

00579

2^{ej}



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

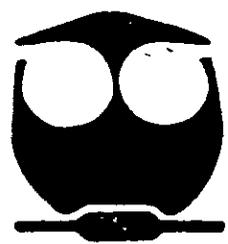
FACULTAD DE QUIMICA

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSTGRADO

MODELAMIENTO DE LAS PLANTAS DE MTBE
Y TAME DE LA REFINERIA DE SALINA CRUZ,
OAXACA.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRA EN INGENIERIA QUIMICA
(P R O C E S O S)
P R E S E N T A :
ING. MARTHA GARCIA ESPITIA



MEXICO, D. F.

1998

264493

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA
DIRECCIÓN

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ

Director General de la Administración Escolar
Presente

AT'N: Lic. Antonio Díaz García

Jefe de la Unidad de Administración del Posgrado.

Me es grato informarle que la alumna **ING. MARTHA GARCIA ESPITIA** presentará próximamente su examen para obtener el grado de Maestría en Ingeniería Química (Procesos) ante el siguiente jurado:

Presidente:	Dr. Rafael Herrera Nájera
Primer Vocal	Dr. Julio Landgrave Romero
Secretario:	Dr. Javier Audry Sánchez
Primer Suplente:	Dr. Ricardo Rivero Rodríguez
Segundo Suplente	Dr. Reynaldo Sandoval González

Sin otro particular de momento, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Ciudad Universitaria, D. F., 26 de marzo de 1998.

El Director

Dr. Enrique R. Bazúa Rueda

C c.p. Integrantes del Jurado
C c.p. Coordinador de Área
C c.p. Departamento de Control Escolar
C.c.p. Interesado
*ggm.

MODELAMIENTO DE LAS PLANTAS DE MTBE Y TAME DE LA REFINERÍA DE SALINA CRUZ, OAXACA.

RESUMEN

En esta tesis se presenta la simulación de las plantas de MTBE (Metil terbutil éter) y de TAME (Teramil metil éter), de la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca. Se ubicaron los principales cuellos de botella y las variables de operación manipulables mediante los análisis de sensibilidad realizados a los equipos principales de las plantas, mediante dichos análisis se plantearon una serie de propuestas para la manipulación de las variables de operación de las plantas que permiten obtener mayor cantidad y calidad de los productos.

El equipo que constituye el principal cuello de botella de la planta de MTBE es la columna catalítica 02-E-102, para tratar de disminuir su efecto en la producción y en la calidad de los productos se proponen cambios en los parámetros de operación como son: ubicar la alimentación de metanol en la etapa 17 (debajo de la zona empacada), que la relación de reflujo este en el intervalo de 5 a 7; y trabajar la columna con un flujo de metanol de 183 a 200 kg/hr

En la planta de TAME los equipos que constituyen los principales cuellos de botella son la columna fraccionadora (02-E-202) y los reactores: principal y de terminado (02-D-201 y 02-D-202), para disminuir el efecto de estos cuellos de botella en la producción de TAME, se propone que la temperatura de operación de los reactores no exceda 80°C, que la relación de reflujo de la columna fraccionadora este en un intervalo de 0.4 a 0.5, y que el calor suministrado al rehervidor de la columna no exceda a 3.5 MMkcal/hr.

La conclusión más importante a la que se llega en el presente trabajo es que México cuenta con plantas de innovación tecnológica, que permiten obtener oxicompuestos como el MTBE y el TAME. También, se cuenta con una herramienta fundamental "los simuladores de procesos", como el simulador ASPEN PLUS, con los cuales se pueden determinar las condiciones óptimas de operación de una planta y disminuir el efecto que tienen los cuellos de botella en la producción y en la calidad de los productos

Agradecimientos.

Al convenio UNAM- PEMEX-Refinación-IMP:

Gracias, por el apoyo económico brindado para la realización de esta Tesis

A la Universidad Nacional Autónoma de México:

Por permitirme formar parte de ella

A los Profesores de la Facultad de Química:

Por brindarme sus conocimientos

Al Ing. Cefestino Montiel Maldonado:

Por su invaluable ayuda.

Al Honorable Jurado:

Por sus valiosas aportaciones a este trabajo

Dedicatorias.

A mis padres Esperanza y Guillermo:

A quienes debo todo lo que soy. Gracias, por el apoyo que me han brindado a lo largo de mi vida.

A mis hermanas y hermanos.

Gracias por su apoyo.

A mis sobrinos Uriel e Iván.

Por brindarme motivación y ánimo.

A mis amigos:

Marcela, Marco Antonio, Nicolás, y a todos aquellos que convivieron conmigo.

ÍNDICE.

ÍNDICE	<i>i</i>
INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO I. MTBE	4
<i>Generalidades</i>	5
<i>Esquema de las reacciones involucradas en la síntesis de MTBE</i>	10
<i>Propiedades físicas del MTBE</i>	12
<i>Cinética de formación del MTBE</i>	12
CAPÍTULO II. TAME	15
<i>Generalidades</i>	16
<i>Reacciones involucradas en la síntesis del TAME</i>	22
<i>Propiedades físicas del TAME</i>	24
<i>Cinética de formación del TAME</i>	24
CAPÍTULO III. Descripción de los Procesos	26
<i>Descripción de los procesos de las plantas de MTBE y de TAME</i>	27
Planta de MTBE.....	28
Planta de TAME.....	33
<i>Parametros de Operación</i>	38
Planta de MTBE	38
Planta de TAME	41
<i>Condiciones básicas para la formación de MTBE y de TAME</i>	42
<i>Estructura del catalizador</i>	42
CAPÍTULO IV. Ecuaciones del Modelado	44
<i>Modelo termodinámico PRSK</i>	45
<i>Modelos de balance de materia y energía de los equipos</i>	47
Columnas de extracción (LAVADO).....	47
Las columnas de destilación, modelo RADFRAC.....	48
Los reactores.....	50
<i>Columnas de destilación, modelo riguroso "RATEFRAC"</i>	51

CAPÍTULO V. Simulación de las Plantas de MTBE y de TAME	56
<i>Simulación de procesos</i>	57
Tipos de simulación	60
<i>Secuencia de la simulación de las plantas de MTBE y de TAME de la refinería de Salina Cruz, Oaxaca</i>	66
<i>Especificaciones de los equipos</i>	72
<i>Resultados de la simulación</i>	73
Planta de MTBE.....	73
Planta de TAME.....	86
CAPÍTULO VI. Análisis de Sensibilidad	101
<i>Análisis de Sensibilidad en las plantas de MTBE y de TAME</i>	102
<i>Resultados del Análisis de Sensibilidad en la planta de MTBE</i>	101
<i>Resultados del Análisis de Sensibilidad en la planta de TAME</i>	110
CAPÍTULO VII. Conclusiones y Recomendaciones	120
<i>Conclusiones</i>	121
<i>Recomendaciones</i>	122
BIBLIOGRAFÍA	123
APÉNDICES	
A Subrutina para calcular la velocidad de reacción en la Columna Catalítica.....	128
B Balance de Materia y Energía.....	131
De la planta de MTBE.....	131
De la planta de TAME	135
C. Ecuaciones de Estado	149

INTRODUCCIÓN.

