Por lo que, para llevar a cabo la simulación de procesos de cualquier grado de complejidad, los ingenieros de proceso requerían la ayuda de los especialistas en todo momento.

Generalidades

En 1966 la compañía Monsanto logra la integración de diversos modelos de operaciones unitarias, modelos de cálculo de propiedades y transferencia de datos para dar origen a uno de los primeros simuladores de procesos orientado a los usuarios.

El sistema, que podía ser operado por ingenieros de proceso, fue llamado FLOWTRAN y se comercializó entre 1969 a 1973, esto incluyó la licencia a compañías externas. En 1974 el sistema se puso a disposición de instituciones educativas y en 1975 lo usaban más de 25 departamentos de ingeniería química.

En 1976 el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) selecciona FLOWTRAN como base de la estructura de un nuevo sistema, ASPEN (Advanced System for Process Engineering), que además de aplicarse a todas las operaciones líquido vapor conocidas y tener todas las capacidades de un sistema moderno, es capaz de manejar corrientes y operaciones con la presencia de sólidos.

Por todo lo anterior es posible reconocer tres generaciones de simuladores de procesos. La primera generación esta compuesta por todos los sistemas que en un principio se utilizaron para simular operaciones individuales y aquellos operados por especialistas. La segunda generación marca la transición hacia el desarrollo de sistemas orientados hacia el usuario, además de manejarse procesos cada vez más complejos, y por último la tercera generación marca su inicio con ASPEN, que se caracteriza por incluir algoritmos capaces de manejar procesos en presencia de sólidos.

En 1983 la creación de más de 600 subrutinas de cálculo y modificaciones en 300 ya existentes dan como resultado el simulador de procesos ASPEN PLUS versión comercial apoyada por ASPEN Technology Inc.

ASPEN cuenta con gran número de modelos de cálculo. El sistema calcula todas las propiedades termofísicas y de transporte requeridas para llevar a cabo la simulación. Para la resolución de estos modelos, ASPEN cuenta con la información contenida en cuatro bancos de datos que incluyen los valores de los diversos datos físicos de los componentes presentes en el sistema, además cuenta con las capacidades para poder reemplazar o introducir en una simulación datos que no se encuentren registrados, la de poder definir cualquier modelo de propiedades, utilizando para ello rutinas programadas en FORTRAN y la de tener todo un sistema capaz de generar valores estimados para los parámetros no contenidos en los bancos de datos.

Generalidades

En términos de los modelos de operaciones unitarias, se cuenta con un conjunto generalizado de módulos para simular cualquier tipo de proceso, incluyendo el manejo de sólidos, electrolitos y sustancias complejas, existiendo la posibilidad de definir operaciones que no estén incluidas mediante el uso de rutinas de cómputo. Los modelos disponibles contenidos tienen la característica de no tener limitantes a nivel dimensional ya que en todos ellos se pueden especificar cualquier número de componentes, alimentaciones, etapas y reacciones.

DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

Perspectiva histórica

Metanol es un producto químico básico en la industria. La capacidad de las plantas de metanol tiende a aumentar y existe la posibilidad de que se utilice principalmente como combustible o como producto básico en la elaboración de éstos.

El primer proceso comercial para la producción de metanol fue la destilación destructiva de madera, de aquí que el nombre común para el metanol sea alcohol de madera. La única fuente de metanol desde 1830 hasta mediados de 1920 era el metanol natural o derivado de madera. La obtención de metanol utilizando esta tecnología se volvió obsoleta cuando se comercializó por BASF una nueva ruta de síntesis, en la que se produce metanol sintético a partir de hidrógeno y óxidos de carbono. Antes de la introducción del metanol sintético, el metanol se consideraba una especialidad y se utilizaba principalmente como desnaturalizante de etanol. Con la introducción del metanol sintético, el precio disminuyó notablemente y la demanda aumentó para utilizarlo como intermediario en otros procesos químicos.

El primer proceso comercial de metanol sintético a gran escala fue introducido por BASF en 1923. El proceso se basaba en la reacción de gas de síntesis (mezcla de hidrógeno con óxidos de carbono) sobre un catalizador de óxidos de cinc y de cromo a temperaturas y presiones relativamente altas (300 a 400°C y 250 a 350 atm). El gas de síntesis se obtenía a partir de carbón, por medio de la reacción de gas de agua.

Hasta la Segunda Guerra Mundial, se producía metanol principalmente como coproducto usando gas de síntesis obtenido a partir de carbón via las reacciones de gas de agua así como usando los gases de fermentación, hornos de coque y hornos de acero.

Uno de los mayores avances tecnológicos fue el cambio de carbón a gas natural, como fuente para producir el gas de síntesis utilizado en los convertidores de metanol. El gas natural produce un gas de síntesis de mucho mayor calidad, con menos impurezas y menos venenos para catalizadores.

A finales de los años sesentas, se introducen los procesos de media y baja presión. En 1966, ICI introduce el proceso para producir metanol a baja presión, utilizando un catalizador con cobre.

Descripción del Proceso

La gran actividad del catalizador hace posible que la reacción se lleve a cabo a temperaturas bajas (220 y 280°C), permitiendo operar a presiones significativamente menores (50 atm). El reactor opera en forma adiabática por lo que el aumento de la temperatura a la salida de cada lecho es grande. Por esta razón se necesitan reactores de múltiples lechos con enfriamiento intermedio.

El proceso ICI a baja presión era mucho más económico que el de alta presión, tanto en la inversión de capital como en costos de operación. Las ventajas más importantes del proceso de baja presión, comparado con el de alta presión son:

- Aumentar la eficiencia al producir metanol reduciendo el consumo de energía y aumentando la selectividad
- Reducir los costos de mantenimiento para los compresores de gas.
- Trenes de conversión más simples y de mayor capacidad
- Aumento en la rentabilidad de la operación de la planta
- Mayor flexibilidad

Entre 1960 y 1970 muchas compañías anunciaron sus procesos de baja presión y sus catalizadores. Entre estas compañías se encuentran Lurgi, Mitsubishi Gas Chemical y Topsoe/Nihon. Además del catalizador, estos procesos se diferencian principalmente en el diseño del convertidor; por ejemplo ICI utiliza un reactor adiabático tipo *quench* mientras que Lurgi utiliza un reactor de coraza y tubos, en el que se utiliza agua en ebullición para controlar la temperatura.

En el diagrama simplificado del proceso de producción de metanol, de la figura 3, en el que se utiliza la reformación de gas natural para la producción de gas de síntesis, no se muestra la integración del sistema de recuperación de calor.

Actualmente, los procesos de producción de metanol se clasifican según sea la presión de operación, por lo que se encuentran procesos de alta presión (250 a 350 atm), de media presión (100 a 250 atm) y de baja presión (50 a 100 atm).

METANOL A PARTIR DE GAS NATURAL

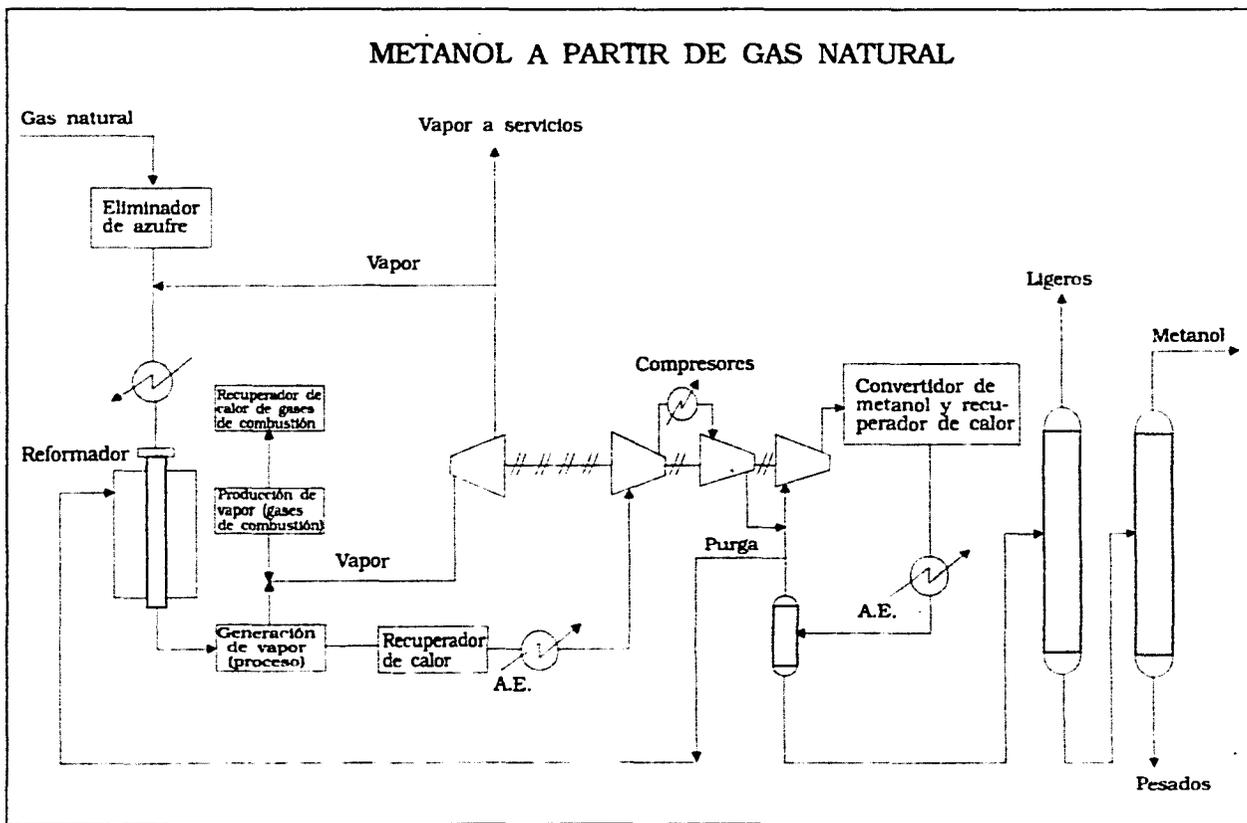


Figura 3

Descripción del Proceso

En el proceso, de síntesis de metanol a partir de gas natural, se pueden distinguir tres secciones principales: la producción de gas de síntesis, la síntesis de metanol y la purificación. El gas de síntesis se puede producir por la reformación de gas natural o por otros métodos, como oxidación parcial de carbón o combustibles o bien por reformación de naftas. Sin embargo, el ciclo de producción de metanol y la sección de purificación no se ven afectados.

Descripción del proceso de producción de metanol a partir de gas natural

Producción de gas de síntesis

En la sección de reformación (producción de gas de síntesis), el gas natural pasa por una torre desulfuradora para eliminar prácticamente todo el azufre que contenga, ya que los compuestos con azufre envenenan el catalizador de níquel del reformador; generalmente se deben alcanzar concentraciones menores a 0.5 ppm en volumen de H₂S. Para eliminar los compuestos con azufre, se utiliza un proceso de adsorción sobre una cama de óxido de cinc.

Cuando se ha eliminado el azufre, el gas se mezcla con vapor de agua, se precalienta y se alimenta al reformador, donde pasa a través de un arreglo de tubos calentados a fuego directo que contienen catalizador de níquel, para así producir gas de síntesis (mezcla de CO, CO₂ y H₂ principalmente). Las principales reacciones que se llevan a cabo son las siguientes:

Reformación de gas natural



Reacción inversa de gas de agua



Hidrodescomposición de hidrocarburos



El producto del gas reformado se puede describir adecuadamente asumiendo que las últimas dos reacciones se llevan a cabo completamente y una composición a la salida de CO,

Descripción del Proceso

CO₂, H₂, CH₄ y H₂O con un acercamiento al equilibrio con respecto a las primeras reacciones a condiciones típicas de salida de 840 a 880 °C.

La primera reacción es endotérmica y produce un aumento en el volumen (número de moles), mientras que la segunda es exotérmica y se lleva a cabo sin cambio en el volumen. Por lo tanto, el grado de conversión del metano aumenta al aumentar la temperatura, al aumentar la presión parcial del vapor de agua y al disminuir la presión total del sistema.

Pueden ocurrir reacciones indeseables que conduzcan a la depositación de carbón en las paredes de los tubos o en la superficie o poros del catalizador; esto se puede evitar asegurándose que siempre se tenga un exceso de vapor, sobre el mínimo calculado utilizando las ecuaciones de equilibrio. Si la relación de moles de agua a moles de carbono disminuye de por debajo de 2, a altas temperaturas se puede presentar la descomposición térmica del metano o de los hidrocarburos, produciéndose la depositación de carbón. La relación mínima de vapor a carbón varía con la composición de la alimentación, las temperaturas y la edad del catalizador; pero, en general, la relación crítica aumenta con el incremento de la temperatura. La mayoría de los reformadores comerciales operan con relaciones de vapor a carbón, que varían entre 3 y 4.5. (9)

En regiones de alta temperatura o en áreas donde el gas no ha alcanzado el equilibrio, se deben hacer consideraciones cinéticas. La formación de carbón en estas situaciones puede ser influenciada por la composición del catalizador, por lo que actualmente se incluyen compuestos de metales alcalinos para prevenir la formación de carbón y aumentar la durabilidad del catalizador.

Como la reacción global es endotérmica, es necesario suministrar energía para llevar a cabo este proceso, por lo cual se calientan los tubos a fuego directo, los gases de combustión salen del reformador a una temperatura cercana a 980°C para pasar a un tren de recuperación de calor, donde se utilizan para precalentar la carga al reformador, el aire para la combustión, y para generar vapor y sobrecalentarlo.

El gas de síntesis se enfría para condensar el exceso de agua, ya que como el agua es un producto de las reacciones de síntesis de metanol, y puede considerarse que éstas alcanzan el equilibrio, es importante que en la alimentación al reactor de síntesis de metanol se tenga la menor cantidad posible de agua. El calor de esta corriente se utiliza para generar

Descripción del Proceso

vapor, para precalentar el gas natural y para calentar el agua de alimentación a los domos de generación de vapor.

La síntesis de metanol requiere, estequiométricamente, de una alimentación de gas de síntesis con una relación $H_2/(2CO_2 + 3CO)$ cercana a 1.05. Sin embargo, la reformación de gas natural produce una relación cercana a 1.4. Para catalizadores de bajas presiones, el exceso de hidrógeno mejora la efectividad del catalizador, por lo que no hay que eliminar el exceso de hidrógeno. El exceso de hidrógeno es purgado durante la síntesis y se utiliza como combustible para la reformación.

Las plantas de metanol de baja presión pueden estar diseñadas para recibir una adición de CO_2 , aprovechando que se tiene un exceso de hidrógeno, de manera que se reduce el consumo de gas natural. Sin embargo, para considerar esta opción se requiere de una fuente barata y accesible de CO_2 .

Sección de síntesis de metanol

El metanol se produce por hidrogenación catalítica de monóxido de carbono y/o dióxido de carbono según las siguientes reacciones:



La reacción de producción de metanol es exotérmica y produce una reducción de moles. Así pues, la producción de metanol aumenta conforme disminuye la temperatura y aumenta la presión. La ecuación (6) que se conoce como reacción inversa de gas de agua, es endotérmica; como resultado de lo anterior, el avance de esta reacción aumenta conforme aumenta la temperatura.

La conversión máxima de óxidos de carbono a metanol está limitada por el equilibrio termodinámico. La composición de equilibrio de cualquier mezcla de hidrógeno, óxidos de carbono, metanol, agua e inertes (metano y nitrógeno) se puede calcular utilizando las siguientes ecuaciones que definen el equilibrio termodinámico.

$$K_5 = \frac{f_{MeOH}}{f_{CO} f_{H_2}} \quad (7)$$

$$K_6 = \frac{f_{CO_2} f_{H_2}}{f_{CO} f_{H_2O}} \quad (8)$$

Descripción del Proceso

donde f_i es la fugacidad del componente i .

Las fugacidades se pueden calcular a partir de los coeficientes de fugacidad; los coeficientes de fugacidad se pueden calcular a partir de ecuaciones de estado.

El catalizador que se utiliza en síntesis a alta presión (250-350 atm) es óxido de cinc-óxido de cromo. Es un catalizador más robusto que el catalizador con base de cobre que se utiliza para baja presión y puede tolerar niveles mayores de temperatura y azufre. No obstante, el catalizador de óxidos de cobre y cinc es más activo y puede funcionar a menores presiones (50-250 atm) y temperaturas (200-300°C).

Los catalizadores de baja actividad deben operar a mayores temperaturas para aumentar la velocidad de la reacción hasta un nivel aceptable; como resultado, también se necesitan mayores presiones para elevar los límites de conversiones de equilibrio. Los catalizadores de mayor actividad operan a temperaturas mucho menores y a temperaturas menores la síntesis de metanol es factible técnica y económicamente a presiones tan bajas como 50 atm. En cualquiera de los casos, las conversiones de óxido de carbono reales estarán limitadas a un poco menos que las conversiones de equilibrio; por tanto el producto gas debe recircularse nuevamente al reactor de síntesis de metanol (convertidor) siguiendo la separación del producto para asegurar el empleo óptimo del gas.

Los catalizadores comercialmente disponibles, con base de óxidos de cobre y cinc, para la síntesis de metanol a baja presión, tienen una selectividad superior al 99% para la producción de metanol referida a los óxidos de carbono.

Los catalizadores para baja presión operan en un intervalo de temperatura entre 200 y 300°C, donde la reacción de metanación es despreciable. Los hidrocarburos y ceras (alcanos C_2-C_{20}), se producen a niveles de ppm por la reacción de *Fischer-Tropsch*¹. Los alcoholes distintos del metanol se producen en pequeñas cantidades, siendo la impureza principal el etanol. La formación de alcoholes superiores se suprime conservando la temperatura de reacción tan baja como sea posible, para la velocidad de producción de metanol deseada. También suprimen la formación de alcoholes superiores y otros subproductos las altas concentraciones de hidrógeno. Otros subproductos que se producen en pequeñas cantidades son aldehídos, cetonas, éteres y ésteres.

¹ $nCO + (2n-1)H_2 \leftrightarrow C_nH_{2n+2} + nH_2O$

Descripción del Proceso

Termodinámicamente es más factible la formación de la mayoría de los subproductos a partir del gas de síntesis, particularmente C_2^+ , que la síntesis de metanol. Debido a que el metanol constituye el producto principal, las reacciones que constituyen impurezas se deban controlar más en forma cinética que termodinámicamente.

Es necesario enfriar los productos de la reacción de síntesis de metanol para poder separar, por condensación, el metanol y el agua producidos y para poder recircular los gases que no hayan reaccionado.

El gas obtenido en el reactor se enfría para separar por condensación el metanol y el agua principalmente. Se purga una fracción de los gases para evitar la acumulación de inertes, mientras que la otra, se utiliza como recirculación en el ciclo de síntesis de metanol. El líquido compuesto principalmente por metanol, agua, subproductos formados en el convertidor y gases disueltos se envía a la sección de purificación.

Purificación

La corriente de metanol crudo contiene aproximadamente 18% de su peso de agua o más, además de otras impurezas incluyendo etanol, dimetileter, gases disueltos tales como dióxido de carbono, alcoholes de mayor punto de ebullición, éteres, ésteres, cetonas, hidrocarburos, aminas y otros. Independientemente de la selectividad del catalizador, una corriente de metanol crudo típico contendrá, al menos, trazas de casi todos los subproductos posibles.

La presión tiene un efecto importante. El metanol crudo del proceso a baja presión (menos de 100 atm) generalmente contiene un 1% de su peso total de subproductos, en tanto que el metanol crudo de procesos de alta presión (300 atm) contiene de 3 a 5% en peso de subproductos.

El metanol crudo se refina para producir metanol puro por destilación. El primer paso de cualquier sistema de purificación de metanol es una reducción de la presión para *flashear* los gases disueltos. Este paso puede ser el único necesario para algunos usos del metanol; sin embargo, hay que asegurarse de que el producto no contenga componentes que dañen al catalizador en algún proceso subsiguiente.

Después del *flash* la corriente de metanol crudo es alimentada a una o más columnas de destilación. Si se omiten algunos requisitos de la especificación de grado A (Apéndice 1), es posible efectuar la purificación en una sola columna. En un proceso de ese tipo se elimina

Descripción del Proceso

el agua por el fondo de la columna, los alcoholes pesados se eliminan en una salida lateral abajo del plato de alimentación, el metanol puro se recupera como una corriente lateral cerca de la parte superior de la columna y los ligeros se eliminan por el domo.

Generalmente, se necesitan dos columnas para producir metanol con especificación de Grado A. La primera columna (de 40 a 50 platos) se utiliza para eliminar por el domo los gases disueltos y los compuestos de bajo punto de ebullición, tales como dimetileter y acetona. La corriente del fondo de la primera columna se alimenta a una segunda columna que tiene de 60 a 100 platos. Las dos columnas operan esencialmente a presión atmosférica aunque cada una puede operar a presiones ligeramente mayores (de 2 a 3.5 atm man.). Una mayor presión permite una disminución del diámetro de la columna y un ahorro en la inversión.

Para cumplir con las especificaciones más estrictas de etanol (menos de 250 ppm) generalmente se necesita una tercera columna. Esta tercera columna puede ser de purificación o de recuperación.

SIMULACIÓN DEL PROCESO

El objetivo de esta simulación fue obtener resultados suficientemente parecidos a los del diagrama de flujo de proceso, mismo que se utilizó como fuente de información para la mayoría de las características de las corrientes de alimentación, corrientes de corte y las condiciones de operación de los equipos. En los casos en los que fue insuficiente la información del diagrama de flujo, ésta se obtuvo directamente de la planta.

Se simularon por separado las distintas secciones que conforman la planta Metanol II del Complejo Petroquímico Independencia de PEMEX, con la finalidad de que, una vez completada satisfactoriamente la simulación de dichas secciones se puedan reunir y se realice la simulación completa de la planta.

La secuencia que se utilizó para llevar a cabo la simulación fue la siguiente:

1. Selección de unidades de trabajo. Consistió en elegir el sistema de unidades en las que se suministrarán los datos de entrada y en las que se obtendrán los resultados. Para esta simulación se utilizó el sistema métrico, modificando algunas de las unidades establecidas, como por ejemplo, la presión de atmósferas a kg/cm^2 , para que coincidan con las unidades en las que se encuentra el diagrama de flujo de proceso.
2. Especificación de los componentes presentes en el sistema. En esta parte se comprobó que todos los componentes que participan en la simulación estuvieran contenidos en el banco de datos del sistema. Los compuestos utilizados fueron dióxido de carbono, monóxido de carbono, hidrógeno, metano, nitrógeno, agua, metanol, etano, propano, oxígeno, formaldehído, éter dimetilico, etanol y acetona.
3. Definición de los modelos de cálculo de propiedades. Los modelos de cálculo de propiedades adquieren gran importancia debido a la influencia que tienen sobre los resultados de la simulación. Su selección es fundamental para la determinación adecuada de las propiedades termofísicas. La selección del método de cálculo de propiedades se basó, en los trabajos presentados por Chang y col. (6) y Graaf y col. (7). En el primero se comparan los resultados obtenidos con las ecuaciones de Peng Robinson y Soave-Redlich-Kwong, concluyendo que se pueden usar de manera indistinta mientras que en el

Simulación del Proceso

segundo encontraron que la ecuación de Soave-Redlich-Kwong proporciona mejores resultados que la de Peng Robinson para el cálculo del equilibrio de las reacciones de síntesis de metanol y la reacción de inversión de gas de agua. Por lo anterior se utilizó la ecuación de Soave-Redlich-Kwong para el cálculo de propiedades.

Al simular las últimas dos torres de la sección de destilación, se presentaron problemas de convergencia, en estos casos se recomienda utilizar un algoritmo para soluciones no ideales, que por sus características requiere de métodos de cálculos de propiedades con coeficientes de actividad, por lo cual para estos dos equipos se utilizó el modelo UNIFAC para el cálculo de coeficientes de actividad.

4. Partición del proceso en bloques unitarios y asignación de un modelo para cada operación. Se establecieron las operaciones que se deben simular a partir del diagrama de flujo. A continuación se muestran los módulos utilizados en la simulación, así como las operaciones que representan

Módulo	Operación
HEATER	Enfriador, calentador
HEATX	Cambiador de calor de proceso
MIXER	Mezclado de corrientes
FSPLIT	División de corrientes
PUMP	Bomba centrífuga
FLASH2	Tanque flash de dos fases
RADFRAC	Torre de destilación multicomponente
RGIBBS	Reactor al equilibrio (Gibbs)
REQUIL	Reactor al equilibrio (K equilibrio)
COMPR	Compresor

5. Especificación de las condiciones de operación. Se definieron los grupos de variables a especificar para las distintas operaciones unitarias. Los grados de libertad (variables a especificar) se pueden satisfacer con diferentes combinaciones de variables. En cada caso se especificaron las variables para las que se tenía información suficiente.

Simulación del Proceso

6. Especificación de las corrientes de alimentación al proceso. Se realizó dependiendo de la forma en la que se encontraban los datos en el diagrama, ya sea en flujo y composición molares para gases o flujo y composición en masa para líquidos. En la simulación de las secciones por separado, algunas de las corrientes definidas como corrientes de alimentación no eran corrientes de alimentación al proceso, éstas se convirtieron después en corrientes de corte.
7. Definición de las corrientes de corte. En la simulación de cada sección se definieron las corrientes de corte necesarias para convertir el sistema en acíclico. Se utilizó un conjunto de corte que permitió una rápida convergencia.
8. Definición de los métodos de convergencia. Se utilizó el método de Broyden.

El archivo con los datos de entrada utilizado para la simulación de la planta de metanol así como los diagramas de bloques de las tres secciones se encuentran en el Apéndice 2.

A continuación se muestran los aspectos más relevantes en la simulación de cada una de las secciones.

Sección de reformación

El equipo esencial de esta sección es el reformador de gas natural para producir gas de síntesis. Como ya se mencionó, las reacciones que se llevan a cabo en el reformador se encuentran limitadas por el equilibrio termodinámico y se pueden representar adecuadamente utilizando un acercamiento en la temperatura tanto para la reacción de reformación de metano como para la reacción inversa de gas de agua.

Para determinar el acercamiento en temperatura que se debía utilizar en la simulación, se determinaron primero las composiciones al equilibrio para el sistema en un intervalo de temperatura. El cálculo se llevó a cabo mediante un análisis de sensibilidad sobre el cambio en la composición de salida del reformador al variar la temperatura de salida de éste. Para el cálculo del equilibrio, se utilizó el modelo de reactor de Gibbs (minimización de la energía de Gibbs) suponiendo que únicamente se tiene a la salida CO, CO₂, metano, hidrógeno, nitrógeno (inerte) y agua. Aunque para realizar el cálculo de equilibrio mediante

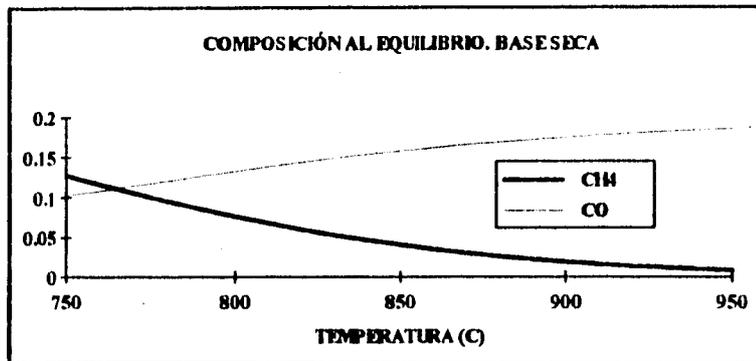
Simulación del Proceso

la minimización de la energía de Gibbs no es necesario definir las reacciones que se llevan a cabo, partiendo de que en el sistema se encuentran únicamente los compuestos antes mencionados, éste se puede definir mediante las dos siguientes reacciones:

Reformación de gas natural



Reacción inversa de gas de agua



En la gráfica anterior se muestran los datos obtenidos del cálculo del equilibrio. Se observa que a la temperatura real de salida del reformador, en el equilibrio, la composición de metano (0.0327) es menor que en la composición real de salida (0.0358); mientras que la composición de CO es mayor al equilibrio (0.1639) que la real (0.1615). Es importante recordar que se está utilizando el término real para los datos del diagrama de flujo ya, que en esta simulación la información del diagrama de flujo fue la que se tomó como punto de partida, suponiendo que la planta en operación normal presenta las condiciones que se tienen en el diagrama de flujo.

Lo anterior indica que ambas reacciones presentan un acercamiento al equilibrio, sin embargo este acercamiento (definido como temperatura real menos temperatura al equilibrio) es negativo para la primera reacción y positivo para la segunda, debido a que una es exotérmica y la otra es endotérmica.

Simulación del Proceso

Después de realizar diferentes corridas para obtener la composición a la salida del reformador lo más parecida a la real, se encontró que el acercamiento de temperaturas debe ser de -20°C para la primera reacción y de 25°C para la segunda.

En conjunto las reacciones llevadas en el reformador requieren de energía, ésta se suministra por el calor generado en la combustión de gas natural. Se simuló por separado la combustión, también como reactor al equilibrio, calculado por la minimización de la energía de Gibbs. Se encontró que con los datos del diagrama, el calor generado por la combustión es mayor que el que se requiere en la reformación. La diferencia se consideró calor perdido por radiación.

Como ya se mencionó, aunque físicamente sea un solo equipo, para la simulación se separaron en dos bloques, los equipos de calentamiento a fuego directo. Estos son el reformador y el quemador secundario. Para el reformados se calculó por separado lo que corresponde propiamente a las reacciones de reformación y las reacciones de combustión; para ambos bloques se utilizó el módulo RGIBBS para el cálculo del equilibrio químico. El quemador secundario (BB101), es un equipo en el que se genera vapor por lo que para la simulación se utilizó el módulo de RGIBBS para simular las reacciones de combustión y el módulo HEATER para la generación de vapor, especificando como calos suministrado, el calor generado por las reacciones de combustión.

Es importante señalar que no se consideró conveniente especificar los módulos con los que se calcularon las reacciones de combustión como adiabáticos, obtener la temperatura de flama adiabática, para después utilizar un intercambiador virtual para enfriar los gases de combustión hasta la temperatura de salida de la sección de radiación, debido a que al especificar el reactor como adiabático, el equilibrio para las reacciones de combustión se calculaba a partir de la temperatura de flama adiabática, teniéndose una composición significativamente diferente a la real. Esto se debe a que al ser las reacciones de combustión exotérmicas, el aumentar la temperatura a la cual se calcule el equilibrio, disminuye el avance de la reacción, y como resultado se obtenía una cantidad importante de CO, aún cuando había oxígeno en exceso.

Sección de síntesis de metanol

En esta sección el gas de síntesis se comprime, se calienta utilizando como fluido caliente el producto del reactor de síntesis de metanol para después alimentarse a éste. El gas que sale del reactor de síntesis se enfría para, principalmente, separar el metanol y el

Simulación del Proceso

agua de los gases que no reaccionaron. Una parte de los gases se purga para evitar la acumulación de inertes y la otra se comprime y se recircula al reactor de síntesis de metanol. El metanol, agua y productos secundarios se envían a la sección de purificación.

En los estudios reportados por Chang y col. (6) y Graaf y col. (7) se establece que la composición al equilibrio, para las reacciones de síntesis de metanol, se puede determinar utilizando ecuaciones de estado. Se comprobó que si se especifica un reactor en el cual se calcule el equilibrio para las dos reacciones principales que se llevan a cabo, la composición que se obtiene es bastante parecida a la real; sin embargo al intentar incorporar en el cálculo de la composición al equilibrio las reacciones de formación de productos secundarios, éstas se favorecieron más que las reacciones de formación de metanol. En la realidad esto no ocurre porque el catalizador para la síntesis de metanol es bastante selectivo.

Los módulos RGIBBS y REQUIL pueden utilizarse para calcular el equilibrio en sistemas con reacción química. REQUIL realiza los cálculos de equilibrio resolviendo las ecuaciones de equilibrio químico y físico simultáneamente, mientras que RGIBBS minimiza la energía de Gibbs con la restricción del balance atómico. REQUIL es conveniente cuando se conoce la estequiometría de la reacción y solamente algunas reacciones (de las muchas posibles) alcanzan el equilibrio. RGIBBS no necesita la estequiometría de la reacción y es preferible cuando todo el sistema alcanza o se aproxima al equilibrio. Por esto en la sección de reformación se utilizó el módulo RGIBBS para simular los reactores (reformación y combustión) mientras que en esta sección, se utilizó el módulo REQUIL para el convertidor de metanol, pues únicamente alcanzan el equilibrio las reacciones de síntesis de metanol.

En el diagrama de flujo no se especifican subproductos a la salida del reactor de síntesis, sino que en la sección de purificación se utilizan los términos de "ligeros" y "pesados" refiriéndose a éstos. El suponer que no se formaban subproductos, hubiera implicado la utilización de dos torres de destilación para separar una mezcla binaria, caso que resulta absurdo, por lo que se definieron como subproductos, los que se consideran principales: etanol, formaldehído, éter dimetílico y acetona.

Para determinar la proporción en que estos se forman, se utilizó información proporcionada en la Planta Metanol II y, para definir el avance de éstas, se hicieron diversos cálculos para que la composición del líquido calculada que se envía a purificación coincidiera con la presentada en el diagrama.

Simulación del Proceso

Para definir al sistema reaccionante, se especificaron como reacciones al equilibrio, las reacciones para la formación de metanol, mientras que para las reacciones secundarias se especificó una conversión referida a la composición de alimentación del reactor.

Sección de purificación

El metanol crudo obtenido de la sección de síntesis de metanol, es enviado a un tanque *flash*, donde se reduce la presión, para disminuir la cantidad de gases disueltos que se encuentran en esta corriente. El líquido es enviado a la primera torre de destilación, donde se obtienen por el domo los gases disueltos y los productos ligeros (acetona, éter y formaldehído) y por los fondos se obtiene principalmente metanol, agua y etanol. Los fondos de esta torre son enviados a una segunda torre en la que se obtiene por el domo, metanol puro y por el fondo agua, etanol y parte del metanol alimentado. Los fondos son enviados a una tercera torre que se utiliza para purificar el agua, obteniéndose ésta por el fondo y, por el domo, se obtienen el metanol y el etanol que fueron alimentados.

En esta sección se presentaron problemas de convergencia para la segunda y la tercera torre. En los casos en que ocurren estos problemas, se sugiere utilizar el algoritmo para resolución de torres para sistemas fuertemente no ideales. Este algoritmo requiere, para el cálculo de propiedades, un sistema en el que se calculen coeficientes de actividad para la fase líquida, por lo que se utilizó el método UNIFAC para el cálculo de las propiedades del líquido para la segunda y la tercera torre.

Otro factor importante, al especificar una torre de destilación, es la selección de variables que se han de especificar. Con los datos del diagrama de flujo, se cuenta con una cantidad de información tal que se sobreespecifica la torre. En el diagrama de flujo se encuentra el flujo y la composición de la corriente de alimentación, destilado, fondos, reflujo, carga térmica del condensador y del rehornador, además de las presiones en el domo y en el fondo. El diagrama de flujo también presenta información sobre la fase en la que se encuentra el destilado, el número de platos y el plato de alimentación. Con lo anterior, se pueden encontrar diferentes conjuntos de datos que especifiquen la torre de destilación.

Una vez especificado el flujo, la composición y el plato de la alimentación en una torre de destilación, además del perfil de presiones, el número de platos y la fracción de vapor en el destilado, se pueden especificar otras dos variables entre las cuales se encuentran el flujo del destilado, el flujo de los fondos, la relación entre el flujo de destilado y el flujo de alimentación, la relación entre el flujo de los fondos y la alimentación, el reflujo, la cantidad

Simulación del Proceso

de vapor generada en el rehervidor, la relación de reflujo (reflujo/destilado), la relación entre la cantidad de vapor generada en el rehervidor y el flujo de fondos, la carga térmica del rehervidor y la carga térmica del condensador, principalmente, aunque también se pueden especificar la composición de alguna corriente de salida, la recuperación de algún compuesto, la temperatura o alguna otra propiedad en alguna etapa.

Con los datos del diagrama parecía sencillo especificar la fracción de vapor en el destilado, la relación entre el flujo del destilado y el flujo de alimentación y la relación de reflujo. Sin embargo, con estos datos hubo problemas en la convergencia de la torre, por lo que se decidió modificar las variables especificadas. Se encontró que, especificando la fracción de vapor en el destilado, la composición del destilado y la recuperación de metanol en el destilado, la convergencia era mucho más sencilla.

Es necesario señalar que se utilizaron pseudocorrientes en los bloques especificados como torres de destilación para poder acceder las propiedades de corrientes que quedaron definidas dentro del bloque, tales como la corriente de salida del rehervidor y la de entrada al condensador. Al tener el simulador esta capacidad, no se consideró necesario separar los equipos en distintos bloques.

Comparación de resultados

En la siguiente tabla se comparan algunos valores de las propiedades de las corrientes obtenidas con la simulación, flujos y composiciones (fracción mol para gases y fracción masa para líquidos) y los datos del diagrama de flujo; calculando la diferencia entre los resultados obtenidos y los datos del diagrama.

	C11			P11		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición				*	*	
CH ₄				3.58	4.17	0.59
H ₂				73.85	73.37	0.48
CO				16.15	16.30	0.15
CO ₂	4.47	5.33	0.86	6.40	6.15	0.25
N ₂	65.58	68.62	3.04	0.02	0.01	0.01
H ₂ O	27.49	23.93	3.56	0.28kg/m ³	0.29kg/m ³	0.01kg/m ³
O ₂	2.46	2.12	0.34			
Flujo kmol/h	5.00E+03	5.04E+03	0.04E+03	3.11E+03	3.05E+03	0.06E+03

*Composición base seca

Simulación del Proceso

	P26			P3		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición						
CH ₄	8.05	10.14	2.09	9.34	12.02	2.68
H ₂	79.83	79.46	0.37	81.59	81.43	0.16
CO	6.54	5.76	0.78	3.81	2.47	1.34
CO ₂	5.01	4.02	0.99	4.62	3.35	1.27
N ₂	0.05	0.03	0.02	0.05	0.02	0.03
H ₂ O	0.08	0.09	0.01	0.03	0.05	0.02
Metanol	0.44	0.50	0.06	0.56	0.66	0.10
Flujo kmol/h	1.29E+04	1.28E+04	0.01E+04	1.07E+03	1.05E+03	0.02E+03

	P30			P20		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición				*		
CH ₄	8.80	11.23	2.43	3.58	4.17	0.59
H ₂	76.85	75.99	0.86	73.85	73.37	0.48
CO	3.59	2.30	1.29	16.15	16.30	0.15
CO ₂	4.38	3.17	1.21	6.40	6.15	0.25
N ₂	0.05	0.01	0.04	0.02	0.01	0.01
H ₂ O	1.19	1.38	0.19	0.0036kg/m ³	0.0037kg/m ³	0.0001kg/m ³
Metanol	5.14	5.90	0.76			

*Composición base seca

	P42			P43		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición						
Inertes*	0.55	0.82	0.33	2.20	3.19	0.99
Ligeros**	0.06	0.02	0.04	0.25	0.58	0.33
Metanol	87.45	86.65	0.08	99.47	96.10	3.37
Pesados***	0.07	0.06	0.01			
H ₂ O	11.87	12.32	0.45			
Flujo kg/h	2.17E+04	2.26E+04	0.90E+04	5.27E+03	8.18E+03	2.91E+03

*Se consideraron inertes CO, CO₂, N₂, H₂ y CH₄

**Se consideraron ligeros éter dimetilico, formaldehido y acetona

***Se consideró como pesados únicamente al etanol

Simulación del Proceso

	P47			P49		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición						
Inertes*	86.03	84.12	1.91	0.00	0.98	0.98
Ligeros**	0.01	1.76	1.75	10.00	0.55	9.45
Metanol	13.06	14.06	1.00	90.00	98.34	8.34
Pesados***						
H ₂ O						
Flujo kg/h	1.36E+02	2.12E+02	0.76E+02	5.00E+03	7.76E+03	2.76

*Se consideraron inertes CO, CO₂, N₂, H₂ y CH₄.

**Se consideraron ligeros éter dimetilico, formaldehído y acetona.

***Se consideró como pesados únicamente al etanol.

	P50			P51		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición						
Inertes*						
Ligeros**						
Metanol	87.90	87.25	0.65	99.85	99.852	0.002
Pesados***	0.08	0.07	0.01	0.10	0.10	0.000
H ₂ O	12.02	12.56	0.54	0.01	0.013	0.003
Flujo kg/h	2.14E+04	2.21E+04	0.07E+04	1.88E+04	1.92E+04	0.04E+04

*Se consideraron inertes CO, CO₂, N₂, H₂ y CH₄.

**Se consideraron ligeros éter dimetilico, formaldehído y acetona.

***Se consideró como pesados únicamente al etanol.

	P52			P53		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición						
Inertes*						
Ligeros**						
Metanol	3.76	4.62	0.86	95.01	91.10	3.91
Pesados***	0.53	0.41	0.12	0.12	8.76	8.64
H ₂ O	95.71	94.89	0.82	4.87	0.13	4.74
Flujo kg/h	2.69E+03	2.93E+03	0.24E+03	2.65E+03	2.64E+03	0.01E+03

*Se consideraron inertes CO, CO₂, N₂, H₂ y CH₄.

**Se consideraron ligeros éter dimetilico, formaldehído y acetona.

***Se consideró como pesados únicamente al etanol.

Simulación del Proceso

	P58			P61		
	Diagrama	Simulación	Diferencia	Diagrama	Simulación	Diferencia
Composición						
Inertes*				57.44	49.49	7.95
Ligeros**				0.03	1.05	1.02
Metanol		0.76	0.76	42.53	49.32	6.78
Pesados***		0.03	0.03		0.00	
H ₂ O	99.99	99.12	0.77		0.04	0.04
Flujo kg/h	2.57E+03	2.80E+03	0.23E+03			

*Se consideraron inertes CO, CO₂, N₂, H₂ y CH₄.

**Se consideraron ligeros éter dimetilico, formaldehído y acetona.

***Se consideró como pesados únicamente al etanol.

En general se observa que las diferencias son pequeñas, por lo que se considera que los valores obtenidos son bastante buenos. Es importante notar algunos casos en los que las diferencias llegan a ser importantes. Estos casos los representan las corrientes P47, P49 y P53.

Para la corriente P47 es importante la diferencia en la composición de ligeros que se está manejando; esto puede deberse a la definición que se haya tomado para ligeros. Para esta simulación se clasificaron dentro de inertes al CO, CO₂, H₂, N₂ y CH₄, mientras que se clasificaron como ligeros al éter dimetilico, acetona y formaldehído (que se forman en el reactor de síntesis de metanol y tienen un temperatura de ebullición normal menor a la del metanol). Sin embargo, si se utilizan los datos del diagrama para realizar los cálculos para el balance de materia para ligeros alrededor de la torre de destilación DA301, incluyendo los cambiadores EA302 y EA303, se observa discrepancia en los cálculos; mientras que a la torre alimentan 13.02 kg/h de ligeros (corriente P42), salen únicamente 0.35 kg/h (corrientes P44 y P47), lo que indica algún error en las composiciones del diagrama de flujo, en tanto que, los resultados obtenidos en la simulación no presentan estas irregularidades.

Con los datos del diagrama de flujo, en la corriente de recirculación a la torre DA301 (P49), no existen inertes, lo cual podría suponerse como una aproximación; asimismo los ligeros representan el 10% de la corriente, siendo esto un flujo de 500 kg/h de ligeros, mientras que de la torre salen por el domo (P43) únicamente 13 kg/h. Por lo que se continúa con el mismo problema que el planteado anteriormente.

Simulación del Proceso

Con la corriente P53 existe un problema similar al anterior; dado que prácticamente todo el metanol y pesados salen por el domo de la torre, la relación de composiciones a la entrada debe ser similar a la relación de composiciones a la salida. En los datos del diagrama se observa que a la entrada se tiene una relación de metanol a pesados cercana 7, mientras que en la corriente P53 es mayor que 790, lo que explica las diferencias obtenidas con la simulación.

Los resultados de la comparación entre las cargas térmicas calculadas con el simulador y las que se presentan en el diagrama de flujo de proceso se presentan en la siguiente tabla:

Cargas térmicas.

Bloque	Diagrama kcal/h	Simulación kcal/h	% Error
BA101	4.76E+07	4.64E+07	2.44
BB101	7.89E+06	8.14E+06	3.17
DC201	1.01E+07	1.09E+07	7.92
E101	3.53E+06	2.90E+06	17.85
E102I	7.30E+06	6.84E+06	6.30
E102II	7.30E+06	6.69E+06	8.36
E103	3.60E+06	3.25E+06	9.72
E104	4.20E+06	3.97E+06	5.48
E105I	4.68E+06	4.49E+06	4.06
E105II	6.51E+06	6.07E+06	6.76
EA101	1.51E+07	1.53E+07	1.26
EA102	3.45E+06	3.52E+06	2.03
EA103I	5.72E+06	7.44E+06	30.07
EA103II	1.70E+06	1.35E+06	20.59
EA104	1.70E+06	1.78E+06	4.71
EA105	8.10E+05	7.30E+05	9.88
EA201	2.79E+06	2.59E+06	7.17
EA202	1.76E+07	1.54E+07	12.17
EA203	2.37E+06	2.96E+06	24.89
EA301	2.30E+06	3.42E+06	48.70
EA302	1.29E+06	2.30E+06	78.29
EA303	2.40E+04	1.10E+04	54.17
EA304	2.50E+04	7.00E+03	72.00
EA305	1.13E+07	1.13E+07	0.18
EA306	1.13E+07	1.18E+07	4.61
EA307	8.20E+05	7.60E+05	7.32
EA308	2.00E+05	3.20E+05	60.00

Simulación del Proceso

Bloque	Diagrama kcal/h	Simulación kcal/h	% Error
EA309	7.00E+05	6.70E+05	4.29
EE101	8.38E+06	8.66E+06	3.34
EE201	7.92E+06	8.48E+06	7.07

Se observa que los errores más grandes están en cambiadores de calor (rehervidor y condensador de la torre DA301). Nuevamente éstos se presentan donde los valores son más pequeños, en este caso las cargas térmicas de los cambiadores en los que se presentan errores grandes son relativamente pequeñas.

En la siguiente tabla se comparan las temperaturas calculadas en la simulación con las que se encuentran en el diagrama de flujo.

Corriente	Temperatura del diagrama de flujo (°C)	Temperatura calculada (°C)	Diferencia
A3	250	228	22
A4	375	369	6
C11	919	917	2
P10	500	509	9
P25	60	58	2
P33	85	99	14
P43	80	81	1
P50	92	90	2
P51A	64	65	1
P52	106	104	2
P53	84	83	1
P58	123	123	0
P6	400	396	4
V11	190	190	0
V12	234	225	9
V25	420	391	29
V26	510	540	30
V5	85	82	3
V9	105	106	1

Simulación del Proceso

Las diferencias en las temperaturas son pequeñas, lo cual era de esperarse al ser pequeños los errores en las cargas térmicas, por lo que se puede suponer que muchos de los errores encontrados son por redondeos realizados en el diagrama de flujo y por aproximaciones (antes y después de una bomba en el diagrama de flujo se considera la misma temperatura mientras que con la simulación se calcula el aumento en la temperatura). Se puede observar que las diferencias más importantes se encuentran en las corrientes V25 y V26, que son las que representan las corrientes de sobrecalentamiento de vapor. La diferencia entre la temperatura del diagrama y la calculada para la corriente V26 se puede deber a que en este caso no se consideraron pérdidas por radiación, pues el vapor se está sobrecalentando, utilizando como medio de calentamiento gases de combustión a una temperatura entre 762 y 917°C. Contrasta entonces el que para la corriente V25 se obtenga de la simulación una temperatura menor que la del diagrama; siendo que además la carga térmica obtenida de la simulación coincide razonablemente con la del diagrama, lo que indica que algún dato del diagrama es incorrecto o bien que los métodos de cálculo de propiedades son inadecuados. Si los métodos de cálculo de propiedades fueran inadecuados, existirían diferencias importantes al comparar los resultados con los datos del diagrama de flujo; sin embargo, esto no ocurre, por lo que puede considerarse que los métodos de cálculo de propiedades son adecuados.

ANÁLISIS TERMODINÁMICO DE PROCESOS

La termodinámica proporciona los conceptos básicos para el ahorro y uso eficiente de la energía.