En la actualidad uno de los problemas graves que tienen las grandes ciudades es la contaminación del aire, que en gran parte es provocada por la combustión de la gasolina en los motores de los automóviles lo que a generado la elaboración de programas de protección ambiental.

Con estos programas se establecen normas en cuanto a la composición de las emisiones de los automotores y de las gasolinas, las cuales implican la reducción de compuestos aromáticos y de butano; e incrementar el índice de octano. Por lo que se hizo necesario buscar nuevas formas de incrementar la calidad de las gasolinas, principalmente el índice de octano.

Para incrementar el índice de octano se utilizan compuestos que contienen oxígeno como son alcoholes y éteres. El más importante de los éteres es el **Metil Terbutil Éter (MTBE)**, pero su demanda se a incrementado hasta el grado de exceder la capacidad de las plantas, por lo que ha sido necesario utilizar otros éteres terciarios como el **Teramil Metil Éter (TAME)** y el **Etil Terbutil Éter (ETBE)**.

El **Metil Terbutil Éter (MTBE)** es un compuesto que se obtiene, en su mayoría, al hacer reaccionar al *isobutileno* con *metanol*. A nivel industrial para la reacción se utilizan **columnas de destilación catalíticas**.

El **Teramil Metil Éter (TAME)** se produce por la reacción en fase líquida de los *isoamilenos*: *2-metil-1-buteno (2MB1)* y *2-metil-2-buteno (2MB2)*; con metanol.

El objetivo del presente trabajo es modelar las plantas de MTBE y de TAME de la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca para ubicar los principales cuellos de botella y proponer mejoras en las variables de operación de ambas plantas, para ello se empleó el simulador de procesos ASPEN PLUS versión 9.3, datos de diseño y de operación de ambas plantas.

Los principales equipos que constituyen a la planta de MTBE son: columnas de lavado, modeladas mediante el equilibrio Líquido-Líquido; un reactor tubular, modelado como reactor de flujo tapón; y una columna de destilación catalítica.

Los principales equipos que constituyen a la planta de TAME son: columnas de lavado, su función es semejante a las columnas de lavado de la planta de MTBE, columnas de fraccionamiento, y tres reactores tubulares, modelados como reactores de flujo tapón

Para lograr establecer los principales cuellos de botella y las variables de operación manipulables se realizaron Análisis de Sensibilidad en los equipos principales de las plantas de MTBE y de TAME, considerando como equipos clave a los reactores y a las columnas de destilación por ser representativos de las plantas. Mediante los análisis de sensibilidad se plantearon una serie de propuestas para la manipulación de las variables de operación de las plantas para obtener mayor cantidad y calidad de los productos

Se consideraron ambas plantas unidas mediante la Columna Recuperadora de Metanol (02-E-204) ubicada en la planta de TAME, para obtener los Balances de Materia y Energía Globales.

En el *Capítulo I "MTBE"*, se presenta una breve semblanza de los estudios realizados para la elaboración de MTBE, las reacciones principales de el proceso de producción, así como las ecuaciones cinéticas encontradas en la literatura para modelar la reacción de formación de MTBE en el reactor principal 02-D-101 y en la columna catalítica 02-E-102.

En el *Capítulo II "TAME"* se presenta una breve semblanza de los estudios realizados para la elaboración de TAME, las reacciones principales de el proceso de producción, así como la ecuación cinética encontrada en la literatura para modelar la reacción de formación de TAME en los reactores 02-D-201, 02-D-202 y 02-D-203

En el *Capítulo III "DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS"*, se describen ampliamente los diagramas de flujo de los procesos de producción de MTBE y de TAME, existentes en la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca

En el *Capítulo IV "ECUACIONES DEL MODELADO"*, se plantean los modelos Termodinámicos, así como las ecuaciones de Balance de Materia y Energía para los principales equipos, como son: la Columna Catalítica 02-E-102, las Columnas de Lavado y los diferentes Reactores.

En el *Capítulo V "SIMULACIÓN DE LAS PLANTAS DE MTBE Y DE TAME"*, se reportan los diferentes perfiles de Presión, Temperatura y Composición de los principales equipos de las plantas y el análisis de diferentes perfiles. El Balance de Materia y Energía de las plantas, simuladas en forma acoplada, se reporta en el Apéndice A.

En el *Capítulo VI "ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE LAS PLANTAS DE MTBE Y DE TAME"*, están recopilados los perfiles, principalmente, de Composición de los productos MTBE y TAME que se obtienen al hacer las diferentes variaciones en las condiciones de operación de las plantas.

Finalmente en el *Capítulo VII "CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES"*, se presentan las conclusiones a las que se llega en éste trabajo así como algunas recomendaciones, en las condiciones de operación de las plantas, que pueden disminuir los cuellos de botella y lograr obtener mayor calidad y cantidad de MTBE y de TAME.

CAPÍTULO I

MTBE.

Las mezclas de las gasolinas han estimulado la producción de éteres como el Metil Terbutil Éter (MTBE) y el Teramil Metil Éter (TAME) entre otros, que al mezclarse con la gasolina favorecen el número de octano y disminuyen las emisiones de monóxido de carbono.

El proceso de obtención de MTBE es relativamente nuevo, se utilizan columnas de destilación catalíticas, donde se lleva a cabo la reacción química y la destilación simultáneamente en una columna de empaque y/o de platos. Esta combinación ofrece grandes ventajas sobre el reactor de lecho empacado y subsecuentemente sobre los sistemas de destilación, incluyendo: el uso del calor de reacción para la separación del producto; control, relativamente fácil, del perfil de temperatura en la sección catalítica; por ejemplo, no se requiere ningún medio de enfriamiento y/o calentamiento, bajos costos de operación debido a la obtención de altas conversiones y bajos costos de capital debido a la disminución de equipo.

Los estudios de simulación pueden ayudar a determinar la influencia de la localización de la alimentación, la relación de reflujo, y la cantidad de catalizador sobre el cual se lleva a cabo la conversión y la pureza del producto, así como la estructura óptima de la columna de destilación catalítica.

GENERALIDADES.