El balance de energía para un sistema en estado estacionario definido por fronteras reales que lo separan del exterior, que intercambia materia con el exterior a través de las corrientes de proceso que cruzan la frontera y que intercambia energía en forma de calor o trabajo, está dado por la siguiente expresión:

$$W + Q = \sum H_s M_s - \sum H_e M_e \quad (11)$$

El calor y el trabajo no son energía de la misma calidad, ya que el calor solo puede ser parcialmente convertido a trabajo de acuerdo con la eficiencia de Carnot. Para comparar la eficiencia con que dos procesos diferentes utilizan la energía, se define el trabajo mecánico equivalente que se proporciona a un proceso, con la siguiente relación

$$W_e = W + Q(1 - T_o/T_e) \quad (12)$$

El trabajo mecánico equivalente mínimo que se proporciona a un sistema para llevar a cabo un proceso dado, se rige por la siguiente ecuación:

$$(W_e)_{\min} = \sum (H_e - T_o S_e) M_e - \sum (H_s - T_o S_s) M_s \quad (13)$$

Cuando esta cantidad es positiva, el proceso requiere como mínimo el valor encontrado y, cuando es negativa, indica que el proceso proporcionará trabajo y, el valor encontrado (valor absoluto) será el máximo disponible. Para el cálculo de esta cantidad, sólo se requiere la información de las corrientes que entran y salen del proceso y no de la estructura que tenga el sistema en su interior.

Un proceso real consumirá una cantidad mayor de energía que la proporcionada por la ecuación 13. A este excedente se le llama trabajo perdido y se asocia a la generación total de entropía por la siguiente relación:

$$W_p = T_o \Delta S_{\text{gen}} \quad (14)$$

La generación total de entropía se calcula por la siguiente relación.

$$\Delta S_{gen} = \sum S_s M_s - \sum S_e M_e - Q/T_{ext} \quad (15)$$

La generación de entropía se debe a las irreversibilidades termodinámicas que se presentan. La termodinámica no indica qué modificaciones deben hacerse, sólo proporciona las magnitudes del trabajo perdido. Para poder sugerir modificaciones conviene identificar el origen de las irreversibilidades termodinámicas. Las irreversibilidades termodinámicas más frecuentes son el mezclado de corrientes que tengan alguna propiedad diferente, la expansión súbita de una corriente sin recuperación de trabajo, la transferencia de calor a través de un gradiente de temperatura, la transformación de trabajo en calor por fricción, la transformación de energía eléctrica en calor y las reacciones químicas alejadas del equilibrio termodinámico.

El análisis termodinámico de procesos es la aplicación de las bases termodinámicas para determinar la eficiencia con que se utiliza la energía en un proceso y las oportunidades de ahorro de energía en el mismo.

Para realizar el análisis termodinámico de procesos se deben establecer:

1. Las condiciones de operación del proceso que se desan estudiar
2. Efectuar todas las mediciones para determinar las condiciones del mayor número de corrientes de proceso y servicios
3. Dividir el proceso en secciones de modo que se conozcan las condiciones de las corrientes de entrada y salida que intervienen
4. Efectuar los balances de energía en cada sección, para lo que se necesita el cálculo del cambio de entalpía entre las corrientes de salida y entrada
5. Calcular el cambio de entropía entre las corrientes de salida y entrada para obtener el trabajo mínimo equivalente.
6. Finalmente se calcula la generación de entropía para después determinar el trabajo perdido. Se enlistan las causas de irreversibilidades en cada sección y se proponen modificaciones para reducir las.

Metodología utilizada

Con los resultados de la simulación de la planta, se cuenta con información suficiente para realizar el cálculo del trabajo perdido, ya que en éstos se tienen valores de entalpías,

Análisis Termodinámico de Procesos

entropías y flujos de las corrientes así como cargas térmicas de los equipos de intercambio de calor.

El cálculo del trabajo perdido se realizó en todos los equipos, con excepción de los divisores, ya que en estos, al no considerar caída de presión, no hay generación de entropía. Todos los equipos se consideraron adiabáticos con excepción de los cambiadores de calor en los que se utilizan servicios de vapor o de agua de enfriamiento y, se consideró además el calor perdido por radiación en el reformador calculado como el calor generado por la combustión menos el calor requerido por el reformador.

Una vez definidos los sistemas en los que se tiene intercambio de calor con el exterior, para calcular la generación de entropía es necesario definir la temperatura exterior. Para el reformador y para la torre de desulfuración (modelada como cambiador de calor) se utilizó como temperatura externa la temperatura del medio ambiente; para los cambiadores de calor que utilizan agua de enfriamiento, se utilizó la media logarítmica de las temperaturas presentadas en el diagrama de flujo de proceso (no se consideran las mismas temperaturas de entrada y salida en todos los cambiadores) y, finalmente para los cambiadores de calor que utilizan vapor como medio de calentamiento se utilizó la temperatura del vapor (temperatura de saturación) como temperatura externa.

Con las consideraciones anteriores, se calculó la generación de entropía utilizando la ecuación 15 y una vez obtenida la generación de entropía, se calculó el trabajo perdido mediante la ecuación 14.

Se puede notar que los equipos que contribuyen de manera más importante al trabajo perdido son el reformador (BA101) y el quemador secundario (BB101). Le siguen en importancia, recuperadores de calor para la generación de vapor. Lo anterior sugiere que si se desean enfocar esfuerzos para la realización del análisis termodinámico y proponer modificaciones para disminuir el trabajo perdido, es necesario centrar el trabajo principalmente en la sección de reformación.

A continuación se presentan los resultados del cálculo del trabajo perdido en los distintos equipos.

Análisis Termodinámico de Procesos

BLOQUE	ENTRADAS	SALIDAS	CALOR INTERCAMBIADO FUERA DEL SISTEMA		S ENTRADA	S SALIDA	T EXT	S GEN	To SGEN
			cal/s	kcal/h	kcal/h K	kcal/h K	K	kcal/h K	kcal/h
BA101	P10 C5	P11 C6	-1.00E+06	-3.61E+06	1.03E+04	7.52E+04	298.15	7.70E+04	2.30E+07
BB101	V17 C9	V21 C10	0.00E+00	0.00E+00	-7.16E+04	-1.35E+04	298.15	5.81E+04	1.73E+07
DA301	P42 P49 P50A	P43 P50	0.00E+00	0.00E+00	-2.58E+05	-2.57E+05	298.15	6.59E+02	1.96E+05
DA302	P50 P51B P52A	P51 P52	0.00E+00	0.00E+00	-1.87E+05	-1.84E+05	298.15	3.00E+03	8.94E+05
DA303	P52 P57 P58A	P58 P53	0.00E+00	0.00E+00	-4.84E+04	-4.82E+04	298.15	1.80E+02	5.37E+04
DC101	P6	P7	-1.70E+04	-6.12E+04	-1.23E+04	-1.24E+04	298.15	1.13E+02	3.38E+04
DC201	P29	P30	-3.02E+06	-1.09E+07	-4.30E+04	-6.07E+04	515.55	3.36E+03	1.00E+06
E101	C6 P9	P10 C7	0.00E+00	0.00E+00	1.95E+04	2.16E+04	298.15	2.02E+03	6.03E+05
E102I	C11 V25	V26 C12	0.00E+00	0.00E+00	2.51E+03	5.65E+03	298.15	3.14E+03	9.36E+05
E102II	C12 V24	V25 C13	0.00E+00	0.00E+00	-1.55E+04	-1.07E+04	298.15	4.85E+03	1.45E+06
E103	C14 V18	C15 V19	0.00E+00	0.00E+00	2.14E+04	2.32E+04	298.15	1.78E+03	5.32E+05
E104	C15 V11	V12 C16	0.00E+00	0.00E+00	-1.20E+05	-1.18E+05	298.15	2.06E+03	6.13E+05
E105I	C13 A3	C14 A4	0.00E+00	0.00E+00	6.72E+04	6.97E+04	298.15	2.44E+03	7.28E+05
E105II	C16 A2P	C17A A3	0.00E+00	0.00E+00	4.44E+04	4.56E+04	298.15	1.22E+03	3.64E+05
E105III	C17A A2	C17 A2P	0.00E+00	0.00E+00	2.86E+04	3.25E+04	298.15	3.84E+03	1.14E+06
EA101	P11 V16	P12 V20	0.00E+00	0.00E+00	-4.89E+04	-3.63E+04	298.15	1.25E+04	3.73E+06
EA102	P12 P5	P6 P13	0.00E+00	0.00E+00	-8.03E+03	-5.76E+03	298.15	2.28E+03	6.79E+05
EA103I	P13 V10	P14 V11	0.00E+00	0.00E+00	-1.64E+05	-1.54E+05	298.15	1.03E+04	3.06E+06
EA103II	P14 V9	P15A V10	0.00E+00	0.00E+00	-1.83E+05	-1.83E+05	298.15	3.06E+02	9.12E+04
EA104	P15 V4	P16A V5	0.00E+00	0.00E+00	-8.72E+04	-8.62E+04	298.15	1.01E+03	3.02E+05
EA105	P18	P19	-2.02E+05	-7.27E+05	4.45E+01	-2.16E+03	298.15	2.38E+02	7.10E+04
EA201	P21	P22	-7.18E+05	-2.59E+06	1.06E+03	-6.02E+03	298.15	1.60E+03	4.76E+05
EA202	P30 P26	P29 P33	0.00E+00	0.00E+00	-1.41E+05	-1.39E+05	298.15	1.89E+03	5.64E+05
EA203	P34	P35	-8.21E+05	-2.96E+06	-1.20E+05	-1.28E+05	298.15	1.44E+03	4.29E+05
EA301			9.50E+05	3.42E+06	-2.12E+05	-2.03E+05	433.15	1.53E+03	4.56E+05

Análisis Termodinámico de Procesos

BLOQUE	ENTRADAS	SALIDAS	CALOR INTERCAMBIADO FUERA DEL SISTEMA		S ENTRADA	S SALIDA	T EXT	S GEN	To SGEN
			cal/s	kcal/h	kcal/h K	kcal/h K	K	kcal/h K	kcal/h
EA302	P45 P47A	P46 P49	-6.40E+05	-2.30E+06	-7.33E+03	-1.39E+04	308.98	8.92E+02	2.66E+05
EA303	P46	P47 P47A	-3.01E+03	-1.08E+04	-6.18E+01	-9.56E+01	308.98	1.20E+00	3.57E+02
EA304	P62	C8	2.01E+03	7.23E+03	-3.42E+02	-3.00E+02	433.15	2.54E+01	7.56E+03
EA305			3.15E+06	1.13E+07	-1.41E+05	-1.11E+05	433.15	3.73E+03	1.11E+06
EA306			-3.28E+06	-1.18E+07	-3.74E+04	-7.23E+04	301.60	4.22E+03	1.26E+06
EA307			2.12E+05	7.62E+05	-4.71E+04	-3.86E+04	433.15	6.78E+03	2.02E+06
EA308	P58	P59	-8.95E+04	-3.22E+05	-5.23E+03	-6.09E+03	309.63	1.85E+02	5.50E+04
EA309	P55	P57	-1.88E+05	-6.76E+05	-2.40E+03	-4.30E+03	309.63	2.84E+02	8.47E+04
EE101	P16	P17	-2.41E+06	-8.66E+06	-1.37E+03	-2.44E+04	298.15	5.98E+03	1.78E+06
EE201	P33	P34	-2.36E+06	-8.48E+06	-9.57E+04	-1.20E+05	298.15	4.48E+03	1.34E+06
FA102	P19	P20 W4	0.00E+00	0.00E+00	-2.16E+03	-2.16E+03	298.15	1.32E-02	3.94E+00
FB101	V22 V14	V100 L100	0.00E+00	0.00E+00	-1.91E+05	-1.90E+05	298.15	1.84E+02	5.48E+04
FB301	P38	P41 P42	0.00E+00	0.00E+00	-4.16E+04	-4.15E+04	298.15	1.29E+02	3.83E+04
GA101	V6	V7	0.00E+00	0.00E+00	-1.78E+05	-1.78E+05	298.15	1.72E+02	5.13E+04
GB102	A1	A2	0.00E+00	0.00E+00	6.68E+03	6.86E+03	298.15	1.84E+02	5.47E+04
GC201I	P20	P21	0.00E+00	0.00E+00	-1.12E+03	1.06E+03	298.15	2.18E+03	6.49E+05
GC201IIA	P23	P24	0.00E+00	0.00E+00	-5.74E+03	-4.34E+03	298.15	1.39E+03	4.16E+05
GC201IIB	P25	P26	0.00E+00	0.00E+00	-8.00E+04	-7.99E+04	298.15	4.61E+01	1.37E+04
MEZC1	P1 P4	P5	0.00E+00	0.00E+00	-2.15E+04	-1.99E+04	298.15	1.58E+03	4.71E+05
MEZC2	P7 P8	P9	0.00E+00	0.00E+00	-3.08E+04	-2.69E+04	298.15	3.87E+03	1.15E+06
MEZC3	A5 C3 C4	C5	0.00E+00	0.00E+00	1.73E+04	3.31E+04	298.15	1.58E+04	4.70E+06
MEZC31	P24 P37	P25	0.00E+00	0.00E+00	-8.25E+04	-8.00E+04	298.15	2.56E+03	7.63E+05
MEZC4	C2 A6 C8	C9	0.00E+00	0.00E+00	4.49E+03	5.99E+03	298.15	1.50E+03	4.47E+05
MEZC41	P41 P44	P60	0.00E+00	0.00E+00	-2.15E+02	-2.01E+02	298.15	1.39E+01	4.15E+03
MEZC42	P60 P47	P61	0.00E+00	0.00E+00	-2.53E+02	-2.28E+02	298.15	2.50E+01	7.45E+03

Análisis Termodinámico de Procesos

BLOQUE	ENTRADAS	SALIDAS	CALOR INTERCAMBIADO FUERA DEL SISTEMA		S ENTRADA	S SALIDA	T EXT	S GEN	To SGEN
			cal/s	kcal/h	kcal/h K	kcal/h K	K	kcal/h K	kcal/h
MEZC43	P61 P54	P62	0.00E+00	0.00E+00	-3.47E+02	-3.42E+02	298.15	5.06E+00	1.51E+03
MEZC5	C10 C7	C11	0.00E+00	0.00E+00	5.65E+04	5.65E+04	298.15	1.99E+01	5.93E+03
MEZC7	V21 V20 V19	V22	0.00E+00	0.00E+00	-8.42E+04	-8.41E+04	298.15	1.23E-01	3.66E+01
TOTAL								7.55E+07	

Análisis Termodinámico de Procesos

BLOQUE	TRABAJO PERDIDO	% DEL TOTAL
BA101	2.30E+07	30.482
BB101	1.73E+07	22.928
DA301	1.96E+05	0.260
DA302	8.94E+05	1.185
DA303	5.37E+04	0.071
DC101	3.38E+04	0.045
DC201	1.00E+06	1.325
E101	6.03E+05	0.799
E102I	9.36E+05	1.240
E102II	1.45E+06	1.922
E103	5.32E+05	0.705
E104	6.13E+05	0.812
E105I	7.28E+05	0.965
E105II	3.64E+05	0.482
E105III	1.14E+06	1.511
EA101	3.73E+06	4.943
EA102	6.79E+05	0.900
EA103I	3.06E+06	4.055
EA103II	9.12E+04	0.121
EA104	3.02E+05	0.400
EA105	7.10E+04	0.094
EA201	4.76E+05	0.631
EA202	5.64E+05	0.747
EA203	4.29E+05	0.569
EA301	4.56E+05	0.604
EA302	2.66E+05	0.353

BLOQUE	TRABAJO PERDIDO	% DEL TOTAL
EA303	3.57E+02	0.000
EA304	7.56E+03	0.010
EA305	1.11E+06	1.471
EA306	1.26E+06	1.670
EA307	2.02E+06	2.677
EA308	5.50E+04	0.073
EA309	8.47E+04	0.112
EE101	1.78E+06	2.359
EE201	1.34E+06	1.776
FA201	2.02E+03	0.003
FB101	5.48E+04	0.073
FB301	3.83E+04	0.051
GA101	5.13E+04	0.068
GB102	5.47E+04	0.072
GC201I	6.49E+05	0.860
GC201IIA	4.16E+05	0.551
GC201IIB	1.37E+04	0.018
MEZC1	4.71E+05	0.624
MEZC2	1.15E+06	1.524
MEZC3	4.70E+06	6.229
MEZC3I	7.63E+05	1.011
MEZC4	4.47E+05	0.592
MEZC4I	4.15E+03	0.005
MEZC42	7.45E+03	0.010
MEZC43	1.51E+03	0.002
MEZC5	5.93E+03	0.008
MEZC7	3.66E+01	0.000

TOTAL 7.55E+07 100.000

Propuestas para la modificación del proceso

Como ya se mencionó anteriormente, el análisis termodinámico de procesos es la aplicación de las bases termodinámicas para determinar la eficiencia con que se utiliza la energía en un proceso y las oportunidades de ahorro de energía en el mismo.

Como resultado del cálculo del trabajo perdido en los distintos equipos de la planta Metanol II del Complejo Petroquímico Independencia, pueden encontrarse algunas modificaciones al proceso para aumentar su eficiencia, sin embargo, éstas requieren de un estudio más profundo:

I. Aumento de la presión para la generación de vapor.

Del cálculo del trabajo perdido, se observa que en los equipos en los que se genera vapor representan una fracción importante del trabajo perdido total. El tipo de irreversibilidad que se tiene en estos casos es la transferencia de calor a través de un gradiente de temperatura, por lo que si se disminuye el gradiente de temperatura, disminuirá el trabajo perdido.

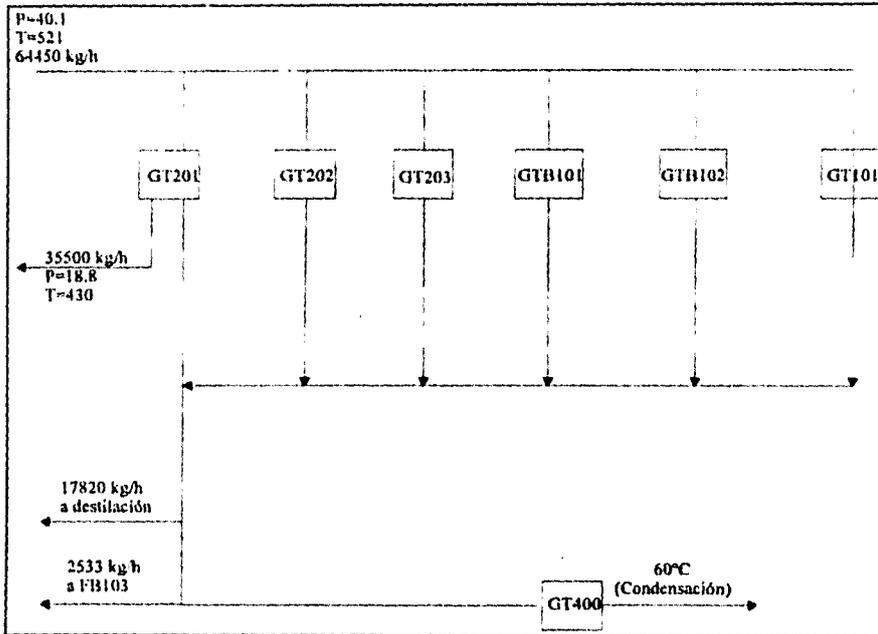
Para disminuir el gradiente de temperatura, se podría pensar en elevar la presión a la que se genera el vapor, esto elevaría la temperatura del fluido frío para estos equipos, disminuyendo así el gradiente de temperatura. Sin embargo, es importante analizar las limitaciones inherentes al proceso.

En el reactor de síntesis de metanol, la temperatura se controla teniendo por fuera de los tubos agua en ebullición, de dónde se obtiene parte del vapor que se utiliza en la turbina. Debido a esto, no se puede aumentar la presión de generación de vapor en este equipo porque implicaría no poder controlar adecuadamente la temperatura en el reactor de síntesis de metanol.

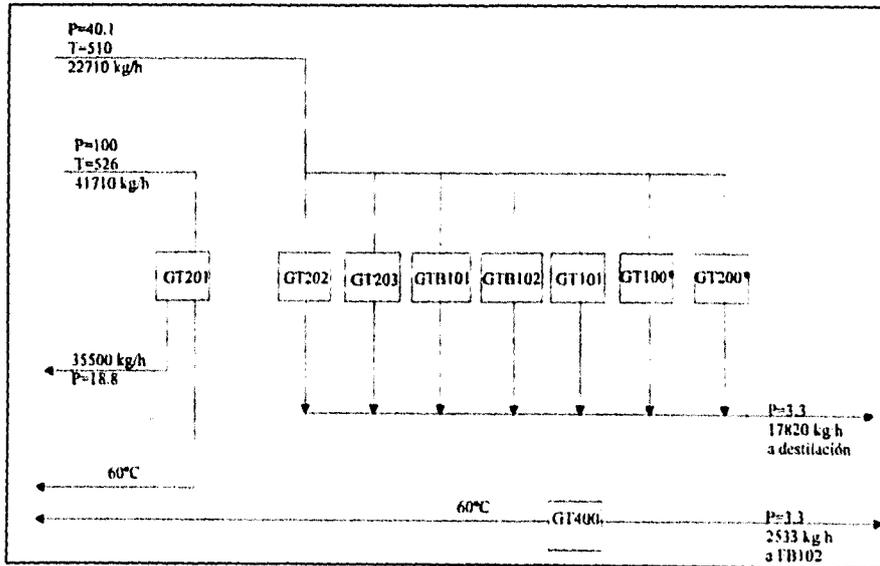
Esto no implica que todo el vapor se deba generar a la misma presión. En la sección de reformación, se puede generar vapor a una mayor presión que en la sección de síntesis de metanol, teniendo entonces dos sistemas de vapor separados. En las siguientes figuras se muestra como se encuentra el circuito de vapor en la planta de metanol, y un posible arreglo en el caso en el que se generara vapor a dos presiones diferentes.

Es importante señalar que con los resultados de la simulación, la cantidad de vapor generada es menor que la indicada en el diagrama de flujo; además de que se consideró que en ambos sistemas la cantidad de vapor generado es igual. Si bien al aumentar la presión de generación de vapor, disminuye el calor latente de vaporización y con una misma carga térmica se puede producir más vapor. Sin embargo, en el diagrama de flujo, se observa que se tiene una purga de agua del domo de vapor, por lo que al aumentar la presión de este equipo, también aumenta la temperatura del agua de purga, lo que provoca una disminución en la generación de vapor, pues se está utilizando parte del calor para calentar el agua de la purga; por lo que se optó por definir la producción de vapor, disminuyendo ligeramente la purga de agua.

Análisis Termodinámico de Procesos



Esquema actual



Esquema propuesto

Análisis Termodinámico de Procesos

En el esquema propuesto, se utiliza el vapor generado en la sección de síntesis de metanol como vapor motriz para la bomba que eleva la presión del agua para la generación de vapor, así como para los sopladores, tanto de los gases de combustión como el del aire para la misma. El resto se utiliza para producir energía eléctrica, teniendo una extracción a baja presión para utilizarlo en la sección de destilación, y otra a condensación total.

El vapor que se genera en la sección de reformación, se utiliza en la turbina que acciona al compresor de gas de síntesis, teniendo una extracción a media presión para obtener el vapor que se utilizará en el proceso y lo demás se envía a condensación total.

En este esquema se necesita adicionalmente otra bomba para comprimir el agua hasta 100 kg/cm² por lo que es necesario considerarla al comparar los dos esquemas.

En el circuito propuesto, se consideraron los mismos requerimientos de vapor que se establecen en el diagrama de flujo para los equipos que se muestran a continuación:

Equipo	Consumo de vapor kg/h
GT101	2887
GTB101	2368
GTB102	2533
GT202	640
GT203	370

En el sistema propuesto se encuentran los equipos GT100 y GT200 no existen en la planta, el primero corresponde a la turbina para accionar la bomba que elevará la presión del agua hasta 100 kg/cm², mientras que de la segunda se obtiene trabajo únicamente. Para el equipo GT100 se destinan 291 kg/h de vapor, mientras que para el GT200 se destinan 13621 kg/h.

Dado que los únicos equipos que se modifican son GT201 y GT400, la comparación se realizó exclusivamente tomando en cuenta estos equipos, así como los equipos que se agregaron: GT100 y GT200.

Con el circuito actual, las turbinas GT201 y GT400 producen 6861 HP, mientras que con el sistema propuesto, las turbinas GT200, GT201 y GT400 producen 9410 HP, además de que se obtienen 50 HP de la turbina GT100 para elevar la presión del agua.

De lo anterior se observa que se puede aprovechar mejor la energía disponible en el proceso, que en este caso, los excedentes se pueden utilizar para generar energía eléctrica, o bien, es posible disminuir la cantidad de vapor generado, teniendo entonces un ahorro en combustible. Sin embargo, la extracción de vapor para proceso es a una menor temperatura por lo que sería necesario analizar el efecto que esto pudiera tener sobre el proceso.

2. Precalear el gas natural que se utiliza como combustible

Cuando se mezclan corrientes con distinta composición y temperatura, el trabajo perdido puede ser considerable. Esto se agrava si el mezclado de corrientes va acompañado de una caída de presión.

Se puede observar que uno de los bloques en los que es importante el porcentaje de trabajo perdido es en MEZC3, donde se mezclan las corrientes de gas natural (C3 a 21°C y 37 kg/cm²), con parte de la recirculación de la sección de síntesis de metanol (C4 a 40°C y 49.3 kg/cm²) y con la corriente de aire (A5 a 369°C y 0.7 kg/cm²). Se puede observar que existen diferencias importantes tanto en presión como en temperatura.

Si se considera que la disminución de presión es inevitable, pues el gas natural tiene la presión del gasoducto y que la presión en la recirculación es la de la sección de gas de síntesis y que no procede un aumento en la presión del aire, únicamente se puede intentar disminuir la diferencia en temperaturas.

Una posible solución a este problema sería juntar tanto el gas natural para proceso como el gas natural para combustión y la recirculación de la sección de síntesis de metanol para calentarlos en el intercambiador EA102, la temperatura alcanzada sería menor a 395°C por el aumento en el flujo del gas. Si en este punto se divide la corriente y una parte se destina a proceso y la otra se utiliza como combustible, al mezclar el gas combustible con el aire caliente, prácticamente se tendría la misma temperatura; la disminución en el calentamiento del gas de proceso se vería compensada con una mayor producción de calor en el reformador.

Es más, si la división entre la corriente de gas de proceso y la de combustible se realiza después de que el gas pasa por la desulfuradora, se estaría eliminando también el azufre del gas natural que se envía para combustión (cosa que no está contemplada en el proceso). Lo anterior tiene como ventaja el disminuir las emisiones de azufre a la atmósfera e incluso, al disminuir o prácticamente eliminar el contenido de azufre en los gases de combustión, disminuye el peligro de corrosión en la chimenea por condensación de ácidos.

Análisis Termodinámico de Procesos

Sin embargo, existe la limitante de que el equipo de desulfurización tenga la capacidad de manejar un mayor volumen de gases, así como de adsorber una mayor cantidad de compuestos de azufre.

3. Eliminar el subenfriamiento en la torre de destilación DA302

El tener subenfriamiento en el reflujo de una torre de destilación disminuye la eficiencia de ésta. Al eliminar el subenfriamiento del reflujo, la cantidad de calor que se requiere en el rehervidor disminuye y disminuye el trabajo perdido.

El eliminar el subenfriamiento se vería reflejado en una disminución del vapor requerido en el rehervidor; dado que el calor que es necesario para el subenfriamiento es 1290 kcal/h, el ahorro en vapor sería de 2340 kg/h.

Una de las razones por las que puede existir el subenfriamiento en el reflujo de una torre de destilación es que, tanto para el reflujo como para el destilado se utiliza la misma bomba y, al subenfriar la corriente aumenta el NPSH disponible, por lo que sería necesario verificar la importancia que pueda tener el eliminar el subenfriamiento de la corriente.

CONTROL EN TORRES DE DESTILACIÓN

El objetivo principal de la destilación es el separar una cierta alimentación en productos de mayor valor. El valor de los productos depende completamente de su calidad, equivalente a su pureza. Esto hace que el control de la calidad sea tan importante en la operación de la columna. Además de alcanzar las especificaciones de calidad, también debe ser rentable la operación y deben alcanzarse los objetivos de producción establecidos. Los objetivos de calidad, rentabilidad y producción están muy interrelacionados.

La calidad de un producto de una columna de destilación, tiende a ser variable ya que está sujeto a distintas influencias. Existen perturbaciones ambientales tales como el efecto del clima en los condensadores; también existen cambios en la producción, impuestos por el operador o por un equipo corriente arriba; cambios en la composición de la alimentación pueden venir acompañados de cambios en el flujo de alimentación o pueden deberse a cambios en la fuente utilizada o por variaciones en el reactor que produce esta alimentación. El propósito de un controlador es abatir los efectos de las variaciones no controlables y reestablecer la calidad en el valor deseado.

En cualquier operación unitaria existen distintas variables que se pueden controlar. En ingeniería química para la mayoría de las operaciones unitarias las variables que se controlan son flujos, niveles, presiones y temperaturas. En sistemas de destilación la mayoría de las mediciones se relacionan con el objetivo de especificar la composición de productos. Aunque generalmente las especificaciones de producto se dan en composición, también pueden ser intervalos de puntos de ebullición como en el caso de la fraccionación de crudos. Generalmente las especificaciones se expresan en función de propiedades físicas tales como: índice de refracción, densidad, temperatura y presión de vapor. En las especificaciones se incluyen estas propiedades porque están directamente relacionadas con la composición. Estas mediciones se denominan *mediciones inferenciales*, puesto que una composición se deduce a partir de los valores de las mediciones.

Medición de flujos

Normalmente se miden varios flujos relacionados con las columnas de destilación. Estos incluyen el flujo de alimentación, reflujo y el flujo del medio de calentamiento.

Control en Torres de Destilación

Generalmente los flujos de productos no se miden, pero debido al aumento en el costo de la energía y al mayor costo de materias primas y productos, se justifican con frecuencia los sistemas de control de alto rendimiento. En estos sistemas se necesitan medir: los flujos de productos, todas las corrientes relacionadas con los sistemas de energía y todos los flujos secundarios tales como producto en fase vapor, etc.

En general en sistemas de destilación en que se tienen como productos de domos líquido y vapor, el producto gaseoso es manipulado por el control de presión, sin embargo en los sistemas de control de alto rendimiento se necesita regular el producto total de domos.

Es de suma importancia y se debe tener mucho cuidado en seleccionar los puntos donde se tomarán las mediciones. Muchas de estas corrientes son líquidos a condiciones cercanas a su punto de vaporización o vapores a condiciones cercanas a su punto de condensación.

Medición de niveles

Generalmente con una columna de destilación solo se relacionan dos mediciones de nivel: el nivel del acumulador del reflujo y el nivel en el fondo de la torre.

El líquido, cuyo nivel se está midiendo en el acumulador, es producto de una condensación de un vapor. En muchas operaciones de columnas de destilación, pequeños cambios en la presión de la columna pueden causar ya sea que el líquido en el acumulador se vaporice parcialmente o que aumente súbitamente la rapidez de condensación de vapores. En forma similar, la medición de nivel en el fondo de la columna es la de un líquido en ebullición, también sensible a cambios en la presión.

Medición de presión

Cuando se está utilizando una medición de temperatura para inferir la composición es importante controlar la presión en la columna. El control de presión también es una parte importante para estabilizar el flujo de vapor en la columna. Una variación en la presión

Control en Torres de Destilación

puede modificar los puntos de ebullición del líquido en cada plato así como en el acumulador y en el rehervidor.

Se tienen tres puntos principalmente en los que se colocan los medidores para presión (fig 5):

① Se utiliza cuando se tienen destilaciones al vacío y, aún entonces, muy esporádicamente.

② Es el punto de control que se usa con mayor frecuencia, sin embargo, lo que hay que controlar es la presión en la columna y no en el acumulador. La variación de las condiciones del proceso producen una degradación de la correlación entre las presiones de la columna y del acumulador. Cuando este problema es lo suficientemente importante, se utiliza un circuito de control de cascada.

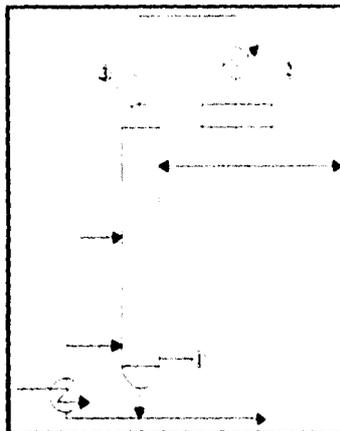


Figura 5

③ Es la localización ideal, ya que está midiendo directamente la presión de la columna, aunque la variable que se manipula sea generalmente la corriente que circunda al condensador o al acumulador. La diferencia de tiempo entre la variable controlada y la manipulada, produce problemas dinámicos que degradan el funcionamiento del control de presión. Se utiliza para control de presión cuando la cantidad de calor suministrada es una variable manipulable.

Medición de temperatura

Salvo cuando se utiliza la temperatura como medición inferencial de la composición, sólo hay una diferencia importante entre la confiabilidad de las mediciones de temperatura en general y en una torre de destilación: el mayor riesgo de flujo a dos fases en destilación. Debe de observarse muy cuidadosamente cuando se va a seleccionar el punto exacto en el que se va a medir la temperatura así como la instalación del sensor.

Control en Torres de Destilación

Para una mezcla binaria, con una composición específica a una presión determinada, existe una temperatura a la cual se encuentran en equilibrio líquido y vapor. Así pues, la temperatura es la medición más común para inferir la composición en columnas de destilación. La medición de la temperatura generalmente se realiza en un punto de la columna en el que existe un cambio marcado en el perfil de composición, por lo tanto, la temperatura varía significativamente. Esto proporciona la sensibilidad entre la variación de temperatura y la variación de composición necesarias para implementar el control. Cuando se utiliza una temperatura como objetivo de control, se considera que esta temperatura mantendrá la composición del producto al nivel deseado. Para lograr lo anterior es necesario que la correlación entre la composición del producto y la temperatura del plato se mantengan constantes bajo cualquier esquema de operación de la columna.

La ventaja principal cuando se utiliza la temperatura como variable a controlar es que su medición se realiza fácil y económicamente. Sin embargo existen ciertas limitaciones. La temperatura es un indicador real de la composición, sólo si la mezcla es binaria y se encuentra a presión constante. Si existen tres o más componentes en la mezcla, la composición de un solo componente no se puede determinar de manera precisa, excepto en condiciones especiales. Si se está destilando una mezcla ternaria compuesta por A, B y C y, si la relación del componente B al C es constante, la concentración del componente A se puede inferir en forma precisa a partir de la temperatura. Tal sistema se denomina pseudo-binario. Aunque la condición anterior no se cumpla, el control de temperatura se utiliza en sistemas de destilación de tres o más componentes.

La presión de equilibrio en el punto en el que se mide la temperatura, se debe mantener constante para inferir con exactitud la composición. La presión varía frecuentemente por dos razones: en el caso en que el perfil de presiones de la columna varíe, la presión en el plato del control variará también y aunque se mantenga constante la presión en la columna, si varía la caída de presión a lo largo de la columna, variará la presión en el punto de medición de la temperatura. Los sistemas de control de presión generalmente eliminan la primera, pero la caída de presión es función del flujo de alimentación y de la relación de líquido/vapor dentro de la columna.

Conforme varía la operación de la columna, también varía la correlación entre la temperatura del plato y la composición del producto. La temperatura del plato de medición para la cual las condiciones de operación produzcan un producto con la composición correcta, producirá un producto fuera de especificaciones a diferentes condiciones de operación.

Control en Torres de Destilación

La sensibilidad de la medición de temperatura se define como el cambio en la temperatura entre el cambio en la composición. Se debe poner atención en la sensibilidad de los aparatos de medición, así como en la del proceso a responder ante cambios de temperatura.

Control de composición del producto

Las herramientas disponibles en el control de la composición del producto en columnas de destilación, son los balances de materia y energía. La composición de una corriente, producto de una torre de destilación, se puede controlar ya sea midiéndola o infiriéndola y regulando directamente ya sea el balance de materia o el de energía. Lo anterior no significa que al controlar la composición mediante uno de los balances el otro no se afecte. Los esquemas de control de composición se clasifican dependiendo de la forma en que el controlador de composición del producto regule los balances de materia y energía de la columna.

Regulación del balance de materia

De manera muy simple, el balance de materia en una columna de destilación se regula manipulando los flujos de materia que entran y salen de la columna. Las corrientes que influyen en el balance de materia son: la alimentación, el producto del destilado y el de fondos. Las corrientes de reflujo no intervienen en el balance global.

De las tres corrientes, la alimentación no se utiliza como corriente para controlar la composición del producto, porque normalmente está establecida por un controlador de proceso corriente arriba, por esta razón el flujo de alimentación se considera una variable perturbadora en el diseño del sistema de control de la columna de destilación. El flujo del destilado y el de los fondos se usan para regular el balance de materia en la columna, o bien todas las corrientes de productos regularán el balance de materia.

Regulación del balance de energía

La mayor influencia en el balance de energía en una columna proviene del rehervidor y del condensador. En estos puntos ocurren la principal entrada y salida de energía requerida para llevar a cabo la separación.

Control en Torres de Destilación

La separación de componentes en una columna de destilación ocurre al establecerse el equilibrio entre las fases líquido y vapor, por lo que, debido a cambios en los flujos de líquido y vapor en la columna, se modificará el equilibrio y se afectará la composición de los platos y de los productos.

La alimentación puede tener influencia en el balance de energía, pero como en el caso del balance de materia, la energía contenida en la corriente de alimentación no se manipula para controlar la composición del producto. Como en el caso del balance de materia, un cambio en el contenido de energía de la alimentación se considera una perturbación en la operación de la columna. El efecto en una columna por el cambio en el contenido de energía de la alimentación, depende de que la alimentación se encuentre abajo de su punto de burbuja, parcialmente vaporizada o arriba de su punto de rocío. Sin importar el estado físico de la corriente de alimentación, los cambios en su contenido de energía modificarán los flujos de líquido y vapor en la columna.

Las dos corrientes de control para el balance de energía, reflujo y el flujo del medio de calentamiento, se diferencian en que el reflujo es una corriente interna del balance de materia, mientras que el medio de calentamiento es una corriente de proceso externa. Aún cuando el reflujo proporciona el líquido necesario en la parte superior de la columna, no regula directamente la energía eliminada en el condensador. En la mayoría de los condensadores que utilizan agua de enfriamiento, el flujo de energía no se regula automáticamente, pero ocurre de manera natural por la condensación total de los vapores. El operador manipula manualmente el flujo de agua para mantener la carga del condensador lo suficientemente grande como para manejar la carga a condensar. Los medios manuales de control son suficientes si el costo del medio de enfriamiento es bajo. Sin embargo, si el medio de enfriamiento es un líquido refrigerante o flujo forzado de aire, la regulación del flujo del medio de enfriamiento es más importante desde el punto de vista económico.

Diseño de sistemas de control para columnas de destilación

Dado que las columnas de destilación son consumidores importantes de energía en las plantas, se han realizado muchos estudios sobre el diseño de procesos, estrategias de operación y sistemas de control.

Control en Torres de Destilación

Los modelos a régimen permanente continúan siendo herramientas poderosas y eficientes para el diseño de sistemas de control para columnas de destilación (4)

Tolliver y McCune (5) analizan como los programas para realizar balances de materia y energía en estado estacionario pueden utilizarse para seleccionar el mejor esquema de control básico, para evaluar la necesidad de modificaciones de diseño o para aplicar un control más avanzado con el fin de alcanzar los objetivos de la destilación

Fruehauf y Mahoney (4) afirman que es apropiado contrastar los modelos dinámicos y a régimen permanente como herramientas en el diseño de controles. Los modelos para régimen permanente y un conocimiento general de la dinámica de las columnas de destilación son considerablemente más eficientes, que el usar modelos dinámicos y adecuarlos para cada situación. Existe una limitación evidente en los modelos a régimen permanente, que no nos dice nada acerca de la respuesta dinámica y, no nos permite comparar la capacidad para el rechazo de las perturbaciones de sistemas de control alternos.

En la mayoría de las columnas se utiliza la temperatura de un plato para determinar la composición. Se utilizan medidores de temperatura en lugar de analizadores porque son más baratos, más confiables, tienen una gran resolución, son continuos y en general son buenos indicadores de la composición. Existen pocos casos en los que se justifican los analizadores en línea.

Para una columna de destilación simple en la que se obtienen dos productos, el consumo de energía se minimiza cuando los dos productos se mantienen a una pureza especificada. Controlar únicamente la composición de un producto y utilizar un exceso de reflujo o de vapor para garantizar que el otro producto siempre se encuentre por encima de la especificación, da por resultado un mayor consumo de energía.

Se llama sistema dual de control de composición, a aquel que mantiene en especificación ambos productos de una destilación. Sin embargo, el control dual de composición puede crear problemas dinámicos de control. La interacción entre los dos circuitos de control de composición puede dificultar la estabilidad del circuito cerrado.

Es importante aclarar que no se necesita el control dual de composición para minimizar el consumo de energía cuando varía el flujo de alimentación, perturbaciones continuas pueden manejarse sencillamente relacionando el reflujo o la cantidad de calor suministrada al flujo de alimentación, mientras se controla la composición de un producto.

Control en Torres de Destilación

Las variaciones en la composición de la alimentación son la principal perturbación que requiere de un sistema dual de control de composición para minimizar el consumo de energía. Por lo tanto, el ahorro de energía de un control dual de composición debe provenir de alcanzar la mínima relación entre el vapor que se suministra a la torre y la alimentación (V/F).

Para cuantificar el incentivo económico de un control dual de composición, se realizan una serie de cálculos en estado estacionario para calcular las relaciones de V/F. Los tres sistemas de control que se estudian son: el de reflujo constante, el de carga térmica constante en el rehervidor y el de composición constante del producto. Con ésta última se encuentran los menores valores para V/F, sin embargo, con los otros dos, se puede calcular si el incentivo para un control dual de composición justifica los problemas dinámicos potenciales y el aumento en el costo de la instrumentación. No se puede generalizar cuál es el mejor sistema de control para la conservación de energía para todas las columnas de destilación, se recomienda calcular las relaciones V/F para cada uno de los casos que se tengan. Otro factor que influye en el consumo de energía es la localización del plato de alimentación. En la mayoría de los casos no es necesario el control dual.

En una columna de destilación típica se cuenta con cinco válvulas de control, éstas son la válvula de la alimentación, la del vapor de calentamiento, la del reflujo, la del destilado y la de los fondos. Una perturbación en la columna se da por una variación en la alimentación, en el destilado o en los fondos. Una de estas corrientes se establece en forma independiente, ésta determinará la producción de la columna (esto requerirá de una válvula). En una columna de destilación existen dos niveles a controlar, el del acumulador y el del fondo de la columna, lo que requerirá de otras dos válvulas. Por lo anterior quedan dos válvulas para controlar la composición.

Independientemente de las válvulas que se utilicen para controlar la composición o la forma en que se utilicen, existen fundamentalmente dos cosas que se pueden manipular: la división de la alimentación y la fraccionación. La división de la alimentación es simplemente la forma en que se divide la alimentación en destilado y en fondos. Un balance de materia global para la columna, indica que el flujo del destilado más el de los fondos, nos da el flujo de alimentación. La fraccionación en una columna depende del número de platos, de la energía suministrada y de la dificultad de la separación.

La división del flujo en una columna, entre los productos del domo y del fondo, es la variable más importante a controlar, ya que debe ser manipulada para obtener altas purzas

Control en Torres de Destilación

en el destilado, como en el fondo. La fraccionación se utiliza únicamente para control fino de la composición y debe ser lo suficientemente alta para obtener la pureza deseada.

La mayoría de las columnas de destilación son multicomponentes. A diferencia de las separaciones binarias, la temperatura no es un indicador de la composición, sin embargo puede utilizarse en el control de columnas multicomponentes. Esta es el área en donde los modelos a régimen permanente pueden ser de gran utilidad para mostrar qué es lo que se puede alcanzar con el control de temperatura y qué es lo que no es posible.

Los modelos para régimen permanente se manipulan fácilmente y proporcionan soluciones robustas. Para realizar un cambio en las condiciones de la solución, solamente se deben realizar pocos cambios en el archivo de entrada (input file). Con este archivo se puede encontrar una nueva solución.

Los modelos para régimen permanente tienen una gran variedad de variables manipulables que pueden ser especificadas, estas incluyen el flujo de vapor (o la carga térmica en el rehvridor), el flujo y composición del destilado, la relación de reflujo, la composición en cualquier plato y la temperatura en cualquier plato, entre otros. Así como el control de composición para columnas binarias, los modelos para estado estacionario tienen dos grados de libertad, una vez definidas la alimentación y la fracción de vaporización en el destilado. Cualesquiera dos variables independientes pueden ser especificadas para definir la solución. Esta flexibilidad es la que permite utilizar los modelos para régimen permanente como herramienta para el diseño de control de columnas de destilación.

El procedimiento para el diseño del control de columnas de destilación(4) es el siguiente:

1. Desarrollar una base de diseño o establecer los objetivos para el control.
2. Seleccionar el esquema de control.
3. Realizar pruebas de circuito abierto utilizando el modelo para encontrar la localización del control de temperatura.
4. Realizar pruebas de circuito cerrado para probar el esquema de control frente a perturbaciones
5. Analizar si se alcanzaron los objetivos

Objetivos.

Los objetivos primarios se deben establecer como la pureza requerida en el destilado y en los fondos. También se deben especificar objetivos secundarios tales como la recuperación o el costo de energía, para poder evaluar la operación de la columna.

Existen también restricciones en la operación que deben ser tomadas en cuenta, así como las perturbaciones potenciales, su magnitud y frecuencia. Hay que recordar que, el que una corriente esté controlada, así como la alimentación a la columna, no asegura que el flujo nunca cambie. En efecto, los cambios en la alimentación debidos a ajustes realizados por el operador, son una de las perturbaciones más frecuentes y severas para la columna.

Selección del sistema de control

No se ha encontrado un esquema de control que sea el mejor para todas las columnas.

En los objetivos planteados, puede resaltarse fuertemente la composición de una corriente de producto sobre la otra. En este caso, puede ser deseable realizar el control en el extremo de la columna con el producto más importante. Esta aproximación minimizará la relación de tiempo muerto efectivo total a tiempo total de retraso en el circuito de control de composición y puede mejorar el control para este producto. Sin embargo, esta mejora puede ser a expensas de la otra corriente de producto. En general es mejor seleccionar el arreglo que proporcione un mejor control general para la columna frente a perturbaciones. Esta aproximación casi siempre mejorará el control para ambas corrientes de producto.

Para el control de composición, la literatura apoya el uso de un arreglo de control del balance de materia como el esquema de control básico para la columna. Esto significa que la relación de destilado a alimentación sea ajustada de alguna forma para controlar la composición. Dado que, en general, la carga térmica del condensador se utiliza para controlar la presión, existen cuatro opciones de esquemas para el control del balance de materia, como se presentan en la Figura 6. Frecuentemente, la selección final será un compromiso entre ventajas y desventajas para cada uno de los esquemas.

Esquema 1. La ventaja principal de este esquema es que tiene la menor interacción con el balance de energía. Esta independencia se alcanza porque este esquema mantiene el reflujo interno constante, aun para variaciones en subenfriamiento del reflujo externo. Su principal desventaja es que responde lentamente a variaciones en la alimentación, si se necesita controlar la composición del fondo de la columna. Este esquema es recomendable si el flujo del destilado es uno de los flujos pequeños de la columna.

Esquema 2 Este arreglo tiene la ventaja de reducir la relación de tiempo muerto efectivo total a tiempo total de retraso en el ciclo de control de composición. Tiene la desventaja de permitir gran interacción entre el balance de materia y el balance de energía porque el reflujo interno no se mantiene constante. Este esquema debe considerarse cuando el reflujo es más pequeño que otros flujos en la columna y cuando la relación de reflujo sea igual o menor a 0.8

Esquema 3 Su ventaja es que ofrece el mínimo tiempo muerto efectivo total a tiempo total de retraso en el circuito de control de composición. Su desventaja es tener la interacción más grande entre el balance de materia y el de energía debido al rehervidor. Este esquema no se recomienda en columnas donde la relación entre el vapor a la salida del rehervidor y el flujo de alimentación es mayor o igual a 2.

Esquema 4. Tiene la ventaja de tener poca interacción entre el balance de materia y el de energía. Este arreglo se recomienda únicamente cuando el flujo de fondos es significativamente menor que los otros flujos en la columna y es menos del 20% que el vapor que sale del rehervidor.