• DESTILACIÓN CATALÍTICA.

La destilación catalítica se aplica en algunos procesos químicos donde las reacciones químicas están descritas como reacciones limitadas por el equilibrio. Un ejemplo de esta manufactura es la producción de Metil Terbutil Éter (MTBE) en la refinería Charter International Oil Co's de Houston, Texas. El proceso CR&L/Neochem consiste de una columna de destilación para la producción de MTBE, una columna de lavado con agua y una columna de destilación convencional para la recuperación de metanol en el proceso. El proceso se reporta con uso eficiente de energía, ya que el calor de reacción se utiliza directamente para el proceso de destilación.¹

Por otra parte, un proceso de manufactura convencional para el MTBE se encuentra en dos plantas industriales diseñadas por Snamprogetti, con una corriente de alimentación rica en Butadieno, estas fueron construidas en Austria y en Leninvaros, Hungría. La unidad de producción de MTBE de alta pureza construida en Hungría básicamente consiste de dos reactores, tres columnas de destilación, una columna de extracción con agua, y una unidad de lavado.²

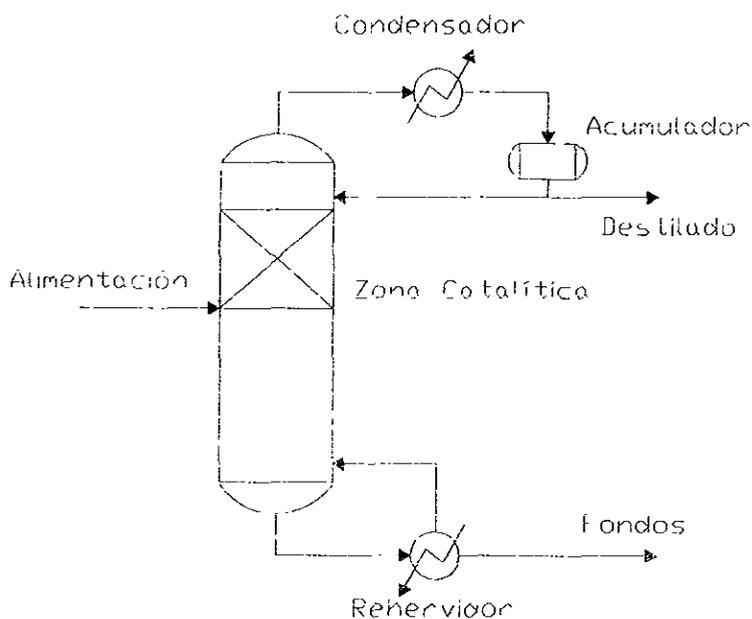
• ESTUDIOS EXPERIMENTALES.

Los estudios experimentales que avalan la destilación catalítica y/o reactiva para diferentes sistemas han sido desarrollados por varios autores. **Agreda et al.** (1990) establecen los conceptos básicos de la destilación reactiva a contracorriente (i. e. destilación simultánea con reacción, y extracción) usada para elaborar acetato de metilo de alta pureza.

Smith (1980) patentó el proceso de obtención de MTBE de alta pureza empleando una mezcla de hidrocarburos de C_4 y metanol como alimentación. Empleó una columna de destilación como reactor, la cual tiene como empaque catalizador, esta realiza ambas funciones catalizar y destilar. El producto de domos de la columna

tiene el bajo punto de ebullición de los hidrocarburos que no reaccionaron y el producto de fondo un alto punto de ebullición del éter que se formó como producto. El reactor de la planta piloto es de solamente 3 pulgadas de diámetro, y los datos se emplean para predecir la operación de plantas comerciales de mayor tamaño.

La Figura (1) muestra un esquema de la columna de destilación catalítica reportada en la patente de Smith (1980).



**Figura 1 Chem. Research & Licensing Co.
Columna Catalítica de la patente de Smith (1980).**

Saito et al. proponen un nuevo método de separación de isómeros, meta- y para-xileno; su técnica consiste en que solamente el meta-xileno puede ser ter-butilado en presencia de cloruro de aluminio, y formar el compuesto ter-butil meta-xileno, con punto de ebullición mayor. Su experimento se realizó en un laboratorio con una columna hecha con tubo de vidrio de 27 mm de diámetro con un total de 10 platos

perforados, con un condensador y un rehervidor. Asumen que la reacción se lleva a cabo en todos los platos de la columna excepto en el condensador y en el rehervidor, ya que estos no contienen catalizador. La destilación del benceno que tiene el punto de ebullición menor, rompe el equilibrio, desplazando la reacción hacia los productos; el para-xileno se separa fácilmente como producto de domo y el ter-butil meta-xileno como producto de fondo. Para recuperar el meta-xileno adicionaron benceno en presencia del mismo catalizador en una segunda columna de destilación. Una representación esquemática de la columna de laboratorio se muestra en la Figura (2).

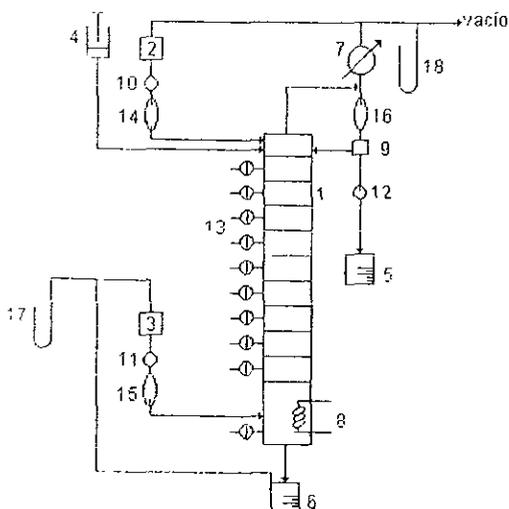
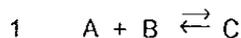


Figura 2. Diagrama esquemático del aparato experimental utilizado por Saito et al.

(1 Columna, 2. Tanque de almacenamiento para el agente de alquilación, 3 Tanque de almacenamiento de meta- y para-xileno, 4 Microbomba para el catalizador, 5,6 Recipientes calibrados, 7 Condensador, 8. Calentador, 9. Distribuidor, 10-12 Válvulas, 13 Toma de muestra, 14-16. Medidor de destilado, 17,18 Manómetros)

En resumen, los sistemas propuestos para la destilación reactiva son reacciones limitadas por el equilibrio. Estas son:



- MTBE (Smith, 1980) : isobutileno + metanol \rightleftharpoons MTBE
- Cumeno (Shoemaker et al, 1987) : benceno + propileno \rightleftharpoons cumeno
- Poliamidas (Grosser et al, 1987) ácido adípico + hexametilen diamina \rightleftharpoons sal



- Separación de meta- y para-xileno (Saito et al., 1971):
 Meta-xileno + Di-ter-butil benceno \rightleftharpoons Ter-butil meta-xileno + Ter-butil benceno
 Meta-xileno + Ter-butil benceno \rightleftharpoons Ter-butil meta-xileno + Benceno
- Acetato de metilo (Agreda et. al , 1990) :
 Ácido acético + Metanol \rightleftharpoons Acetato de metilo + Agua
- Acetato de Etilo (Komatsu et. al., 1977) .
 Ácido acético + Etanol \rightleftharpoons Acetato de etilo + Agua

• FORMULACIÓN DEL SISTEMA.