Existen modificaciones comúnmente empleadas, que incluyen el uso de control en cascada, con el control del flujo en las corrientes de la columna como circuito interno, una medición alterna, como medir la caída de presión para inferir la carga del rehervidor en casos donde no se utiliza vapor de calentamiento. Estas modificaciones, aunque pueden ser absolutamente necesarias, son esencialmente implementaciones que no afectan el diseño global de la columna ni el análisis de controlabilidad.

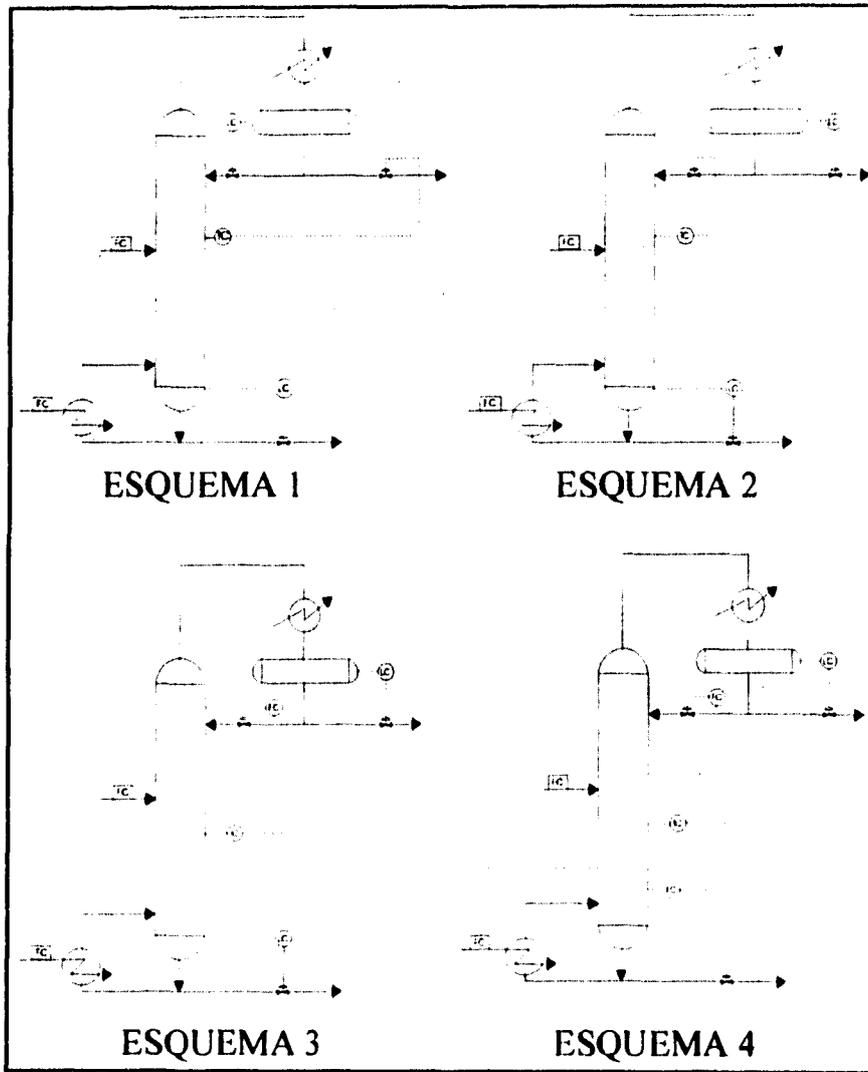


Figura 6

Localización del plato de control

En el tercer paso en el procedimiento de diseño, interviene lo que se denominan pruebas a "circuito abierto". El objetivo de estas pruebas, es realizar simulaciones en estado estacionario, para identificar la localización del plato donde se localizará el sensor de temperatura para inferir la composición. Esto se lleva a cabo variando la variable manipulada por la temperatura por encima y por debajo del caso base.

El caso base de diseño y dos casos paramétricos, permiten una evaluación de la sensibilidad de la columna al balance de materia, determinado por la relación entre el destilado y la alimentación. Se ha encontrado que las respuestas en los perfiles de temperatura son similares para la mayor parte de las perturbaciones, por lo tanto, estos tres casos pueden caracterizar adecuadamente la columna. La localización del plato óptimo de control es donde existan las mayores desviaciones simétricas.

La localización se considera óptima en el siguiente sentido. La mayor desviación en la temperatura asegura la mayor sensibilidad a cambios en la composición. Las distancias iguales a cada lado del caso base darán una respuesta simétrica, más lineal tanto en magnitud como en tiempo de respuesta.

Evaluación de la controlabilidad de la columna

Una vez localizado el plato de control, la consideración más importante es que la sensibilidad a la temperatura en el plato de control, sea adecuada tanto para tener buenas mediciones como buen control.

En esta etapa se realizan las denominadas pruebas a "circuito cerrado". Aquí se utilizan modelos a régimen permanente para simular la estrategia de control y evaluarla para cambios en la composición y flujos de alimentación. Se simula la estrategia de control, estableciendo las especificaciones para la solución del modelo, que se obtendrían en el caso de que la columna esté controlada. Por ejemplo, si se considera una estrategia de control donde el reflujo es constante y la temperatura controla el flujo del medio de calentamiento, se establecerán el reflujo y la temperatura en el plato de control para la solución del modelo en estado estacionario.

Cuando las mediciones de temperatura no son adecuadas para el control, se requiere análisis de los productos, ya sea con analizadores en línea o en un laboratorio, para retroalimentar el control.

Control en Torres de Destilación

Idealmente, el control de la destilación debe ser estudiado y diseñado utilizando simulación dinámica, sin embargo, no se cuenta con programas de simulación dinámica que sean tan confiables, efectivos en costo y fácil de usarse como los programas para simulación en estado estacionario. Si una columna presenta problemas con este análisis se debe llevar a cabo un análisis más profundo por un especialista antes de considerar rediseñarla.

Columna de purificación de metanol

Es importante señalar que la mayor parte de lo antes mencionado es únicamente válido para columnas de destilación en las que el producto del destilado sea totalmente líquido.

Partiendo de esto, se analizó únicamente la torre DA302, que cumple con este requisito. El esquema de control para esta torre se encuentra en el diagrama de flujo de proceso, en el que se observa que se mantiene fijo el reflujo a la torre y el flujo del vapor de calentamiento se controla con la temperatura de un plato para asegurar la fraccionación y la pureza requeridas.

Este modelo de control se consideró adecuado basándose en las ventajas y desventajas anteriormente citadas para los distintos esquemas de control. En este modelo, el nivel del acumulador se encuentra controlado por el flujo del destilado, mientras que el nivel en el fondo de la torre se encuentra controlado por el producto del fondo. El control de composición está dado por el control de la temperatura en cierto plato, que manipula el flujo de vapor del rehevador. Este es un esquema indirecto para controlar la división

Para determinar el caso base, se utilizó como referencia el flujo y la composición de la corriente de alimentación a la columna, obtenidos en la simulación del proceso, y se realizaron algunas corridas manteniendo el flujo constante y modificando la composición de la corriente, con el fin de determinar cuál composición debe ser aquella que requiera un mayor reflujo y/o una mayor carga térmica; esto se logró variando la composición de metanol y manteniendo la relación entre las composiciones de los otros productos constante. Los resultados obtenidos se muestran a continuación.

A partir de estos resultados se observa que, para una misma recuperación y composición de metanol a la salida de la torre, el caso en el que se requiere de un mayor reflujo y carga térmica es el que corresponde al resultado obtenido en la simulación. Por lo anterior, se consideró adecuado utilizar como caso base, el resultado obtenido de la simulación, aunque posiblemente este no sea el peor caso que uno se pueda encontrar.

Control en Torres de Destilación

Una vez definido el caso base, se realizaron pruebas a circuito abierto, para lo cual se especificaron para la torre de destilación los siguientes parámetros: flujo y composición de la alimentación, plato de alimentación, número de platos, el perfil de presiones, la fracción de vapor en el producto del destilado, que en este caso es cero, el reflujo obtenido en el caso base así como la carga térmica en el rehervidor. En los distintos casos se mantuvieron constantes los parámetros anteriormente mencionados con excepción de la carga térmica en el rehervidor. Ésta última se modificó para cada caso, variando entre -5% y +5% con respecto al caso base.

Los resultados obtenidos se muestran en la siguiente gráfica, en la que se observan los distintos perfiles de temperatura para el caso base, para aquél en el que se especificó una carga térmica en el rehervidor un 5% mayor y en el que se especificó una 5% menor.

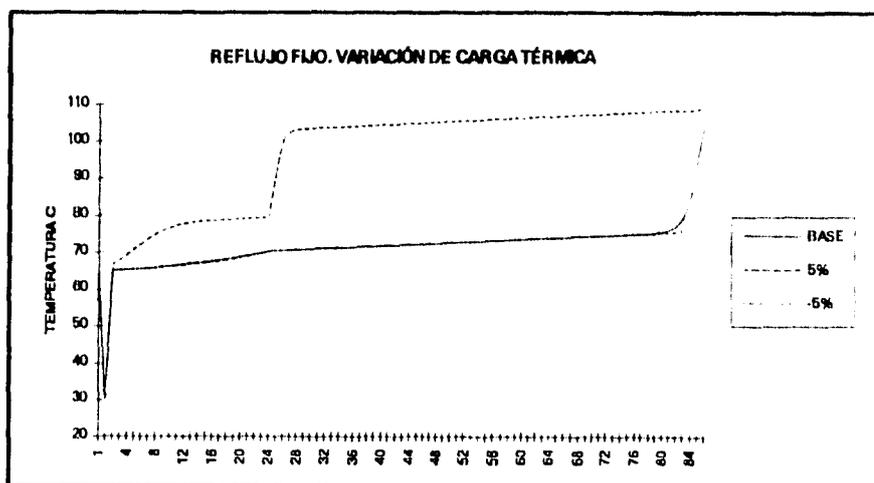


Figura 7

Control en Torres de Destilación

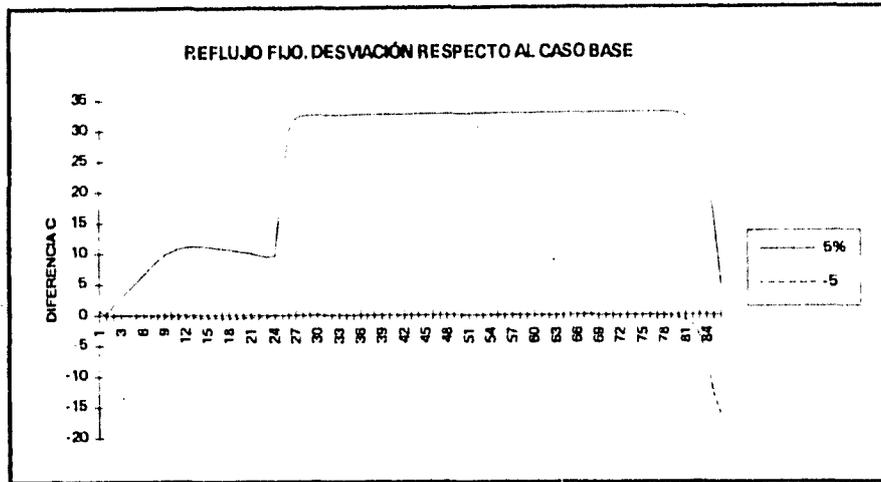


Figura 8

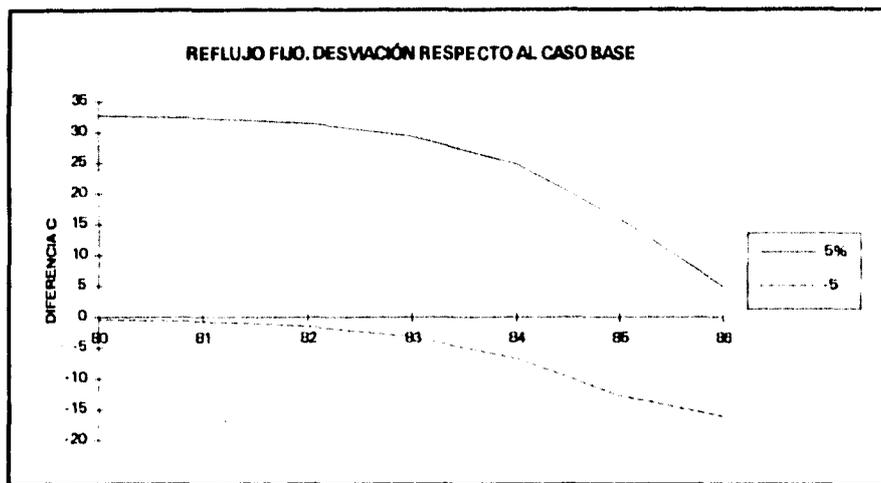


Figura 9

Para determinar el plato en el que se localizará el control de temperatura, Fruehauf y Mahoney (5) recomiendan seleccionar aquel en el que la desviación de temperatura sea semejante en magnitud tanto en el caso de aumento como disminución de la variable a controlar.

Control en Torres de Destilación

Al analizar los perfiles de temperatura para los casos anteriormente mencionados, se puede observar que el aumento en la carga térmica, prácticamente modifica la temperatura en todos los platos de la columna, sin embargo, para la disminución de la carga térmica del rehovidor, se observa que en los platos superiores prácticamente no existe sensibilidad, con excepción de una muy pequeña entre los platos 14 y 22, por lo que los platos localizados en la parte superior de la torre no serían adecuados para la localización del plato de control para la columna de destilación. En el fondo de la torre se encuentra que la desviación en el perfil de temperaturas, es semejante tanto para el aumento como para la disminución en la carga térmica del rehovidor. Al comparar las desviaciones con respecto al caso base, se observa que en el plato 85 si se tiene una carga térmica 5% menor al caso base, la diferencia en la temperatura es de 15.9 °C, mientras que si se tiene una carga térmica 5% mayor, la diferencia de temperaturas es 12.8 °C. Debido a que en este plato las desviaciones son bastante parecidas además de ser lo suficientemente grandes, se determinó que este plato es en el que se debe tener el control de temperatura.

Asumiendo que el plato 85 es en el que se controlará la temperatura, se estableció la temperatura de este plato en 92.8°C, y se realizaron distintas pruebas a circuito cerrado para determinar si es factible este arreglo. Las pruebas a circuito cerrado consistieron en evaluar el funcionamiento de la columna al variar el flujo y la composición de la alimentación, especificando la temperatura en el plato 85 y el reflujo.

En el siguiente cuadro se resumen los resultado de diferentes casos que se simularon a circuito cerrado, esto es, se especificó el reflujo y la temperatura en el plato 85.

PRUEBAS A CIRCUITO CERRADO VARIANDO FLUJO DE ALIMENTACIÓN					
FLUJO DE ALIMENTACIÓN	QN CAL/S	REFLUJO KG/H	TEMP (C) PLATO 85	%MEOH DESTILADO FONDOS	
100% (BASE)	2,502,970	14,745	92.8	99.890	4.648
50%	1,848,920	14,745	92.8	99.925	4.382
33%	1,632,140	14,745	92.8	99.931	4.228

Como se observa en todos los casos la composición cumple con los requisitos establecidos, por lo que se puede suponer que la localización del control de la temperatura es adecuado.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

El simular un proceso permite entender en gran parte su estructura, permite identificar los cuellos de botella y las razones por las que se tienen ciertas características en los equipos. Para poder simular un proceso adecuadamente es importante tener una idea clara de qué es lo que sucede en cada una de las operaciones que se vayan a representar; por ejemplo, al simular un reactor es importante conocer si las reacciones que se llevan a cabo alcanzan el equilibrio termodinámico o si se tienen limitaciones cinéticas para todas o algunas de las reacciones, si es adecuado simularlo como un reactor adiabático o si se debe especificar la temperatura de salida de los productos.

En la simulación realizada, debido a los distintos reactores que se tenían fue necesario simularlos de diferente forma, siendo que el reformador se simuló como un reactor al equilibrio, calculado mediante la minimización de la energía de Gibbs, especificando un acercamiento al equilibrio para las dos reacciones; las reacciones de combustión se simularon al equilibrio, también calculado por la minimización de la energía de Gibbs, a la temperatura de salida de los gases de la sección de radiación, habiéndose determinado con anterioridad que no era conveniente utilizar el cálculo de reactores adiabáticos. Por otra parte, para el reactor de síntesis de metanol, se especificó un reactor al equilibrio en el que únicamente alcanzaban el equilibrio las reacciones de síntesis de metanol, mientras que para las reacciones que dan lugar a productos secundarios se especificó el avance de reacción, dado que estas no alcanzan el equilibrio por limitaciones cinéticas.

Si bien la fuente principal de información para la realización de la simulación es el diagrama de flujo, es importante revisar cuidadosamente esta información, pues en algunos casos es inconsistente, como se observó para las torres de destilación, en las que no se cumple el balance de materia. Además, generalmente la información contenida en el diagrama de flujo puede tener información que sobreespecifica a un equipo, por lo cual es necesario determinar el mejor conjunto de datos para llevar a cabo la simulación. Por ejemplo, para un intercambiador de proceso, en el diagrama se encuentran especificadas tanto las condiciones (presión, temperatura, flujo y composición) de las corrientes de entrada como las de salida, así como la carga térmica; mientras que para la simulación, únicamente se necesitaría la información sobre las corrientes de entrada y la carga térmica o una sola temperatura de salida.

Conclusiones y Recomendaciones

También es importante considerar, en la selección de las variables para especificar un bloque determinado, la facilidad en la convergencia que se puede obtener dependiendo del conjunto de variables que se especifiquen; en las torres de destilación, que se contaba con mucha más información que la necesaria, fue necesario especificar aquellas variables que facilitarían la convergencia, y se observó que era más conveniente especificar la recuperación y composición de un producto en la corriente de salida, que la división de flujos y la relación de reflujo.

Una vez realizada la simulación, se pueden utilizar los resultados para realizar distintos análisis. Destaca el análisis termodinámico de procesos, que siendo la aplicación de las bases termodinámicas para determinar la eficiencia con que se utiliza la energía en un proceso y las oportunidades de ahorro de energía en el mismo, permite identificar las irreversibilidades para posteriormente reducirlas y aumentar la eficiencia del proceso.

En el cálculo del trabajo perdido en la planta, se encontró que casi el 84% del trabajo perdido total se encuentra en la sección de reformación (30.482% el reformador primario, 22.928% el quemador secundario y el resto principalmente los equipos de intercambio de calor). Por lo anterior resulta evidente que la sección en la que se deben enfocar trabajos posteriores será la sección de reformación, aunque esto no implica que de realizarse una integración térmica, por ejemplo, únicamente se considere esta sección, pues es probable que el mejor arreglo se encuentre si se trabaja con toda la planta en conjunto.

Es importante recordar que al analizar cada modificación propuesta, se debe tener en consideración las razones por las que el proceso está definido con su estructura original, para poder determinar que tan viables son dichas modificaciones; en este trabajo se analizaron las ventajas y desventajas que pueden tener algunas modificaciones al proceso.

Se analizó la posibilidad de aumentar la presión a la que se genera vapor en la sección de reformación y se encontró que al aumentar la presión de 40 a 100 kg/cm², existe la posibilidad de obtener más trabajo del sistema, o bien de consumir una menor cantidad de combustible. Es importante enfatizar que únicamente se consideró el aumento en la presión de generación de vapor en la sección de reformación, ya que en la sección de síntesis de metanol, la generación de vapor se lleva a cabo fuera de los tubos del reactor de síntesis de metanol para controlar la temperatura del mismo, por lo que no es posible elevar la presión en este caso.

Conclusiones y Recomendaciones

También se encontró que se puede tener un ahorro de vapor si en la columna de purificación de metanol se elimina el subenfriamiento del reflujo.

El otro aspecto que se analizó en este trabajo fue la localización del plato de control para la temperatura en torres de destilación. Cualquier proceso debe poder controlarse. Muchas veces esto se contrapone con el concepto de minimizar el consumo de energía, como en el caso de las torres de destilación, en las que para minimizar el consumo de energía se necesita un control dual, sin embargo, éste puede presentar problemas de inestabilidad como ya se mencionó; por lo que es importante recordar que en el diseño de un proceso intervienen diferentes aspectos y todos ellos deben ser tomados en cuenta.

El utilizar la simulación de procesos a régimen permanente para determinar la localización del plato de control de temperatura en una columna de destilación, muestra la gran capacidad de esta herramienta al utilizarla para lo que "tradicionalmente" se utiliza la simulación dinámica; aunque es importante tener presente las limitaciones que presenta el utilizar este método.

Al utilizar la simulación a régimen permanente para determinar la localización del plato de control para una torre de destilación, se determina, en cierta forma, la respuesta del sistema, ante una perturbación, una vez que alcanza el equilibrio y se supone que la respuesta dinámica será proporcional a lo determinado, por eso es posible determinar el plato de control en donde se obtengan variaciones simétricas en la temperatura, como resultado de las variaciones en la variable manipulable. En este trabajo se obtuvo el perfil de temperatura en la columna, como respuesta a variaciones en la carga térmica del rehervidor y se localizó el plato de control en donde las variaciones fueron lo suficientemente importantes y simétricas.

Existe aún mucho trabajo que se puede realizar en torno a la planta Metanol II, entre los que destacan la integración térmica del proceso y la optimización del mismo; para lo cual este trabajo se puede utilizar como punto de partida.

BIBLIOGRAFÍA

1. Bazúa Rueda Enrique. *Notas del Curso Propiedades Termodinámicas*. Facultad de Química, UNAM. 1990.
2. Chang, T.; Rousseau, R.W. y Kilpatrick P.K., "Metanol Synthesis Reactions: Calculations of Equilibrium Conversions Using Equations of State." *Ind Eng Chem Process Des Dev*. Vol 25, 1986, pp 477-481.
3. Evans Lawrence B. "Process Modeling: What Lies Ahead." *Chemical Engineering Progress*. Octubre 1990, pp 42-44.
4. Evans Lawrence B. **ADVANCES IN PROCESS FLOWSHEETING SYSTEMS**. Foundations of Computer-aided Chemical Process Design. Vol 1, New York, Engineering Foundation, 1981. pp 425-469
5. Fruenhaus P.S., Mahoney D.P. "Improve Distillation Column Control Design." *Chemical Engineering Progress*. Marzo 1994, pp75-83.
6. Fruenhaus P.S., Mahoney D.P. "Distillation Column Control Design Using Steady State Models: Usfulness and Limitations." *ISA Transactions*. Vol.32, 1993, pp 157-175
7. Graaf G.H. y col. "Chemical Equilibria in Methanol Synthesis." *Chemical Engineering Science*. Vol 41 No 11, 1986, pp 2883-2890.
8. Husain, Asghar. "*Chemical Process Simulation*". New Delhi. Wiley Eastern, Ltd, 1986, pp1-27, 119-141.
9. Kirk Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. Vol 15. 3a edición. pp 398-408.
10. Luyben W.L. "Steady State Energy Conservation Aspects of Distillation Column Control System Design." *Ind Eng Chem Fundam*. Vol 14, No 4, 1975, pp 321-325
11. McKetta John J. Encyclopedia of Chemical Processing and Design Vol 29, 1988 pp 418-452

Bibliografía

12. Muñoz Amador Gustavo. *Simulación de la Planta Metanol I del Complejo Petroquímico Texmelucan*. Tesis. México, CU. 1986.
13. Pémex. Complejo Petroquímico Independencia. Libro de Proceso.
14. Shinskey F.G. *Distillation Control for Productivity and Energy Conservation*. 2a Ed. Mc Graw Hill. 1984 pp 3-59
15. Smith, J.M. y Van Ness, H.C., *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. 4a. edición. Mc Graw Hill. 1989. pp 565-573.
16. Thurston CW "Computer aided design of destilation column controls. Part 1." *Hydrocarbon Processing*. Julio 1981, pp 125-130.
17. Thurston CW "Computer aided design of destilation column controls. Part 2." *Hydrocarbon Processing*. Agosto 1981, pp135-140.
18. Tolliver T.L., McCune L.C. "Distillation Control Design Based on Steady State Simulation." *ISA Transactions*. Vol 17, No 3, 1978, pp 3-10.
19. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 5a edición Vol. A16. pp 465-475
20. Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties, 1991.
21. Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS Interactive Simulation, 1991.
22. Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS User Guide, 1991.
23. Aspen/sp Sample Problems. Series A JSD Simulation Service Company. Denver CO.