Los datos de cinética para la síntesis de MTBE fueron tomados de diferentes artículos Uno de ellos fue el estudio experimental de **Rehfinger et al.** (1990), en el cual incorporan la no-idealidad para el sistema en el modelo cinético de la reacción principal:



No se encontraron datos o expresiones de velocidad de reacción en la literatura para la principal reacción secundaria: la dimerización del isobutileno



Por lo que, se asume que la concentración de isobutileno esta en equilibrio, es decir, se ignoró la reacción de dimerización, en la simulación de la planta de MTBE

La columna catalítica tiene dos corrientes de alimentación: una para el metanol, sobre la sección empacada; y otra para la mezcla de hidrocarburos, por debajo de la sección empacada. La zona catalítica esta empacada con catalizador y tienen dos funciones. servir como reactor, y separar los productos mediante la destilación, como se muestra en la Figura (3).

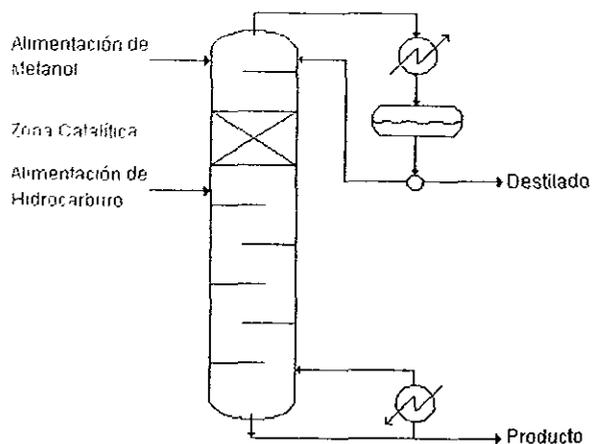
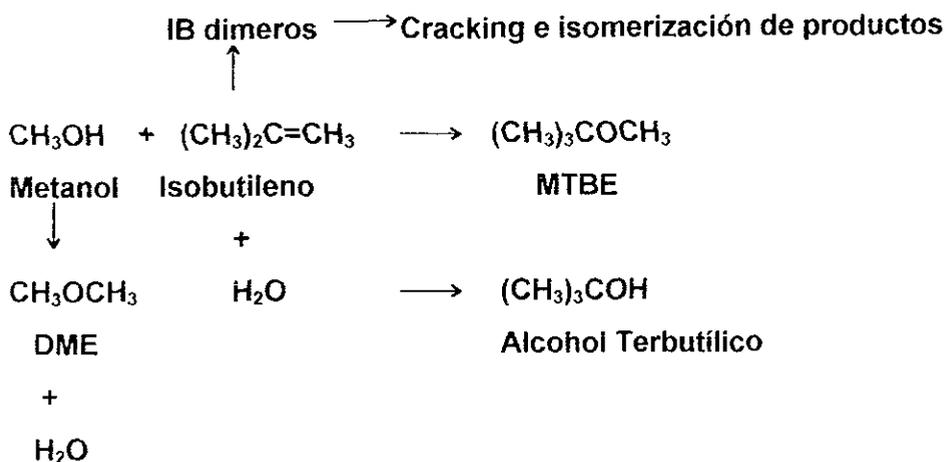


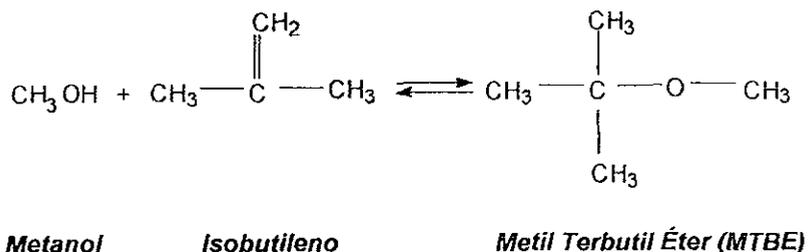
Figura 3 Configuración de la Columna Catalítica para el proceso de Producción de MTBE.

ESQUEMA DE LAS REACCIONES INVOLUCRADAS EN LA SÍNTESIS DE MTBE.

El MTBE se produce por una adición simple del metanol al isobutileno proveniente de la corriente de C₄'s. La reacción es catalizada por una resina de intercambio iónico. El esquema de las reacciones involucradas en el proceso de MTBE es el siguiente

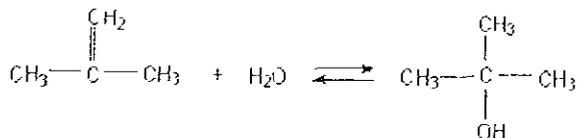


• REACCIÓN PRINCIPAL:



• REACCIONES SECUNDARIAS:

a) *Hidratación de Isobutileno.*



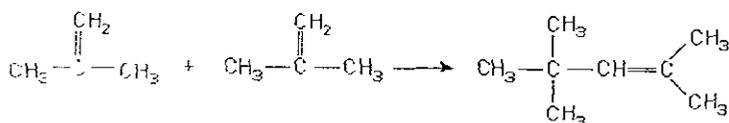
Isobutileno

Agua

Alcohol Terbutílico (TBA)

La formación de TBA es función del contenido de agua presente en la alimentación: pequeñas cantidades de TBA que se produzcan no afectan la calidad del MTBE.

b) *Dimerización del Isobutileno.*



Isobutileno

Isobutileno

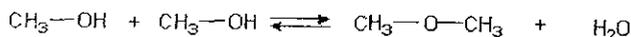
Dimero

Dimero: 2,4,4-Trimetil-1-penteno

ó 2,4,4-Trimetil-2-penteno

Las condiciones a las cuales se lleva a cabo la reacción (temperatura, espacio velocidad y relación metanol/isobutileno) no favorecen la formación de los dímeros

c) *Deshidratación de metanol:*



Metanol

Metanol

Dimetil-Éter (DME) Agua

La formación del dimetil-éter depende de las condiciones de reacción; debido a que la reacción se lleva a cabo a bajas temperaturas, no se favorece la formación del DME.