APÉNDICE 1

Especificaciones del metanol.

Característica	Grado A	Grado AA
Contenido de metanol mín. % peso	99.85	99.85
Agua, máx %	0.15	0.10
Acetona y aldehidos máx %	0.003	0.003
Acetona, máx %		0.002
Etanol, máx %		0.001
Acidez máxima, como ácido acético	0.003	0.003
Hidrocarburos y aparencia	Libre de opalescencia, materia suspendida y sedimentada	
Sustancias carbonizables de color	No más oscuro que el Color Estandar No. 30, en la escaña de platino-cobalto	
Color	No más oscuro que el Color Estandar No. 5, en la escala de platino cobalto	
Rango de destilación a 760 mmHg	No mayor de 1°C, incluyendo $64.6 \pm 0.1^\circ\text{C}$	
Densidad relativa	0.7920 a 0.7928 a 20/20°C 0.7883 a 0.7893 a 25/25°C	
Olor	Característico, no persistente	
Tiempo al KMnO_4	Sin cambio de color en 30 min	

Tomando como base los estándares ASTM D1152 y E346

APÉNDICE 2

SIMULATE INTERACTIVE=YES

TITLE "METANOL"

DESCRIPTION "SIMULACIÓN DE LA PLANTA DE METANOL II "

; UNIDADES

IN-UNITS MET TEMPERATURE=C PRES='KG/SQCM' &
HEAT-TRANS-COEF='KCAL/HR-SQM-K'
OUT-UNITS MET TEMPERATURE=C PRES='KG/SQCM' &
HEAT-TRANS-COEF='KCAL/HR-SQM-K'

; COMPONENTES

COMPONENTS CO2 CO2 / CO CO / H2 H2 / CH4 CH4 / N2 N2 / H2O H2O /
MEOH CH4O / C2H6 C2H6 / C3H8 C3H8 / O2 O2 / CH2O CH2O /
ETER C2H6O-1 / ETOH C2H6O-2 / ACETONA C3H6O-1

; PROPIEDADES

PROPERTIES SYSOP3/ SYSOP7
MODEL-PARAMETER ESRKS

; DIAGRAMA DE FLUJO

FLOWSHEET

BLOCK MEZC1	IN=P1 P4	OUT=P5
BLOCK EA102	IN=P5 P12	OUT=P6 P13
BLOCK MEZC2	IN=P7 P8	OUT=P9
BLOCK E101	IN=P9 C6	OUT=P10 C7
BLOCK BA101	IN=P10	OUT=P11
BLOCK DC101	IN=P6	OUT=P7
BLOCK EA101	IN=P11 V16	OUT=P12 V20
BLOCK DIV2	IN=C1	OUT=C2 C3

Apéndice 2

BLOCK DIV3	IN=P3	OUT=P4 C4
BLOCK MEZC3	IN=A5 C3 C4	OUT=C5
BLOCK QUEMP	IN=C5	OUT=C6
BLOCK MEZC4	IN=C2 A6 C8	OUT=C9
BLOCK QUEMS	IN=C9	OUT=C10 Q1
BLOCK BB101	IN=V17 Q1	OUT=V21
BLOCK MEZC5	IN=C10 C7	OUT=C11
BLOCK E102I	IN=C11 V25	OUT=V26 C12
BLOCK E102II	IN=C12 V24	OUT=V25 C13
BLOCK E105I	IN=C13 A3	OUT=C14 A4
BLOCK E103	IN=C14 V18	OUT=C15 V19
BLOCK E104	IN=C15 V11	OUT=V12 C16
BLOCK E105II	IN=C16 A2P	OUT=C17A A3
BLOCK E105II	IN=C17A A2	OUT=C17 A2P
BLOCK DIV5	IN=A4	OUT=A5 A6
BLOCK FB101	IN=V22 V14	OUT=V100 L100
BLOCK MEZC7	IN=V21 V20 V19	OUT=V22
BLOCK DIV7	IN=V12	OUT=V13 V14
BLOCK EA103I	IN=P13 V10	OUT=P14 V11
BLOCK F103	IN=P15A	OUT=P15 W1
BLOCK EA103II	IN=P14 V9	OUT=P15A V10
BLOCK EA104	IN=P15 V4	OUT=P16A V5
BLOCK F104	IN=P16A	OUT=P16 W2
BLOCK EE101	IN=P16	OUT=P17
BLOCK FA101	IN=P17	OUT=P18 W3
BLOCK EA105	IN=P18	OUT=P19
BLOCK FA102	IN=P19	OUT=P20 W4
BLOCK GA101	IN=V6	OUT=V7
BLOCK DIV21	IN=V7	OUT=V8 V9
BLOCK GB102	IN=A1	OUT=A2
BLOCK GC201	IN=P20	OUT=P21
BLOCK EA201	IN=P21	OUT=P22
BLOCK FA202	IN=P22	OUT=P23 W5
BLOCK GC201IIA	IN=P23	OUT=P24
BLOCK MEZC31	IN=P24 P37	OUT=P25
BLOCK GC201IIB	IN=P25	OUT=P26
BLOCK EA202	IN=P26 P30	OUT=P29 P33
BLOCK DC201	IN=P29	OUT=P30 P30L
BLOCK EE201	IN=P33	OUT=P34
BLOCK EA203	IN=P34	OUT=P35
BLOCK FA201	IN=P35	OUT=P36 P38
BLOCK DIV31	IN=P36	OUT=P37 P3
BLOCK FB301	IN=P38	OUT=P41 P42
BLOCK DA301	IN=P42 P49	OUT=P43 P50 P50A
BLOCK DA302	IN=P50	OUT=P51 P52 P51A P51B P52A

Apéndice 2

BLOCK DA303	IN=P52 P57	OUT=P53 P58 P58A
BLOCK DIV41	IN=P43	OUT=P44 P45
BLOCK DIV42	IN=P53	OUT=P54 P55
BLOCK EA302	IN=P45 P47A	OUT=P46 P49
BLOCK EA303	IN=P46	OUT=P47 P47A
BLOCK EA309	IN=P55	OUT=P57
BLOCK EA308	IN=P58	OUT=P59
BLOCK EA304	IN=P62	OUT=C8
BLOCK MEZC41	IN=P41 P44	OUT=P60
BLOCK MEZC42	IN=P60 P47	OUT=P61
BLOCK MEZC43	IN=P61 P54	OUT=P62
BLOCK DIV4	IN=L100	OUT=L101 L102
BLOCK DIV6	IN=L102	OUT=V16 V17 V18

; ESPECIFICACIONES DE CORRIENTES

; CORRIENTES DE ALIMENTACION

STREAM P1 TEMP=21 PRES=37 MOLE-FLOW=758
MOLE-FRAC CH4 .9518 / CO2 .001 / N2 .0002 / C2H6 .039 / C3H8 .008

STREAM C1 TEMP=21 PRES=37 MOLE-FLOW=66
MOLE-FRAC CH4 .9518 / CO2 .001 / N2 .0002 / C2H6 .039 / C3H8 .008

STREAM P8 TEMP=430 PRES=19 MASS-FLOW=35500
MASS-FRAC H2O 1

STREAM A1 TEMP=25 PRES=.8 MOLE-FLOW=4381
MOLE-FRAC O2 .21 / N2 .79

STREAM V4 TEMP=42 PRES=2.8 MASS-FLOW=38300
MASS-FRAC H2O 1

STREAM V6 TEMP=105 PRES=1.24 MASS-FLOW=89383
MASS-FRAC H2O 1

STREAM V24 TEMP=250 PRES=40.3 MASS-FLOW=85598
MASS-FRAC H2O 1

; CORRIENTES DE CORTE

STREAM A2P TEMP=133 PRES=.7 MOLE-FLOW=4381
MOLE-FRAC O2 .21 / N2 .79

Apéndice 2

STREAM A3 TEMP=232 PRES=.7 MOLE-FLOW=4381
MOLE-FRAC O2 .21 / N2 .79

STREAM A4 TEMP=369 PRES=.7 MOLE-FLOW=4381
MOLE-FRAC O2 .21 / N2 .79

STREAM P3 TEMP=40 PRES=48
MOLE-FLOW CO2 35.0609 / CO 25.7857 / H2 851.2036 /
CH4 125.6565 / N2 0.1611 / H2O 0.4548 / MEOH 6.8594 /
CH2O 5.6169E-02 / ETER 4.0837E-02 / ETOH 3.2931E-03 /
ACETONA 2.7858E-03

STREAM P47A TEMP=40 PRES=2
MOLE-FLOW CO2 1.0388E-02 / CO 2.5319E-07 / H2 5.2767E-07 /
CH4 1.4497E-04 / N2 2.2749E-08 / H2O 4.8182E-10 /
MEOH 1.0471 / CH2O 1.9259E-03 / ETER 3.7960E-04 /
ETOH 2.0525E-07 / ACETONA 3.1509E-03

STREAM P10 TEMP=509 PRES=16.3
MOLE-FLOW CO2 3.0264 / CO 1.6683 / H2 55.0728 / CH4 729.5943
/
N2 0.1620 / H2O 1970.6095 / MEOH 0.4438 / C2H6 29.5620 /
C3H8 6.0640 / O2 0.0 / CH2O 3.6342E-03 / ETER 2.6421E-03 /
ETOH 2.1306E-04 / ACETONA 1.8024E-04

STREAM P37 PRES=49.3 TEMP=40
MOLE-FLOW CO2 326.5383 / CO 240.1547 / H2 7927.6486 /
CH4 1170.2967 / N2 1.5005 / H2O 4.2365 / MEOH 63.8854 /
CH2O 0.5231 / ETER 0.3803 / ETOH 3.0670E-02 /
ACETONA 2.5945E-02

STREAM P29 PRES=52.6 TEMP=230
MOLE-FLOW CO2 514.0695 / CO 737.3895 / H2 1.0165E+04 /
CH4 1297.5513 / N2 1.6623 / H2O 11.0587 / MEOH 63.8854 /
CH2O 0.5234 / ETER 0.3806 / ETOH 3.0670E-02 /
ACETONA 2.5945E-02

STREAM P49 PRES=2 TEMP=80
MOLE-FLOW CO2 1.7161 / CO 5.4561E-05 / H2 1.2032E-04 /
CH4 2.8866E-02 / N2 4.5632E-06 / H2O 2.4792E-07 /
MEOH 238.3494 / CH2O 0.2874 / ETER 6.0086E-02 /
ETOH 6.1800E-05 / ACETONA 0.5373

STREAM P57 PRES=2 TEMP=80
MOLE-FLOW H2O 1.0128E-03 / MEOH 71.7066 / ETOH 4.8058 /

Apéndice 2

STREAM L100 VFRAC=0 PRES=40.3 MASS-FLOW= 9.173E+04
MASS-FRAC H2O 1

STREAM V25 TEMP=390 PRES=40.3 MASS-FLOW=85598
MASS-FRAC H2O 1

STREAM V11 TEMP=190 PRES=58.8 MASS-FLOW=87395
MASS-FRAC H2O 1

STREAM V10 TEMP=119 PRES=58.8 MASS-FLOW=87398
MASS-FRAC H2O 1

; CORRIENTES DE CALOR

DEF-STREAMS HEAT Q1

TEAR A2P / A3 / V25 / V10 / V11 / P29 / P37 / P3 / P49 / P57 / L100 / P47A / P10 / A4

CONV-OPTIONS

PARAM TEAR-METHOD=BROYDEN

BROYDEN MAXIT=50

; ESPECIFICACIONES DE LOS BLOQUES

BLOCK MEZC1 MIXER

PARAM PRES=17.5 NPHASE=1

BLOCK EA102 HEATX

PARAM T-HOT=324 PRES-HOT=14

FEEDS HOT=P12 COLD=P5

PRODUCTS HOT=P13 COLD=P6

HEAT-TR-COEF U=191.7

BLOCK MEZC2 MIXER

PARAM PRES=16.9 NPHASE=1

BLOCK DC101 HEATER

PARAM TEMP=390

Apéndice 2

BLOCK BA101 RGIBBS

PARAM TEMP=865 PRES=14.3 NREAC=2
PROD CH4 / CO / CO2 / H2O / N2 / H2
STOIC 1 CH4 -1 / H2O -1 / CO 1 / H2 3
STOIC 2 CO -1 / H2O -1 / CO2 1 / H2 1
TAPP-SPEC 1 -20
TAPP-SPEC 2 25

BLOCK EA101 HEATX

PARAM T-HOT=430 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=14.2 PRES-
COLD=40.1
FEEDS HOT=P11 COLD=V16
PRODUCTS HOT=P12 COLD=V20
HEAT-TR-COEF U=297.5

BLOCK E101 HEATX

PARAM T-HOT=900 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.581 PRES-
COLD=16.3
FEEDS HOT=C6 COLD=P9
PRODUCTS HOT=C7 COLD=P10
HEAT-TR-COEF U=58

BLOCK DIV2 FSPLIT

FRAC C3 0.146

BLOCK DIV3 FSPLIT

FRAC C4 0.9353

BLOCK MEZC3 MIXER

PARAM PRES=0.6 NPHASE=1

BLOCK QUEMP RGIBBS

PARAM TEMP=980 PRES=0.60
PROD CO2 / H2O / N2 / O2 / CO

BLOCK MEZC4 MIXER

PARAM PRES=0.6 NPHASE=1

BLOCK QUEMS RGIBBS

PARAM TEMP=990 PRES=0.60
PROD CO2 / H2O / N2 / O2 / CO

BLOCK MEZC5 MIXER

PARAM PRES=0.59 NPHASE=1

Apéndice 2

BLOCK BB101 HEATER
PARAM PRES=40.1

BLOCK E102I HEATX
PARAM T-HOT=762 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59 PRES-
COLD=38
FEEDS HOT=C11 COLD=V25
PRODUCTS HOT=C12 COLD=V26
HEAT-TR-COEF U=42

BLOCK E102II HEATX
PARAM T-HOT=606 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59 &
PRES-COLD=38
FEEDS HOT=C12 COLD=V24
PRODUCTS HOT=C13 COLD=V25
HEAT-TR-COEF U=85

BLOCK E105I HEATX
PARAM T-HOT=498 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59 &
PRES-COLD=0.7
FEEDS HOT=C13 COLD=A3
PRODUCTS HOT=C14 COLD=A4
HEAT-TR-COEF U=25

BLOCK E103 HEATX
PARAM T-HOT=418 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59 &
PRES-COLD=40.1
FEEDS HOT=C14 COLD=V18
PRODUCTS HOT=C15 COLD=V19
HEAT-TR-COEF U=80

BLOCK E104 HEATX
PARAM T-HOT=318 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59
FEEDS HOT=C15 COLD=V11
PRODUCTS HOT=C16 COLD=V12
HEAT-TR-COEF U=75.4

BLOCK E105II HEATX
PARAM T-HOT=240 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59 &
PRES-COLD=0.7
FEEDS HOT=C16 COLD=A2P
PRODUCTS HOT=C17A COLD=A3
HEAT-TR-COEF U=32.3

Apéndice 2

BLOCK E105III HEATX

PARAM T-HOT=160 TYPE=COUNTERCURRENT PRES-HOT=0.59 &
PRES-COLD=0.7
FEEDS HOT=C17A COLD=A2
PRODUCTS HOT=C17 COLD=A2P
HEAT-TR-COEF U=21.2

BLOCK DIV5 FSPLIT

FRAC A5 0.8

BLOCK MEZC7 MIXER

PARAM PRES=40.1

BLOCK DIV7 FSPLIT

FRAC V14 0.734

BLOCK FB101 FLASH2

PARAM PRES=40.1 DUTY=0

BLOCK EA103I HEATX

PARAM T-HOT=137 PRES-HOT=13.8
FEEDS HOT=P13 COLD=V10
PRODUCTS HOT=P14 COLD=V11
HEAT-TR-COEF U=439.7

BLOCK EA103II HEATX

PARAM T-HOT=133 PRES-HOT=13.6
FEEDS HOT=P14 COLD=V9
PRODUCTS HOT=P15A COLD=V10
HEAT-TR-COEF U=392.8

BLOCK EA104 HEATX

PARAM T-HOT=127 PRES-HOT=13.4
FEEDS HOT=P15 COLD=V4
PRODUCTS HOT=P16A COLD=V5
HEAT-TR-COEF U=430.1

BLOCK EE101 HEATER

PARAM TEMP=60 PRES=13.3

BLOCK FA101 FLASH2

PARAM PRES=13.30 DUTY=0

BLOCK EA105 HEATER

PARAM TEMP=40 PRES=13.2

Apéndice 2

BLOCK FA102 FLASH2
PARAM PRES=13.2 DUTY=0

BLOCK GA101 PUMP
PARAM PRES=58.8

BLOCK DIV21 FSPLIT
FRAC V9 0.97812

BLOCK F103 FLASH2
PARAM DUTY=0 PRES=0

BLOCK F104 FLASH2
PARAM DUTY=0 PRES=0

BLOCK GB102 COMPR
PARAM TYPE=POLYTROPIC PRES=0.8446

BLOCK GC201I COMPR
PARAM TYPE=POLYTROPIC PRES=28.1 TEMP=153

BLOCK EA201 HEATER
PARAM TEMP=40

BLOCK FA202 FLASH2
PARAM PRES=28.1 DUTY=0

BLOCK GC201IIA COMPR
PARAM TYPE=POLYTROPIC PRES=49.3 TEMP=117

BLOCK GC201IIB COMPR
PARAM TYPE=POLYTROPIC PRES=52.6 TEMP=69

BLOCK MEZC31 MIXER
PARAM PRES=47

BLOCK EA202 HEATX
PARAM T-COLD=230
FEEDS HOT=P30 COLD=P26
PRODUCTS HOT=P33 COLD=P29

BLOCK DC201 REQUIL
PARAM TEMP=255 PRES=50.8 NREAC=6
STOIC 1 CO -1 * / H2 -2 * / MEOH 1 *

Apéndice 2

STOIC 2 CO2 -1 * / H2 -1 * / CO 1 * / H2O 1 *
STOIC 3 MEOH -2 * / ETOH 1 * / H2O 1 *
STOIC 4 MEOH -2 * / ETER 1 * / H2O 1 *
STOIC 5 MEOH -3 * / ACETONA 1 * / H2 6 *
STOIC 6 CO -1 * / H2 -1 * / CH2O 1 *
EXTENT-SPEC 3 .31872 / 4 0.0673 / 5 0.02856 / 6 0.1346

BLOCK EE201 HEATER
PARAM TEMP=60

BLOCK EA203 HEATER
PARAM TEMP=40 PRES=49.3

BLOCK FA201 FLASH2
PARAM DUTY=0 PRES=49.3

BLOCK DIV31 FSPLIT
FRAC P3 0.0969607

BLOCK FB301 FLASH2
PARAM PRES=5 DUTY=0

BLOCK DA301 RADFRAC
PARAM NSTAGE=40
FEEDS P42 20 / P49 1
PRODUCTS P43 1 V / P50 40 L
PSEUDO-STREAM P50A 40 R
P-SPEC 1 2 / 40 2.3
COL-SPECS MOLE-RDV=1 Q1=0 B:F=0.75
THERMOSYPHON MASS-FLOW=123700

BLOCK DIV41 FSPLIT
FRAC P45 0.97439

BLOCK EA302 FLASH2
PARAM PRES=0 VFRAC=0.02629

BLOCK DA302 RADFRAC
PROPERTIES SYSOP7
PARAM NSTAGE=86 ALGORITHM=NONIDEAL
FEEDS P50 24
PRODUCTS P51 1 L / P52 86 L
PSEUDO-STREAM P51A 2 V / P51B 1 L / P52A 86 R
P-SPEC 2 1.05 / 86 1.4
COL-SPECS MASS-RDV=0 D:F=.7757 MASS-RR=1.1

Apéndice 2

SC-REFLUX TEMP=30
THERMOSYPHON MASS-FLOW=74400
VARY 1 D:F 0.57 0.985
SPEC 1 MASS-RECOV 0.9930 STREAM=P51 COMPS=MEOH

BLOCK DA303 RADFRAC
PROPERTIES SYSOP7
PARAM NSTAGE=30 ALGORITHM=NONIDEAL
FEEDS P52 16 / P57 1
PRODUCTS P53 1 V / P58 30 L
PSEUDO-STREAM P58A 30 R
P-SPEC 2 2 / 30 2.3
COL-SPECS MOLE-RDV=1 Q1=0 D:F=0.3411
THERMOSYPHON MASS-FLOW=21700

BLOCK DIV42 FSPLIT
FRAC P55 0.9527

BLOCK EA309 HEATER
PARAM PRES=0 VFRAC=0

BLOCK EA308 HEATER
PARAM TEMP=50

BLOCK MEZC41 MIXER

BLOCK MEZC42 MIXER

BLOCK MEZC43 MIXER

BLOCK EA304 HEATER
PARAM TEMP=100 PRES=1.1

BLOCK EA303 FLASH2
PARAM PRES=0 TEMP=40

BLOCK DIV4 FSPLIT
FRAC L101 0.075

BLOCK DIV6 FSPLIT
FRAC V18 0.12177
FRAC V17 0.30503

TESIS SIN PAGINACION

COMPLETA LA INFORMACION

Apéndice 3

STREAM ID	A1	A2	A2P	A3	A4	A5	A6	C1	C10	C11
FROM	---	GB102	E105III	E105II	E105I	DIV5	DIV5	---	QUEMS	MEZC5
TO	GB102	E105III	E105II	E105I	DIV5	MEZC3	MEZC4	DIV2	MEZC5	E102I
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	0	0	0	0	0	0	0	6.60E-02	77.4801	268.6376
CO	0	0	0	0	0	0	0	0	3.41E-05	1.56E-04
H2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH4	0	0	0	0	0	0	0	62.8188	0	0
N2	3460.99	3460.99	3460.99	3460.99	3460.99	2768.792	692.198	1.32E-02	692.2101	3461.1547
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0	142.55	1206.9206
MEOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	2.574	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0.528	0	0
O2	520.01	920.01	920.01	920.01	920.01	736.008	184.002	0	45.7343	106.7281
CH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETER	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	4381	4381	4381	4381	4381	3504.8	876.2	66	957.9746	5043.4413
KG/HR	1.26E+05	1.26E+05	1.26E+05	1.26E+05	1.26E+05	1.01E+05	2.53E+04	1111.7598	2.68E+04	1.34E+05
L/MIN	2.31E+06	2.23E+06	3.57E+06	4.43E+06	5.68E+06	4.55E+06	1.14E+06	689.3008	2.85E+06	1.44E+07
STATE VARIABLES:										
TEMP C	25	31.4602	130.6424	227.9584	369.3022	369.3021	369.3021	21	990	917.0359
PRES KG/SQCM	0.8	0.8446	0.7	0.7	0.7	0.7	0.7	37	0.6	0.59
VFRAC	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
LFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-1.2401	43.8485	739.4945	1429.9382	2455.3819	2455.3809	2455.3809	-1.83E+04	-8375.9573	-1.16E+04
CAL/GM	-4.30E-02	1.5198	25.6323	49.5644	85.1083	85.1083	85.1083	-1086.9316	-299.0411	-438.0815
CAL/SEC	-1509.2287	5.34E+04	9.00E+05	1.74E+06	2.99E+06	2.39E+06	5.98E+05	-3.36E+05	-2.23E+06	-1.63E+07
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	1.5247	1.5666	3.9162	5.4477	7.2492	7.2492	7.2492	-27.659	12.7048	11.2069
CAL/GM-K	5.29E-02	5.43E-02	0.1357	0.1888	0.2512	0.2512	0.2512	-1.6419	0.4535	0.422
DENSITY:										
MOL/CC	3.17E-05	3.27E-05	2.04E-05	1.65E-05	1.28E-05	1.28E-05	1.28E-05	1.60E-03	5.60E-06	5.85E-06
GM/CC	9.13E-04	9.44E-04	5.90E-04	4.75E-04	3.71E-04	3.71E-04	3.71E-04	2.69E-02	1.57E-04	1.55E-04
AVG MW	28.85	28.85	28.85	28.85	28.85	28.85	28.85	16.8448	28.0093	26.5568

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Apéndice 3

STREAM ID	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C17A	C2	C3	C4
FROM	E102I	E102II	E105I	E103	E104	E105III	E105II	DIV2	DIV2	DIV3
TO	E102II	E105I	E103	E104	E105II	---	E105III	MEZC4	MEZC3	MEZC3
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	VAPOR	VAPOR	VAPOR							
COMPONENTS: KMOL/HR										
CO2	268.6376	268.6376	268.6376	268.6376	268.6376	268.6376	268.6376	5.64E-02	9.64E-03	32.7918
CO	1.56E-04	0	0	24.117						
H2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	796.0987
CH4	0	0	0	0	0	0	0	53.6472	9.1715	117.5262
N2	3461.1547	3461.1547	3461.1547	3461.1547	3461.1547	3461.1547	3461.1547	1.13E-02	1.93E-03	0.1506
H2O	1206.9206	1206.9206	1206.9206	1206.9206	1206.9206	1206.9206	1206.9206	0	0	0.4254
MEOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6.4155
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	2.1982	0.3758	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0.4509	7.71E-02	0
O2	106.7281	106.7281	106.7281	106.7281	106.7281	106.7281	106.7281	0	0	0
CH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5.25E-02
ETER	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3.82E-02
ETOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3.08E-03
ACETONA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2.61E-03
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	5043.4413	5043.4413	5043.4413	5043.4413	5043.4413	5043.4413	5043.4413	56.364	9.636	977.6219
KG/HR	1.34E+05	949.4429	162.3169	5830.1796						
L/MIN	1.25E+07	1.06E+07	9.32E+06	8.35E+06	7.14E+06	5.23E+06	6.20E+06	588.6629	100.6379	8998.7449
STATE VARIABLES:										
TEMP C	762	606	498	418	318	160	240	21	21	40
PRES KG/SQCM	0.59	0.59	0.59	0.59	0.59	0.59	0.59	37	37	49.3
VFRAC	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
LFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-1.30E+04	-1.43E+04	-1.52E+04	-1.59E+04	-1.66E+04	-1.78E+04	-1.72E+04	-1.83E+04	-1.83E+04	-6196.0381
CAL/GM	-489.1854	-539.1599	-572.7053	-596.9601	-626.5746	-671.9166	-649.1625	-1086.9316	-1086.9316	-1038.9701
CAL/SEC	-1.82E+07	-2.01E+07	-2.13E+07	-2.22E+07	-2.33E+07	-2.50E+07	-2.42E+07	-2.87E+05	-4.90E+04	-1.68E+06
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	9.9855	8.5965	7.5157	6.634	5.4052	3.0374	4.3172	-27.659	-27.659	-8.0317
CAL/GM-K	0.376	0.3237	0.283	0.2498	0.2035	0.1143	0.1625	-1.6419	-1.6419	-1.3467
DENSITY:										
MOL/CC	6.72E-06	7.91E-06	9.02E-06	1.01E-05	1.18E-05	1.61E-05	1.36E-05	1.60E-03	1.60E-03	1.81E-03
GM/CC	1.79E-04	2.10E-04	2.40E-04	2.67E-04	3.13E-04	4.27E-04	3.60E-04	2.69E-02	2.69E-02	1.08E-02
AVG MW	26.5568	26.5568	26.5568	26.5568	26.5568	26.5568	26.5568	16.8448	16.8448	5.9636

Apéndice 3

STREAM ID	C5	C6	C7	C8	C9	L100	L101	L102	P1	P10
FROM	MEZC3	QUEMP	E101	EA304	MEZC4	FB101	DIV4	DIV4	---	E101
TO	QUEMP	E101	MEZC5	MEZC4	QUEMS	DIV4	---	DIV6	MEZC1	BA101
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR	VAPOR
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	32.8015	191.1575	191.1575	4.7367	4.7931	0	0	0	0.758	3.0264
CO	24.117	1.21E-04	1.21E-04	5.87E-02	5.87E-02	0	0	0	0	1.6683
H2	796.0987	0	0	0.8008	0.8008	0	0	0	0	55.0706
CH4	126.6977	0	0	1.5983	55.2455	0	0	0	721.4644	729.5643
N2	2768.9446	2768.9446	2768.9446	9.08E-04	692.2101	0	0	0	0.1516	0.162
H2O	0.4254	1064.3706	1064.3706	1.17E-02	1.17E-02	5091.9333	381.895	4710.0383	0	1970.6095
MEOH	6.4155	0	0	10.9497	10.9497	0	0	0	0	0.4438
C2H6	0.3758	0	0	0	2.1982	0	0	0	29.562	29.562
C3H8	7.71E-02	0	0	0	0.4509	0	0	0	6.064	6.064
O2	736.008	60.9937	60.9937	0	184.002	0	0	0	0	0
CH2O	5.25E-02	0	0	7.84E-02	7.84E-02	0	0	0	0	3.64E-03
ETER	3.82E-02	0	0	2.64E-02	2.64E-02	0	0	0	0	2.64E-03
ETOH	3.08E-03	0	0	0.2383	0.2383	0	0	0	0	2.13E-04
ACETONA	2.61E-03	0	0	2.53E-02	2.53E-02	0	0	0	0	1.80E-04
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	4492.0579	4085.4667	4085.4667	18.5254	951.0894	5091.9333	381.895	4710.0383	758	2796.2077
KG/HR	1.07E+05	1.07E+05	1.07E+05	604.4749	2.68E+04	9.17E+04	6879.8383	8.49E+04	1.28E+04	4.87E+04
L/MIN	6.01E+06	1.21E+07	1.17E+07	8813.0904	1.35E+06	2676.5823	200.7436	2475.8386	7916.5161	1.89E+05
STATE VARIABLES										
TEMP C	295.078	980	900	100	329.9538	248.1771	248.1771	248.1771	21	509.3857
PRES KG/SQCM	0.6	0.6	0.581	1.1	0.6	40.1	40.1	40.1	37	16.3
VFRAC	1	1	1	1	1	0	0	0	1	1
LFRAC	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY										
CAL/MOL	528.0004	-1.17E+04	-1.24E+04	-5.43E+04	118.4955	-6.42E+04	-6.42E+04	-6.42E+04	-1.83E+04	-4.12E+04
CAL/GM	22.1444	-445.8175	-472.9141	-1665.4541	4.2001	-3561.1903	-3561.1903	-3561.1903	-1086.9316	-2369.3598
CAL/SEC	6.59E+05	-1.33E+07	-1.41E+07	-2.80E+05	3.13E+04	-9.07E+07	-6.81E+06	-8.39E+07	-3.86E+06	-3.20E+07
ENTROPY										
CAL/MOL-K	7.3603	11.3726	10.8508	-16.1917	6.3004	-28.7296	-28.7296	-28.7296	-27.659	-8.139
CAL/GM-K	0.3087	0.4338	0.4139	-0.4962	0.2233	-1.5947	-1.5947	-1.5947	-1.6419	-0.4675
DENSITY:										
MOL/CC	1.25E-05	5.65E-06	5.84E-06	3.50E-05	1.17E-05	3.17E-02	3.17E-02	3.17E-02	1.60E-03	2.47E-04
GM/CC	2.97E-04	1.48E-04	1.53E-04	1.14E-03	3.31E-04	0.5712	0.5712	0.5712	2.69E-02	4.30E-03
AVG MW	23.8434	26.2162	26.2162	32.6295	28.2122	18.015	18.015	18.015	16.8448	17.4663

Apéndice 3

STREAM ID	P11	P12	P13	P14	P15	P15A	P16	P16A	P17	P18
FROM	BA101	EA101	EA102	EA103I	F103	EA103II	F104	EA104	EE101	FA101
TO	EA101	EA102	EA103I	EA103II	EA104	F103	EE101	F104	FA101	EA105
SUBSTREAM: MIXED										
PHASE	VAPOR	VAPOR	VAPOR	MIXED	VAPOR	MIXED	VAPOR	MIXED	MIXED	VAPOR
COMPONENTS: KMOL/HR										
CO2	187.5655	187.5655	187.5655	187.5655	187.5539	187.5655	187.5472	187.5539	187.5472	187.5321
CO	497.2362	497.2362	497.2362	497.2362	497.2354	497.2362	497.2349	497.2354	497.2349	497.2347
H2	2237.7833	2237.7833	2237.7833	2237.7833	2237.7786	2237.7833	2237.7761	2237.7786	2237.7761	2237.7742
CH4	127.257	127.257	127.257	127.257	127.2557	127.257	127.255	127.2557	127.255	127.2544
N2	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162
H2O	1106.4138	1106.4138	1106.4138	1106.4138	836.5495	1106.4138	674.2534	836.5495	674.2534	39.8959
MEOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETER	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	4156.4179	4156.4179	4156.4179	4156.4179	3886.5353	4156.4179	3724.2288	3886.5353	3724.2288	3089.8533
KG/HR	4.87E+04	4.87E+04	4.87E+04	4.87E+04	4.38E+04	4.87E+04	4.09E+04	4.38E+04	4.09E+04	2.95E+04
L/MIN	4.69E+05	2.92E+05	2.51E+05	1.68E+05	1.64E+05	1.64E+05	1.57E+05	1.57E+05	1.10E+05	1.10E+05
STATE VARIABLES:										
TEMP C	865	430	324	137	133	133	127	127	60	60
PRES KG/SQCM	14.3	14.2	14	13.8	13.6	13.6	13.4	13.4	13.3	13.3
VFRAC	1	1	1	0.9649	1	0.935	1	0.9582	0.8296	1
LFRAC	0	0	0	3.50E-02	0	6.49E-02	0	4.18E-02	0.1703	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-1.66E+04	-2.02E+04	-2.11E+04	-2.29E+04	-2.02E+04	-2.32E+04	-1.86E+04	-2.06E+04	-2.09E+04	-1.12E+04
CAL/GM	-1413.7937	-1727.9356	-1800.2685	-1953.1882	-1789.1818	-1980.9109	-1694.8488	-1829.7233	-1906.6558	-1174.491
CAL/SEC	-1.91E+07	-2.34E+07	-2.43E+07	-2.64E+07	-2.18E+07	-2.68E+07	-1.92E+07	-2.23E+07	-2.17E+07	-9.61E+06
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	6.9069	2.8626	1.5856	-2.1221	-0.7	-2.8899	-0.3689	-1.8045	-6.5618	1.44E-02
CAL/GM-K	0.5898	0.2444	0.1354	-0.1812	-6.21E-02	-0.2467	-3.36E-02	-0.16	-0.5977	1.51E-03
DENSITY:										
MOL/CC	1.48E-04	2.37E-04	2.76E-04	4.12E-04	3.95E-04	4.22E-04	3.94E-04	4.11E-04	5.63E-04	4.68E-04
GM/CC	1.73E-03	2.78E-03	3.23E-03	4.82E-03	4.45E-03	4.94E-03	4.33E-03	4.64E-03	6.18E-03	4.46E-03
AVG MW	11.71	11.71	11.71	11.71	11.2721	11.71	10.9782	11.2721	10.9782	9.5334

Apéndice 3

STREAM ID	P19	P20	P21	P22	P23	P24	P25	P26	P29	P3
FROM	EA105	FA102	GC2011	EA201	FA202	GC201IIA	MEZC31	GC201IIB	EA202	DIV31
TO	FA102	GC2011	EA201	FA202	GC201IIA	MEZC31	GC201IIB	EA202	DC201	DIV3
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	MIXED	VAPOR	VAPOR	MIXED	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	187.5321	187.5316	187.5316	187.5316	187.5313	187.5313	514.0635	514.0635	514.0635	35.0602
CO	497.2347	497.2347	497.2347	497.2347	497.2347	497.2347	737.3859	737.3859	737.3859	25.7854
H2	2237.7742	2237.7741	2237.7741	2237.7741	2237.7741	2237.7741	1.02E+04	1.02E+04	1.02E+04	851.1693
CH4	127.2544	127.2543	127.2543	127.2543	127.2543	127.2543	1297.5476	1297.5476	1297.5476	125.6561
N2	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	0.162	1.6625	1.6625	1.6625	0.1611
H2O	39.8959	13.905	13.905	13.905	6.8222	6.8222	11.0585	11.0585	11.0585	0.4548
MEOH	0	0	0	0	0	0	63.8837	63.8837	63.8837	6.8593
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	0	0	0	0	0	0	0.5232	0.5232	0.5232	5.62E-02
ETER	0	0	0	0	0	0	0.3805	0.3805	0.3804	4.09E-02
ETOH	0	0	0	0	0	0	3.07E-02	3.07E-02	3.07E-02	3.29E-03
ACETONA	0	0	0	0	0	0	2.59E-02	2.59E-02	2.59E-02	2.79E-03
TOTAL FLOW										
KMOL/HR	3089.8533	3063.862	3063.862	3063.862	3056.7788	3056.7788	1.28E+04	1.28E+04	1.28E+04	1045.2495
KG/HR	2.95E+04	2.90E+04	2.90E+04	2.90E+04	2.89E+04	2.89E+04	8.69E+04	8.69E+04	8.69E+04	6233.4862
L/MIN	1.03E+05	1.03E+05	6.65E+04	4.88E-04	4.88E+04	3.50E+04	1.31E+05	1.21E+05	1.77E+05	9621.2389
STATE VARIABLES										
TEMP C	40	40	153	40	40	117	58.3375	69	230	39.9999
PRES KG/SQCM	13.2	13.2	28.1	28.1	28.1	49.3	47	52.6	52.6	49.3
VFRAC	0.9915	1	1	0.9976	1	1	1	1	1	1
LFRAC	8.41E-03	0	0	2.31E-03	0	0	0	0	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY										
CAL/MOL	-1.14E+04	-1.09E+04	-1.01E+04	-1.10E+04	-1.08E+04	-1.03E+04	-7172.0338	-7093.6102	-5886.6779	-6196.0381
CAL/GM	-1199.1673	-1156.8839	-1070.5386	-1159.7292	-1147.9825	-1088.8181	-1055.5225	-1043.9807	-866.3541	-1038.9701
CAL/SEC	-9.81E+06	-9.32E+06	-8.62E+06	-9.34E+06	-9.20E+06	-8.73E+06	-2.55E+07	-2.52E+07	-2.09E+07	-1.80E+06
ENTROPY										
CAL/MOL-K	-0.6975	-0.3651	0.3452	-1.9643	-1.8765	-1.4202	-6.2516	-6.248	-3.361	-8.0317
CAL/GM-K	-7.32E-02	-3.86E-02	3.65E-02	-0.2076	-0.1987	-0.1504	-0.92	-0.9195	-0.4946	-1.3467
DENSITY										
MOL/CC	4.98E-04	4.94E-04	7.67E-04	1.05E-03	1.04E-03	1.45E-03	1.63E-03	1.77E-03	1.21E-03	1.81E-03
GM/CC	4.75E-03	4.67E-03	7.26E-03	9.90E-03	9.85E-03	1.37E-02	1.11E-02	1.20E-02	8.20E-03	1.08E-02
AVG MW	9.5334	9.4615	9.4615	9.4615	9.4416	9.4416	6.7947	6.7947	6.7947	5.9636

Apéndice 3

STREAM ID	P30	P30L	P33	P34	P35	P36	P37	P38	P4	P41
FROM	DC201	DC201	EA202	EE201	EA203	FA201	DIV31	FA201	DIV3	FB301
TO	EA202	---	EE201	EA203	FA201	DIV31	MEZC31	FB301	MEZC1	MEZC41
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	VAPOR	MIXED	MIXED	MIXED	MIXED	VAPOR	VAPOR	LIQUID	VAPOR	VAPOR
COMPONENTS: KMOL/HR										
CO2	366.3292	0	366.3292	366.3292	366.3292	361.5924	326.5322	4.7367	2.2684	0.7376
CO	265.9953	0	265.9953	265.9953	265.9953	265.9366	240.1512	5.87E-02	1.6683	5.38E-02
H2	8779.2994	0	8779.2994	8779.2994	8779.2994	8778.4986	7927.3292	0.8008	55.0706	0.7722
CH4	1297.5476	0	1297.5476	1297.5476	1297.5476	1295.9493	1170.2932	1.5983	8.1299	1.0581
N2	1.6625	0	1.6625	1.6625	1.6625	1.6616	1.5004	9.08E-04	1.04E-02	7.42E-04
H2O	159.185	0	159.185	159.185	159.185	4.6911	4.2362	154.4938	2.94E-02	1.16E-02
MEOH	682.0273	0	682.0273	682.0273	682.0273	70.743	63.8837	611.2842	0.4438	0.1698
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	0.6578	0	0.6578	0.6578	0.6578	0.5794	0.5232	7.84E-02	3.64E-03	1.36E-03
ETHER	0.4477	0	0.4477	0.4477	0.4477	0.4213	0.3805	2.64E-02	2.64E-03	9.51E-04
ETOH	0.3493	0	0.3493	0.3493	0.3493	3.40E-02	3.07E-02	0.3154	2.13E-04	8.00E-05
ACETONA	5.45E-02	0	5.45E-02	5.45E-02	5.45E-02	2.87E-02	2.59E-02	2.58E-02	1.80E-04	6.51E-05
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	1.16E+04	0	1.16E+04	1.16E+04	1.16E+04	1.08E+04	9734.8869	773.4197	67.6276	2.8055
KG/HR	8.69E+04	0	8.69E+04	8.69E+04	8.69E+04	6.43E+04	5.81E+04	2.26E+04	403.3065	58.2581
L/MIN	1.73E+05	0	1.21E+05	1.04E+05	9.98E+04	9.92E+04	8.96E+04	619.4369	622.4941	247.7068
STATE VARIABLES:										
TEMP C	255	MISSING	99.0649	60	40	39.9999	39.9999	39.9999	40	41.2312
PRES KG/SQCM	50.8	50.8	50.8	50.8	49.3	49.3	49.3	49.3	49.3	5
VFRAC	1	MISSING	0.9895	0.9422	0.933	1	1	0	1	1
LFRAC	0	MISSING	1.05E-02	5.77E-02	6.69E-02	0	0	1	0	0
SFRAC	0	MISSING	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-7457.3248	MISSING	-8793.5949	-9527.7859	-9783.6314	-6196.0379	-6196.0381	-5.98E+04	-6196.0381	-3.50E+04
CAL/GM	-991.2888	MISSING	-1168.9168	-1266.5115	-1300.5205	-1038.9701	-1038.9701	-2043.6498	-1038.9701	-1687.5056
CAL/SEC	-2.39E+07	MISSING	-2.82E+07	-3.06E+07	-3.14E+07	-1.86E+07	-1.68E+07	-1.28E+07	-1.16E+05	-2.73E+04
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	-5.253	MISSING	-8.2856	-10.3601	-11.0937	-8.0317	-8.0317	-53.7717	-8.0317	-8.6597
CAL/GM-K	-0.6982	MISSING	-1.1014	-1.3771	-1.4746	-1.3467	-1.3467	-1.8379	-1.3467	-0.4171
DENSITY:										
MOL/CC	1.11E-03	MISSING	1.59E-03	1.85E-03	1.93E-03	1.81E-03	1.81E-03	2.08E-02	1.81E-03	1.89E-04
GM/CC	8.37E-03	MISSING	1.20E-02	1.39E-02	1.45E-02	1.08E-02	1.08E-02	0.6088	1.08E-02	3.92E-03
AVG MW	7.5228	MISSING	7.5228	7.5228	7.5228	5.9636	5.9636	29.2537	5.9636	20.7613

Apêndice 3

STREAM ID	P42	P43	P44	P45	P46	P47	P47A	P49	P5	P50
FROM	FB301	DA301	DIV41	DIV41	EA302	EA303	EA303	EA302	MEZC1	DA301
TO	DA301	DIV41	MEZC41	EA302	EA303	MEZC42	EA302	DA301	EA102	DA302
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	LIQUID	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID	VAPOR	LIQUID
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	3.9991	5.7153	0.1463	5.5689	3.8631	3.8527	1.04E-02	1.7162	3.0264	1.85E-35
CO	4.88E-03	4.93E-03	1.26E-04	4.81E-03	4.75E-03	4.75E-03	2.53E-07	5.46E-05	1.6683	0
H2	2.85E-02	2.86E-02	7.34E-04	2.79E-02	2.78E-02	2.78E-02	5.28E-07	1.20E-04	55.0706	0
CH4	0.5401	0.569	1.46E-02	0.5544	0.5257	0.5255	1.45E-04	2.89E-02	729.5943	0
N2	1.65E-04	1.70E-04	4.35E-06	1.66E-04	1.61E-04	1.61E-04	2.27E-08	4.56E-06	0.162	0
H2O	154.4822	2.78E-07	7.11E-09	2.71E-07	7.38E-10	1.59E-10	5.79E-10	2.70E-07	2.94E-02	154.4822
MEOH	611.1144	245.567	6.2889	239.278	1.9774	0.9304	1.047	238.3476	0.4438	603.895
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	29.562	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	6.064	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	7.71E-02	0.3645	9.34E-03	0.3552	6.97E-02	6.77E-02	1.93E-03	0.2875	3.64E-03	1.50E-19
ETER	2.55E-02	8.56E-02	2.19E-03	8.34E-02	2.37E-02	2.33E-02	3.80E-04	6.01E-02	2.64E-03	6.33E-24
ETOH	0.3153	6.35E-05	1.63E-06	6.18E-05	3.12E-07	1.07E-07	2.05E-07	6.17E-05	2.13E-04	0.3153
ACETONA	2.57E-02	0.5623	1.44E-02	0.5479	1.40E-02	1.08E-02	3.15E-03	0.537	1.80E-04	4.57E-04
TOTAL FLOW										
KMOL/HR	770.6131	252.8976	6.4767	246.4209	6.5063	5.4433	1.063	240.9776	825.6276	758.693
KG/HR	2.26E+04	8176.872	209.4096	7967.4623	246.0014	211.7356	34.2664	7755.7268	1.32E+04	2.21E+04
L/MIN	619.9994	6.14E+04	1573.5444	5.99E+04	1474.9917	1190.3007	0.9681	223.0277	1.85E+04	651.8868
STATE VARIABLES										
TEMP C	41.2312	81.0367	81.0367	81.0367	52.1659	40	40	52.1659	12.8458	89.5799
PRES KG/SQCM	5	2	2	2	2	2	2	2	17.5	2.3
VFRAC	0	1	1	1	1	1	0	0	1	0
LFRAC	1	0	0	0	0	0	1	1	0	1
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY										
CAL/MOL	-5.99E+04	-4.85E+04	-4.85E+04	-4.85E+04	-7.23E+04	-7.71E+04	-5.79E+04	-5.74E+04	-1.73E+04	-5.84E+04
CAL/GM	-2044.5694	-1499.1549	-1499.1549	-1499.1549	-1911.0941	-1981.0279	-1795.2977	-1784.589	-1085.4631	-2000.4489
CAL/SEC	-1.28E+07	-3.41E+06	-8.72E+04	-3.32E+06	-1.31E+05	-1.17E+05	-1.71E+04	-3.84E+06	-3.97E+06	-1.23E+07
ENTROPY										
CAL/MOL-K	-53.7692	-29.5003	-29.5003	-29.5003	-9.4929	-6.1764	-58.3508	-57.4215	-24.1394	-50.0201
CAL/GM-K	-1.8359	-0.9124	-0.9124	-0.9124	-0.251	-0.1587	-1.8101	-1.7841	-1.5131	-1.7135
DENSITY										
MOL/CC	2.07E-02	6.86E-05	6.86E-05	6.86E-05	7.35E-05	7.62E-05	1.83E-02	1.80E-02	7.45E-04	1.94E-02
GM/CC	0.6066	2.22E-03	2.22E-03	2.22E-03	2.78E-03	2.96E-03	0.5899	0.5795	1.19E-02	0.5662
AVG MW	29.2866	32.3327	32.3327	32.3327	37.8094	38.8979	32.2352	32.1844	15.9535	29.1917