PROPIEDADES FÍSICAS DEL MTBE.

Las propiedades físico-químicas del MTBE que son de interés para este trabajo son las siguientes

<i>Propiedad</i>	<i>Unidades</i>	<i>Valor</i>
Peso Molecular	<i>g/mol</i>	88.15
Punto de Ebullición	<i>°K</i>	328.15
Densidad a 20°C	<i>kg/m³</i>	740.50
Viscosidad	<i>cp</i>	0.2676
MON/RON		81/108

CINÉTICA DE FORMACIÓN DEL MTBE.

La reacción de formación de MTBE es reversible y exotérmica, es decir, el equilibrio químico favorece la formación de MTBE a bajas temperaturas. La cinética de formación que se empleó en la simulación del reactor principal 02-D-101, y que considera que el metanol se encuentra en exceso³, es la siguiente ecuación:

$$r_{MTBE} = k_+ C_{IB} - k_- C_{MTBE} \quad (1)$$

donde:

$$k_+ = 2.5152 \cdot 10^7 \exp\left(-\frac{6844}{T}\right)$$

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

T = es la temperatura del medio en [K]

r = es la rapidez de reacción en [kmol/(kg de catalizador) * hr].

El rango de validez de esta cinética (Ecuación 1) es de 60 a 80 °C, esto satisface las condiciones de diseño del reactor, ya que la temperatura de la corriente que se alimenta al reactor es de 60°C y la temperatura a la salida del reactor es de 75°C.

Otra ecuación de la cinética de formación del MTBE, que se obtuvo de la literatura⁴, toma en cuenta la cantidad de metanol presente en la reacción; esta expresión se utilizó en la simulación de la columna catalítica para establecer la influencia que tiene el metanol en la producción de MTBE. La ecuación cinética es la siguiente.

$$r_{\text{MTBE}} = q * k_r \left[\frac{a_{\text{IB}}}{a_{\text{MeOH}}} - \frac{a_{\text{MTBE}}}{K_d a_{\text{MeOH}}^2} \right] \quad (2)$$

donde.

$$k_r = 367 * 10^{12} \exp\left(\frac{-11110}{T}\right)$$

$$K_d = 284 * \exp[f(T)]$$

$$f(T) = c_1 \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right] + c_2 \log\left(\frac{T}{T_0}\right) + c_3 (T - T_0) + c_4 (T^2 - T_0^2) + c_5 (T^3 - T_0^3) + c_6 (T^4 - T_0^4)$$

$$T_0 = 298.15 \text{ K}$$

$$c_1 = -1493 \text{ K}$$

$$c_2 = -77.4$$

$$c_3 = 0.508 \text{ K}^2$$

$$c_4 = -0.9013 * 10^{-3} \text{ K}^2$$

$$c_5 = 1.11 * 10^{-6} \text{ K}^2$$

$$c_6 = -0.628 * 10^{-9} \text{ K}^4$$

$$q = 4.9 \text{ equiv. / Kg}$$

a_i = es la actividad de cada componente

q = es la cantidad de grupos ácido del catalizador por unidad de masa

k_r = es la constante de rapidez de reacción en [mol/(s* equiv.)]

K_e es la constante de equilibrio químico

r es la rapidez de reacción en $[mol (s^* kg)]$

La ecuación cinética anterior (Ecuación 2) se maneja como una subrutina programada en lenguaje FORTRAN (Apéndice A), y en forma externa al simulador ASPEN PLUS

¹ Smith et al., 1982.

² Ancillotti et al., 1987.

³ Yuxiang, Zheng; and Xien, Xu

⁴ Jacobs, Ralph and Krishna, Rajamani

CAPÍTULO II

TAME.

Los éteres terciarios se han utilizado como componentes de la mezcla de las gasolinas desde 1979; originalmente se usaban para incrementar el índice de octano ahora se utilizan para elevar el contenido de oxígeno.

El más importante éter terciario utilizado para incrementar el contenido de oxígeno de las gasolinas es el Metil Terbutil Éter (MTBE), pero los altos costos asociados con la producción de MTBE, derivados de la necesidad de utilizar unidades deshidrogenantes para la corriente de C₄'s, así como la tendencia a disminuir las presiones de vapor de los componentes de la gasolina ha llevado a la necesidad de utilizar otros éteres. En particular el que tiene mayor aceptación es el Teramil Metil Éter (TAME), que tiene una presión de vapor menor a la del MTBE.

Esta forma de adicionar oxígeno a la gasolina ayuda a la combustión, particularmente en los autos viejos, ya que se produce menor cantidad de monóxido de carbono y se disminuyen los niveles de ozono.

La agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA), recomienda aumentar la cantidad de oxígeno en las gasolinas, principalmente en la época de invierno, en las grandes ciudades (como la Ciudad de México) es muy importante reducir la contaminación por monóxido de carbono y disminuir los niveles de ozono. La cantidad que se adiciona de éter a las gasolinas es del 2 al 15% en volumen.

GENERALIDADES.

• ESTUDIOS EXPERIMENTALES.

Randriamahefa et al. (1987) muestran la comparación de 5 diferentes resinas comerciales utilizadas como catalizadores, de las cuales tres de ellas tienen la misma actividad en la síntesis de TAME

Estos resultados concuerdan con la investigación de **Colombo y Dalloro** (1983) en la síntesis de MTBE, donde no hay diferencia significativa en la actividad de diferentes resinas.

Recientemente catalizadores ácidos heteropoliméricos heterogéneos¹, entre ellos silicatos y zeolitas² fueron nombrados como posibles alternativas de catalizadores para la síntesis de TAME. La estabilidad térmica y selectividad de estos catalizadores es alta, su actividad es mucho menor en comparación con las resinas de intercambio iónico.

Algunos de los catalizadores comerciales utilizados en la síntesis de TAME son:

1. Lewatit SPC 118 (de Bayer AG. Leverkusen), su capacidad de intercambio iónico es de 4.9 meq H⁺/g de resina seca, el grado de entrecruzamiento es de 25% DVB por masa y el área superficial inerte es de 40 m²/g
2. Lewatit SPC 108 tiene una capacidad de intercambio iónico de 5.1 meq H⁺/g de resina seca; el grado de entrecruzamiento es 13% DVB por masa y su área superficial es de 25 m²/g (Oost, 1995).

Muja, et al. (1986) reportan que la velocidad inicial de la síntesis de TAME es linealmente dependiente de la concentración de isoamilenos e independiente de la concentración de metanol.

Randriamahefa et al. (1987) prepararon TAME por metoxilación de isoamilenos puros con una relación estequiométrica constante, en un experimento batch con diferentes catalizadores. Con lo cual propone un modelo cuasi-homogéneo para la síntesis de TAME, descrito por el mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. Sin

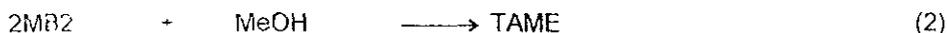
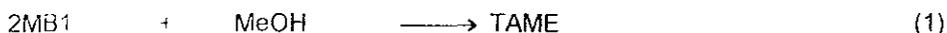
embargo, los autores no toman en cuenta la influencia de los efectos de transferencia de masa y la elevada no-idealidad de la fase líquida

La mayor información sobre el proceso de síntesis de TAME se encuentra en el artículo de **Rihko y Krause** (1995), en el cual se reporte el uso de dos catalizadores: uno sin cribar y otro con una distribución del tamaño de partícula definido. Los autores proponen el mecanismo de Eley-Rideal, planteado en términos de las actividades de cada componente.

• FORMULACIÓN DEL SISTEMA .

El Teramil Metil Éter (TAME) se produce por la reacción en fase líquida de *metanol* e *isoamilenos*, catalizada por una resina de intercambio iónico en un rango de temperatura de 40 a 100 °C. Existen tres isoamilenos pero solamente el *2-metil-1-buteno* (**2MB1**) y el *2-metil-2-buteno* (**2MB2**) son reactivos en eterificación, el *3-metil-1-buteno* (**3MB1**) no es reactivo. En la síntesis de TAME ocurre simultáneamente la reacción de dimerización de los isoamilenos, esta se lleva a cabo cuando se tienen bajas concentraciones de metanol

El esquema de las reacciones es



Los calores de reacción en fase líquida para las tres reacciones son.

$$\Delta H_{R(293^{\circ}K)} = -32.8 \text{ kJ/mol, para la reacción con 2MB1}$$

$$\Delta H_{R(293^{\circ}K)} = -25.6 \text{ kJ/mol, para la reacción con 2MB2}$$

$$\Delta H_{R(298^{\circ}K)} = -7.2 \text{ kJ/mol, para la reacción de dimerización}$$

El TAME no se puede producir a partir de isoamilenos puros, pero si se produce a partir de la fracción de C₅'s derivada de la corriente craqueada de las unidades de Cracking Catalítico Fluidizado (FCC), la corriente contienen un promedio de 25% en peso de olefinas reactivas con una distribución de 63% en peso de 2MB2, 32% en peso de 2MB1 y 5% en peso de 3MB1.

- **ASPECTOS TERMODINÁMICOS DE LA SÍNTESIS.**

Estos aspectos termodinámicos han sido discutidos con detalle en artículos de Oost y Hoffmann³, en ellos las tres reacciones relevantes fueron tomadas en cuenta para estudiar el equilibrio de múltiples reacciones. Los siguientes parámetros tienen influencia en la formación de TAME:

1 La relación molar inicial de reactantes, e_1

$$e_1 = \frac{X_{2MB1,0} + X_{2MB2,0}}{X_{MeOH,0}}$$

donde:

$X_{2MB1,0}$ = es el flujo molar inicial del isoamileno 2MB1

$X_{2MB2,0}$ = es el flujo molar inicial del isoamileno 2MB2

$X_{MeOH,0}$ = es el flujo molar inicial del metanol

2 La relación molar inicial de isoamilenos reactivos, e_2

$$e_2 = \frac{X_{2MB1,0}}{X_{2MB2,0}}$$

donde:

$X_{2MB1,0}$ = es el flujo molar inicial del isoamileno 2MB1

$X_{2MB2,0}$ = es el flujo molar inicial del isoamileno 2MB2

3. El contenido de isoamilenos en el flujo total de la fracción de C_5 's, e_3

$$e_3 = \frac{X_{2MB1,0} + X_{2MB2,0}}{X_{2MB1,0} + X_{2MB2,0} + X_{solv,0}}$$

donde:

$X_{2MB1,0}$ = es el flujo molar inicial del isoamileno 2MB1

$X_{2MB2,0}$ = es el flujo molar inicial del isoamileno 2MB2

$X_{solv,0}$ = es el flujo molar inicial de los componentes que no participan en la reacción de formación de TAME.

4 La temperatura de reacción.

En la Figura (1a) y (1b) se observa gráficamente la interacción que tienen los parámetros e_1 , e_2 y e_3 con la temperatura de reacción.

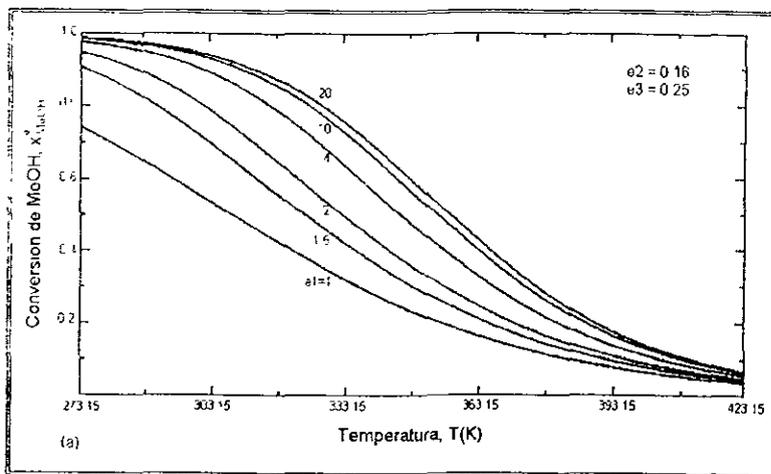


Figura 1 (a). Influencia de la relación molar de Reactantes en la conversión al equilibrio de Metanol ($e_1 \geq 1$)

e_1 es la relación molar inicial de reactantes con valores de 1 a 20

e_2 es la relación molar inicial de isoamilenos reactivos con un valor constante de 0.16

e_3 es la relación del contenido de isoamilenos en el flujo total de la fracción de C_5 's con un valor constante de 0.25