Apêndice 3

STREAM ID	P50A	P51	P51A	P51B	P52	P52A	P53	P54	P55	P57
FROM	DA301	DA302	DA302	DA302	DA302	DA302	DA303	DIV42	DIV42	EA309
TO	---	---	---	---	DA303	---	DIV42	MEZC43	EA309	DA303
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	MIXED	LIQUID	VAPOR	LIQUID	LIQUID	MIXED	VAPOR	VAPOR	VAPOR	LIQUID
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	1.03E-34	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2O	862.8243	3.03E-02	6.37E-02	3.34E-02	154.4519	3922.2069	1.06E-03	5.01E-05	1.01E-03	1.01E-03
MEOH	3372.9146	599.6677	1259.3023	659.6345	4.2272	107.3487	75.2738	3.5604	71.7133	71.7133
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	8.38E-19	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETER	3.53E-23	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETOH	1.7612	5.74E-02	0.1205	6.31E-02	0.2579	6.5505	5.0372	0.2382	4.799	4.799
ACETONA	2.55E-03	4.57E-04	9.60E-04	5.03E-04	3.50E-28	8.89E-27	0	0	0	0
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	4237.5028	599.7559	1259.4875	659.7315	158.9371	4036.1061	80.3121	3.7987	76.5134	76.5134
KG/HR	1.24E+05	1.92E+04	4.04E+04	2.11E+04	2929.7844	7.44E+04	2644.0058	125.0614	2518.9443	2518.9453
L/MIN	8.69E+04	411.1181	5.65E+05	452.2299	54.3304	4.45E+05	1.97E+04	932.866	1.88E+04	75.6086
STATE VARIABLES										
TEMP C	89.8102	30	65.0567	30	103.9014	106.8721	82.8284	82.8284	82.8284	82.4535
PRES KG/SOCM	2.3	1.05	1.05	1.05	1.4	1.4	2	2	2	2
VFRAC	9.13E-02	0	1	0	0	0.2892	1	1	1	0
LFRAC	0.9086	1	0	1	1	0.7107	0	0	0	1
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-5.76E+04	-5.70E+04	-4.77E+04	-5.70E+04	-6.65E+04	-6.37E+04	-4.80E+04	-4.80E+04	-4.80E+04	-5.68E+04
CAL/GM	-1972.7964	-1780.321	-1487.7581	-1780.321	-3609.1292	-3456.9203	-1457.1515	-1457.1515	-1457.1515	-1725.6512
CAL/SEC	-6.78E+07	-9.50E+06	-1.67E+07	-1.05E+07	-2.94E+06	-7.14E+07	-1.07E+06	-5.06E+04	-1.02E+06	-1.21E+06
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	-47.7954	-57.4312	-29.7011	-57.4312	-34.9461	-27.5432	-31.3047	-31.3047	-31.3047	-56.1399
CAL/GM-K	-1.6372	-1.7923	-0.9269	-1.7923	-1.8957	-1.4941	-0.9508	-0.9508	-0.9508	-1.7052
DENSITY:										
MOL/CC	8.13E-04	2.43E-02	3.71E-05	2.43E-02	4.88E-02	1.51E-04	6.79E-05	6.79E-05	6.79E-05	1.69E-02
GM/CC	2.37E-02	0.779	1.19E-03	0.779	0.8987	2.79E-03	2.23E-03	2.23E-03	2.23E-03	0.5552
AVG MW	29.1917	32.0426	32.0426	32.0426	18.4336	18.4336	32.9216	32.9216	32.9216	32.9216

Apéndice 3

STREAM ID	P58	P58A	P59	P6	P60	P61	P62	P7	P8	P9
FROM	DA303	DA303	EA308	EA102	MEZC41	MEZC42	MEZC43	DC101	---	MEZC2
TO	EA308	---	---	DC101	MEZC42	MEZC43	EA304	MEZC2	MEZC2	E101
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	LIQUID	MIXED	LIQUID	VAPOR	MIXED	MIXED	MIXED	VAPOR	VAPOR	VAPOR
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	0	0	0	3.0264	0.884	4.7367	4.7367	3.0264	0	3.0264
CO	0	0	0	1.6683	5.39E-02	5.87E-02	5.87E-02	1.6683	0	1.6683
H2	0	0	0	55.0706	0.773	0.8008	0.8008	55.0706	0	55.0706
CH4	0	0	0	729.5943	1.0727	1.5983	1.5983	729.5943	0	729.5943
N2	0	0	0	0.162	7.46E-04	9.08E-04	9.08E-04	0.162	0	0.162
H2O	154.4518	1194.9856	154.4518	2.94E-02	1.16E-02	1.16E-02	1.17E-02	2.94E-02	1970.58	1970.6095
MEOH	0.6667	5.1586	0.6667	0.4438	6.4588	7.3892	10.9497	0.4438	0	0.4438
C2H6	0	0	0	29.562	0	0	0	29.562	0	29.562
C3H8	0	0	0	6.064	0	0	0	6.064	0	6.064
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	0	0	0	3.64E-03	1.07E-02	7.84E-02	7.84E-02	3.64E-03	0	3.64E-03
ETER	0	0	0	2.64E-03	3.14E-03	2.64E-02	2.64E-02	2.64E-03	0	2.64E-03
ETOH	1.98E-02	0.1528	1.98E-02	2.13E-04	8.16E-05	8.17E-05	0.2383	2.13E-04	0	2.13E-04
ACETONA	0	0	0	1.80E-04	1.45E-02	2.53E-02	2.53E-02	1.80E-04	0	1.80E-04
TOTAL FLOW										
KMOL/HR	155.1383	1200.2971	155.1383	825.6276	9.2832	14.7266	18.5254	825.6276	1970.58	2796.2077
KG/HR	2804.724	2.17E+04	2804.724	1.32E+04	267.6778	479.4135	604.4749	1.32E+04	3.55E+04	4.87E+04
L/MIN	52.524	1.97E+04	62.9708	4.48E+04	2217.4024	3435.6576	4376.1426	4.44E+04	1.01E+05	1.59E+05
STATE VARIABLES										
TEMP C	123.3033	123.5517	50	395.5079	72.1159	63.8029	68.7093	390	430	412.9803
PRES KG/SQCM	2.3	2.3	2.3	17.5	2	2	2	17.5	19	16.9
VFRAC	0	6.70E-02	0	1	0.9981	0.9955	0.9952	1	1	1
LFRAC	1	0.9329	1	0	1.90E-03	4.42E-03	3.75E-03	0	0	0
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY										
CAL/MOL	-6.64E+04	-6.58E+04	-6.85E+04	-1.31E+04	-4.44E+04	-5.65E+04	-5.47E+04	-1.31E+04	-5.45E+04	-4.23E+04
CAL/GM	-3674.4867	-3639.3643	-3789.3593	-818.1785	-1540.1552	-1734.8691	-1677.4113	-822.828	-3024.9276	-2428.988
CAL/SEC	-2.86E+06	-2.19E+07	-2.95E+06	-2.99E+06	-1.15E+05	-2.31E+05	-2.82E+05	-3.01E+06	-2.98E+07	-3.28E+07
ENTROPY										
CAL/MOL-K	-33.7362	-32.1353	-39.2536	-14.9532	-21.6993	-15.4915	-18.4609	-15.0646	-9.3112	-9.625
CAL/GM-K	-1.866	-1.7775	-2.1712	-0.9373	-0.7525	-0.4758	-0.5657	-0.9442	-0.5168	-0.5529
DENSITY										
MOL/CC	4.92E-02	1.01E-03	4.11E-02	3.07E-04	6.98E-05	7.14E-05	7.06E-05	3.10E-04	3.26E-04	2.94E-04
GM/CC	0.8899	1.83E-02	0.7423	4.90E-03	2.01E-03	2.33E-03	2.30E-03	4.94E-03	5.87E-03	5.11E-03
AVG MW	18.0788	18.0788	18.0788	15.9535	28.8344	32.5541	32.6295	15.9535	18.015	17.4063

Apéndice 3

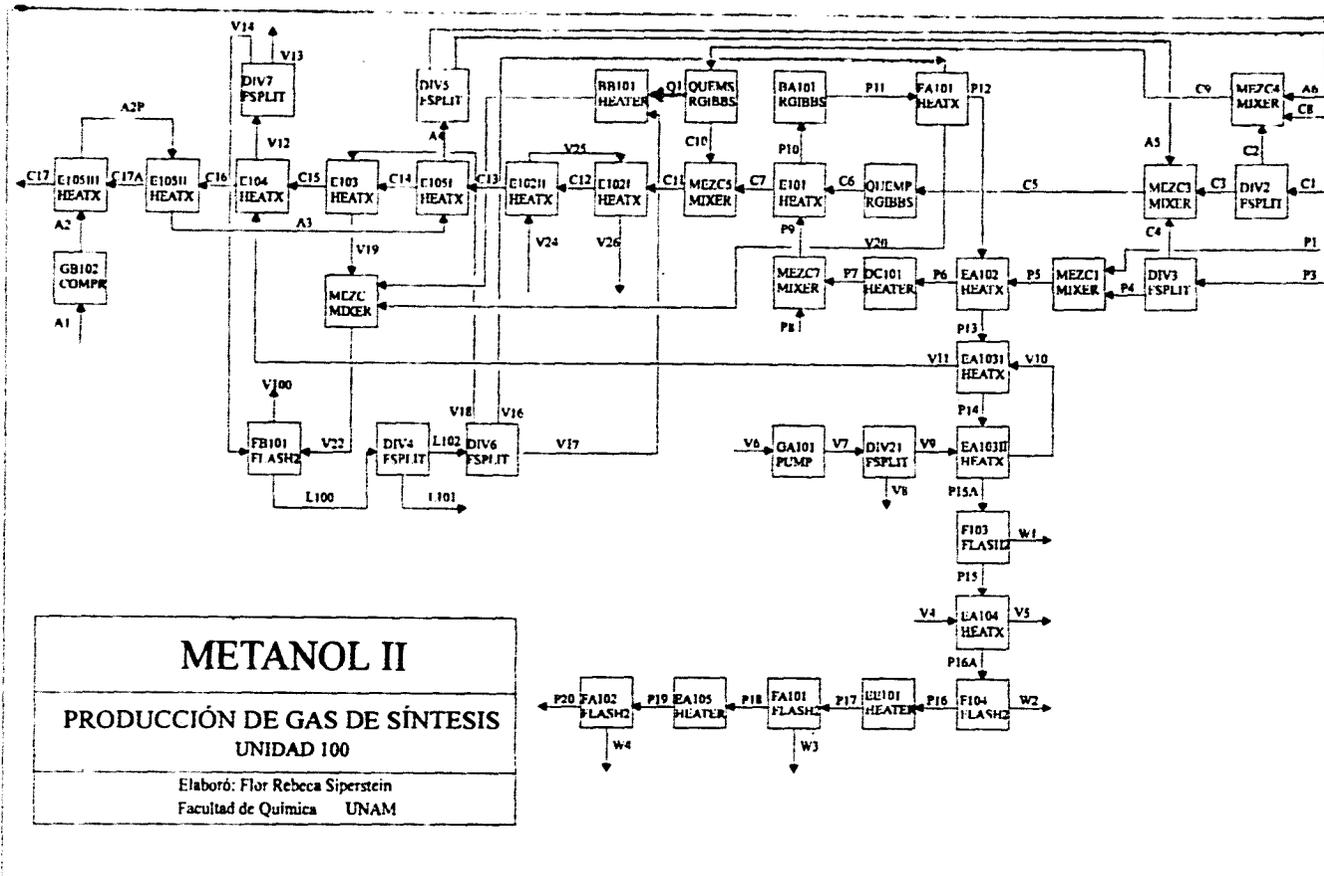
STREAM ID	V10	V100	V11	V12	V13	V14	V16	V17	V18	V19
FROM	EA103II	FB101	EA103I	E104	DIV7	DIV7	DIV6	DIV6	DIV6	E103
TO	EA103I	---	E104	DIV7	---	FB101	EA101	BB101	E103	MEZC7
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	LIQUID	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	MIXED
COMPONENTS: KMOL/HR										
CO2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2O	4853.028	3180.2277	4853.028	4853.028	1290.9054	3562.1225	2699.7539	1436.7029	573.5413	573.5413
MEOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETER	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL FLOW										
KMOL/HR	4853.028	3180.2277	4853.028	4853.028	1290.9054	3562.1225	2699.7539	1436.7029	573.5413	573.5413
KG/HR	8.74E+04	5.73E+04	8.74E+04	8.74E+04	2.33E+04	6.42E+04	4.86E+04	2.59E+04	1.03E+04	1.03E+04
L/MIN	2082.4141	5.03E+04	2276.5615	2419.1998	643.5071	1775.6926	1419.1507	755.205	301.4828	6717.3886
STATE VARIABLES:										
TEMP C	119.4214	248.1771	189.8707	224.9647	224.9647	224.9647	248.1771	248.1771	248.1771	248.1771
PRES KG/SQCM	58.8	40.1	58.8	58.8	58.8	58.8	40.1	40.1	40.1	40.1
VFRAC	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0.7319
LFRAC	1	0	1	1	1	1	1	1	1	0.268
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-6.71E+04	-5.64E+04	-6.56E+04	-6.47E+04	-6.47E+04	-6.47E+04	-6.42E+04	-6.42E+04	-6.42E+04	-5.85E+04
CAL/GM	-3723.8523	-3131.6079	-3638.7108	-3593.348	-3593.348	-3593.348	-3561.1903	-3561.1903	-3561.1903	-3246.7767
CAL/SEC	-9.04E+07	-4.98E+07	-8.84E+07	-8.73E+07	-2.32E+07	-6.41E+07	-4.81E+07	-2.56E+07	-1.02E+07	-9.32E+06
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	-35.1833	-13.885	-31.5933	-29.8924	-29.8924	-29.8924	-28.7296	-28.7296	-28.7296	-17.8647
CAL/GM-K	-1.953	-0.7707	-1.7537	-1.6593	-1.6593	-1.6593	-1.5947	-1.5947	-1.5947	-0.9916
DENSITY:										
MOL/CC	3.88E-02	1.03E-03	3.55E-02	3.34E-02	3.34E-02	3.34E-02	3.17E-02	3.17E-02	3.17E-02	1.42E-03
GM/CC	0.6997	1.90E-02	0.64	0.6023	0.6023	0.6023	0.5712	0.5712	0.5712	2.56E-02
AVG MW	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015

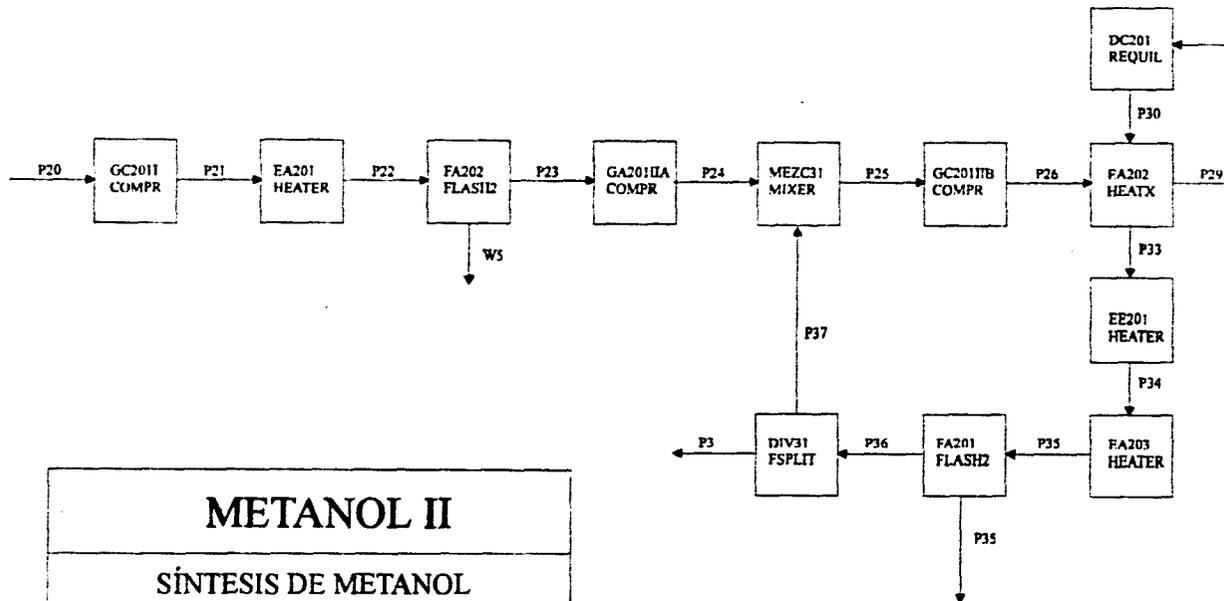
Apéndice 3

STREAM ID	V20	V21	V22	V24	V25	V26	V4	V5	V6	V7
FROM	EA101	BB101	MEZC7	---	E102II	E102I	---	EA104	---	GA101
TO	MEZC7	MEZC7	FB101	E102II	E102I	---	EA104	---	GA101	DIV21
SUBSTREAM MIXED										
PHASE	MIXED	MIXED	MIXED	VAPOR	VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CO	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2O	2699.7939	1436.7029	4710.0383	4751.4848	4751.4848	4751.4848	2126.0061	2126.0061	4961.5875	4961.5875
MEOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETER	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETOH	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	2699.7939	1436.7029	4710.0383	4751.4848	4751.4848	4751.4848	2126.0061	2126.0061	4961.5875	4961.5875
KG/HR	4.86E+04	2.59E+04	8.49E+04	8.56E+04	8.56E+04	8.56E+04	3.83E+04	3.83E+04	8.94E+04	8.94E+04
L/MIN	3.16E+04	1.68E+04	5.52E+04	7.51E+04	1.11E+05	1.40E+05	852.9806	881.4257	2101.9395	2100.7358
STATE VARIABLES										
TEMP C	248.1771	248.1771	248.1771	250	390.5591	539.7761	42	82.1154	105	106.2343
PRES KG/SQCM	40.1	40.1	40.1	40.3	38	38	2.8	2.8	1.24	58.8
VFRAC	0.7318	0.7318	0.7318	1	1	1	0	0	0	0
LFRAC	0.2682	0.2681	0.2681	0	0	0	1	1	1	1
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-5.85E+04	-5.85E+04	-5.85E+04	-5.64E+04	-5.50E+04	-5.36E+04	-6.87E+04	-6.79E+04	-6.74E+04	-6.74E+04
CAL/GM	-3246.8217	-3246.8177	-3246.815	-3130.704	-3052.5073	-2972.5435	-3814.9231	-3768.5451	-3741.9217	-3739.2891
CAL/SEC	-4.39E+07	-2.33E+07	-7.65E+07	-7.44E+07	-7.26E+07	-7.07E+07	-4.06E+07	-4.01E+07	-9.29E+07	-9.28E+07
ENTROPY										
CAL/MOL-K	-17.8663	-17.8662	-17.8661	-13.8623	-11.3671	-9.4097	-39.7447	-37.2494	-35.9386	-35.9039
CAL/GM-K	-0.9917	-0.9917	-0.9917	-0.7694	-0.6309	-0.5223	-2.2062	-2.0676	-1.9949	-1.993
DENSITY										
MOL/CC	1.42E-03	1.42E-03	1.42E-03	1.05E-03	7.14E-04	5.65E-04	4.15E-02	4.02E-02	3.93E-02	3.94E-02
GM/CC	2.56E-02	2.56E-02	2.56E-02	1.90E-02	1.29E-02	1.02E-02	0.7483	0.7242	0.7087	0.7091
AVG MW	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015	18.015

Apéndice 3

STREAM ID	V8	V9	W1	W2	W3	W4	W5			
FROM:	DIV21	DIV21	F103	F104	FA101	FA102	FA202			
TO:	---	EA103II	---	---	---	---	---			
SUBSTREAM MIXED										
PHASE:	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID			
COMPONENTS KMOL/HR										
CO2	0	0	1.15E-02	6.72E-03	1.51E-02	4.85E-04	2.73E-04			
CO	0	0	8.11E-04	4.27E-04	2.46E-04	4.67E-06	2.68E-06			
H2	0	0	4.70E-03	2.52E-03	1.88E-03	3.93E-05	2.28E-05			
CH4	0	0	1.30E-03	7.09E-04	6.10E-04	1.33E-05	7.57E-06			
N2	0	0	3.27E-07	1.72E-07	9.95E-08	1.88E-09	1.08E-09			
H2O	108.5595	4853.028	269.8642	162.2961	634.3575	25.9908	7.0828			
MEOH	0	0	0	0	0	0	0			
C2H6	0	0	0	0	0	0	0			
C3H8	0	0	0	0	0	0	0			
O2	0	0	0	0	0	0	0			
CH2O	0	0	0	0	0	0	0			
ETER	0	0	0	0	0	0	0			
ETOH	0	0	0	0	0	0	0			
ACETONA	0	0	0	0	0	0	0			
TOTAL FLOW:										
KMOL/HR	108.5595	4853.028	269.8826	162.3065	634.3754	25.9913	7.0831			
KG/HR	1955.7	8.74E+04	4862.166	2924.0891	1.14E+04	468.2468	127.609			
L/MIN	45.9641	2054.7717	117.7403	70.3347	258.0596	10.4108	2.8364			
STATE VARIABLES:										
TEMP C	106.2343	106.2343	133	127	60	40	40			
PRES KG/SQCM	58.8	58.8	13.6	13.4	13.3	13.2	28.1			
VFRAC	0	0	0	0	0	0	0			
LFRAC	1	1	1	1	1	1	1			
SFRAC	0	0	0	0	0	0	0			
ENTHALPY:										
CAL/MOL	-6.74E+04	-6.74E+04	-6.68E+04	-6.69E+04	-6.83E+04	-6.88E+04	-6.88E+04			
CAL/GM	-3739.2891	-3739.2891	-3708.4529	-3715.5852	-3793.79	-3816.8995	-3816.4535			
CAL/SEC	-2.03E+06	-9.08E+07	-5.01E+06	-3.02E+06	-1.20E+07	-4.96E+05	-1.35E+05			
ENTROPY:										
CAL/MOL-K	-35.9039	-35.9039	-34.4262	-34.7443	-38.5929	-39.8804	-39.8855			
CAL/GM-K	-1.993	-1.993	-1.9108	-1.9285	-2.1422	-2.2136	-2.2139			
DENSITY:										
MOL/CC	3.94E-02	3.94E-02	3.82E-02	3.85E-02	4.10E-02	4.16E-02	4.16E-02			
GM/CC	0.7091	0.7091	0.6882	0.6929	0.7381	0.7496	0.7496			
AVG MW	18.015	18.015	18.0158	18.0158	18.0155	18.0154	18.0159			

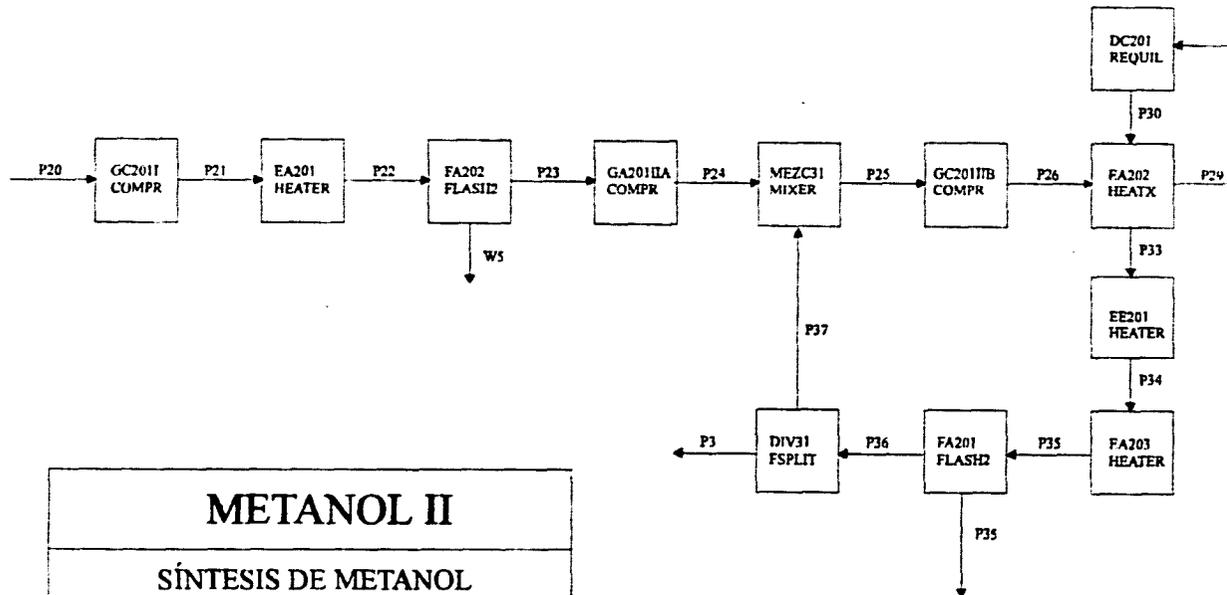




METANOL II

SÍNTESIS DE METANOL UNIDAD 200

Elaboró: Fior Rebeca Siperstein
Facultad de Química UNAM



METANOL II

SÍNTESIS DE METANOL UNIDAD 200

Elaboró: Flor Rebeca Siperstein
Facultad de Química UNAM