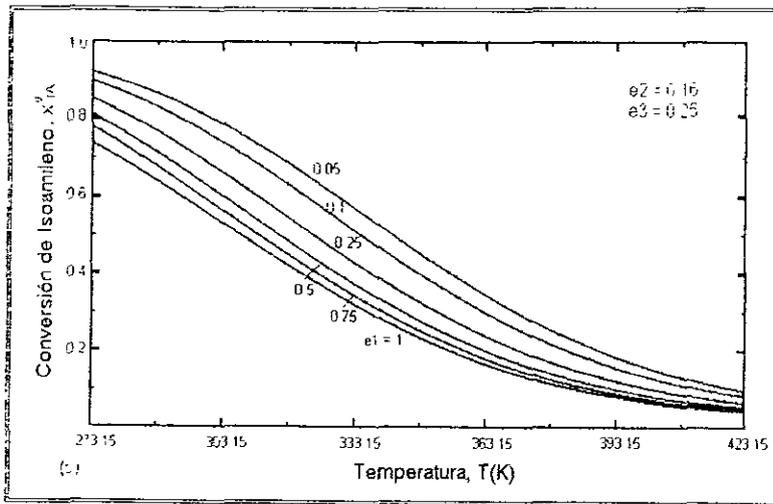


Figura 1 (b) **Influencia de la relación molar de Reactantes en la conversión al equilibrio de Isoamilenos ($e_1 \leq 1$)**

e_1 es la relación molar inicial de reactivos con valores de 0.05 a 1

e_2 es la relación molar inicial de isoamilenos reactivos con un valor constante de 0.16

e_3 es la relación del contenido de isoamilenos en el flujo total de la fracción de C_5 's con un valor constante de 0.25

Como resultado de la alta polaridad del metanol en comparación a los isoamilenos, la mezcla reaccionante es altamente no-ideal. Por esta razón las actividades de los componentes pueden tener valores 20 veces mayor a su fracción mol, este efecto se ilustra en la Figura (2).

Debido a la alta no-idealidad del sistema, su cinética la plantean en términos de las actividades de cada componente, las cuales se calculan mediante una modificación al método UNIFAC⁴

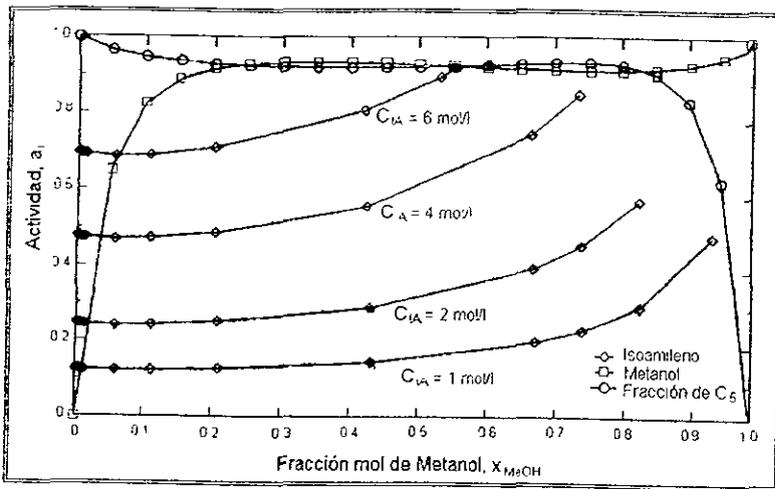
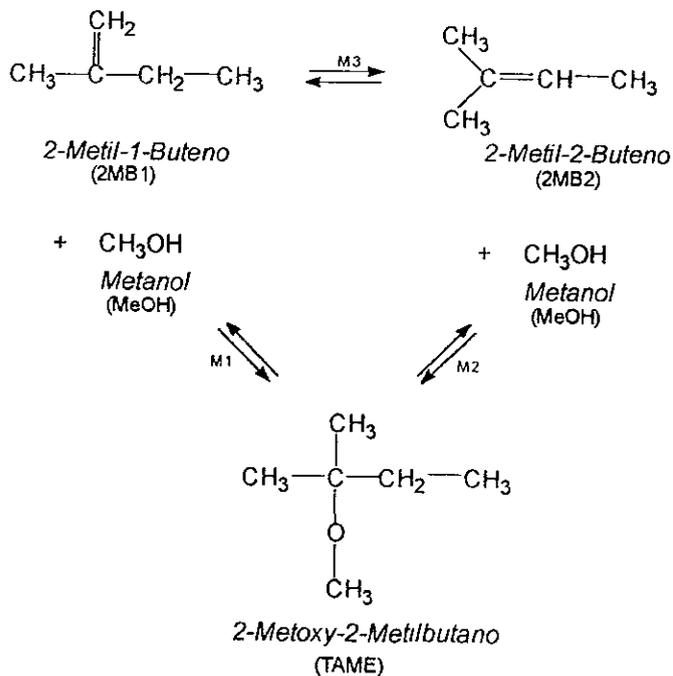


Figura 2 Actividad de cada componente en la fase Líquida típicos de la síntesis de TAME, calculadas mediante una modificación al método UNIFAC.

REACCIONES INVOLUCRADAS EN LA SÍNTESIS DEL TAME:

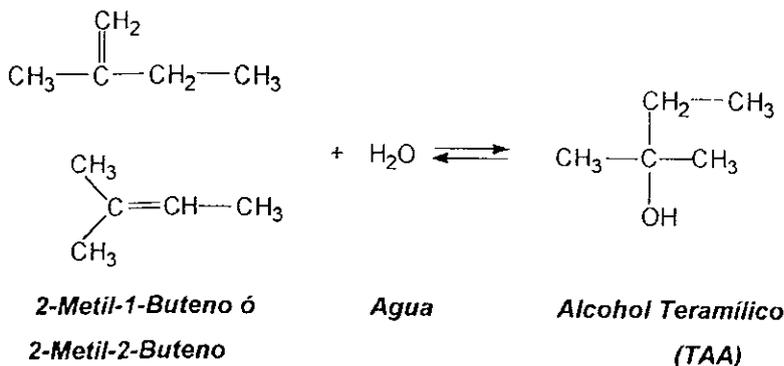
El TAME se produce por una adición simple del metanol a los isoamilenos 2MB1 y 2MB2 provenientes de la corriente de C₅'s de las unidades de FCC. Las reacciones involucradas en el proceso de TAME son las siguientes:

• REACCIÓN PRINCIPAL:



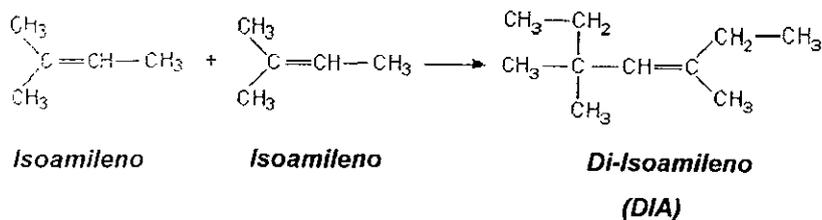
• REACCIONES SECUNDARIAS:

a) *Hidratación de los isoamilenos: 2-Metil-1-Buteno y 2-Metil-2-Buteno*



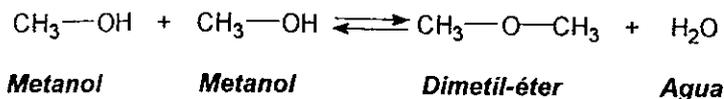
La formación de Alcohol Teramílico (TAA) es función del contenido de agua presente en la corriente de alimentación, pequeñas cantidades de TAA no afectan la calidad y el nivel de octano en la producción de TAME.

b) *Dimerización de Isoamilenos.*



Las condiciones de reacción (temperatura, espacio velocidad y relación molar metanol/isoamileno) favorecen la formación de TAME, por lo que la formación de DIA es muy baja y no afecta la calidad en la producción de TAME.

c) *Deshidratación de metanol*



La formación del dimetil-éter depende de las condiciones de reacción, debido a que la reacción se lleva a cabo a bajas temperaturas, la formación del DME es poco favorecida

PROPIEDADES FÍSICAS DEL TAME.

Las propiedades físico-químicas del TAME que son de interés para este trabajo son las siguientes:

<i>Propiedad</i>	<i>Unidades</i>	<i>Valor</i>
Peso Molecular	<i>g/mol</i>	102.177
Punto de Ebullición	<i>°K</i>	359.45
Densidad	<i>kg/m³</i>	676.2095
Viscosidad	<i>cp</i>	0.3427256
MON/RON		96/108

CINÉTICA DE FORMACIÓN DEL TAME:

La reacción de formación de TAME es reversible y exotérmica, es decir, el equilibrio químico favorece la formación de TAME a bajas temperaturas. La cinética de formación, obtenida de la literatura⁵, que se empleó en la simulación para la reacción de formación de TAME en los reactores 02-D-201, 02-D-202, y 02-D-203 es la siguiente ecuación:

$$r = k_f \left(C_{iC5} - \left(C_{TAME} / K_{eq} C_{MeOH} \right) \right) \quad (1)$$

donde:

r = es la rapidez de reacción en (kmol / (kg de catalizador * s))

K_{eq} = es la constante de equilibrio

k_r = es la constante de velocidad de reacción

$$K_{eq} = \frac{x_{rMBF}}{x_{rCS}(x_{MeOH})^{0.4}}$$

$$k_r = A_r \exp\left(\frac{-E_{a_r}}{RT}\right)$$

E_{a_r} = es la energía de Activación en (cal/mol)

A_r = es el factor pre-exponencial

$R = 1.987$ (cal mol⁻¹K)

T = es la temperatura en el reactor en (K).

x_i = es la fracción mol de los componentes involucrados en la reacción.

$$k_{2MB1} = 41317 * 10^{11} \exp\left(-\frac{20216}{RT}\right) \quad (2)$$

$$k_{2MB2} = 59148 * 10^{11} \exp\left(-\frac{22018}{RT}\right) \quad (3)$$

La Ecuación (2) se aplica en la reacción del 2MB1 y la Ecuación (3) en la reacción del 2MB2

¹ Matong et al. 1993.

² Fleitas et al., 1991

³ Oost y Hoffmann, 1994^a

⁴ Weidlich y Gröhling, 1987.

⁵ Piccoli y Lovisi, 1995

CAPÍTULO III

DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS.

La unidad de Metil Terbutil Éter (MTBE) construida en la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca tiene como propósito convertir a MTBE la mayor parte de Isobutileno que proviene principalmente de la corriente de C_4 's de las unidades de Cracking Catalítico Fluidizado (FCC). Está unidad cuenta con una capacidad de 30,000 Toneladas anuales de MTBE.

La unidad de Teramil Metil Éter (TAME) de la misma Refinería tiene como propósito convertir a TAME la mayor parte de Isoamilenos contenidos en la corriente de C_5 's que proviene de la unidades de FCC. Está unidad cuenta con una capacidad de 60,000 Toneladas anuales de TAME.

Ambos Procesos (MTBE y TAME) están licenciados por el Instituto Francés del Petróleo (IFP).

DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS DE LAS PLANTAS DE MTBE Y DE TAME.

Un esquema general de las secciones que constituyen las plantas de MTBE y de TAME se presentan en la Figura (1).

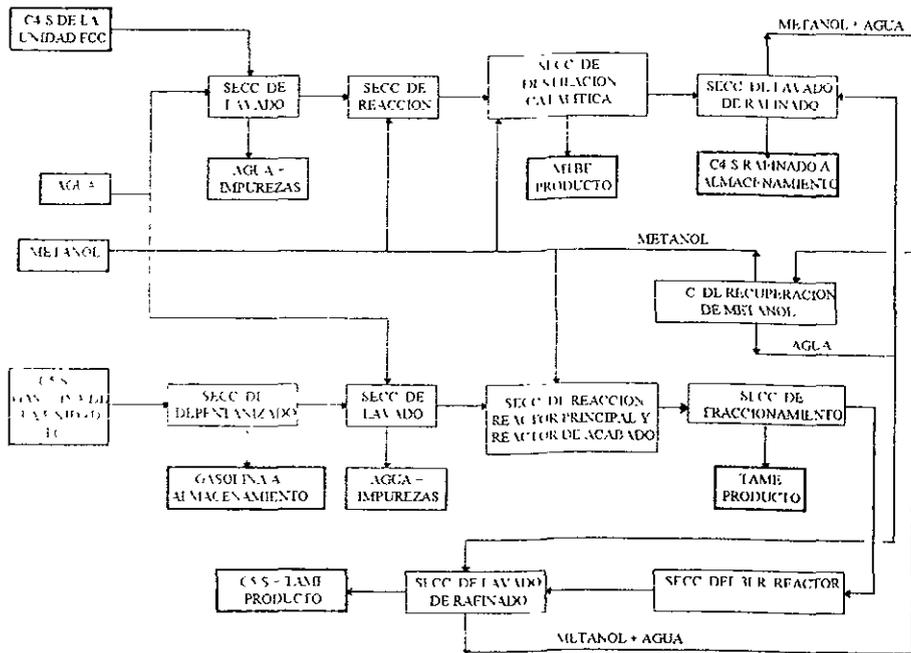


Figura 1. Representación esquemática de las plantas de MTBE y de TAME.

PLANTA DE MTBE.

El Diagrama de Flujo de Proceso de la Planta de Metil Terbutil Éter se muestra en la Figura (2) La planta de MTBE consta de las siguientes secciones

- **Sección de purificación de la corriente de alimentación de C_4 's.**

En esta se remueven principalmente las impurezas que envenenan al catalizador, y para ello se utiliza agua. Las principales impurezas son: *Cloruro de sodio, Hidróxido de sodio, Monoetanol amina, Monoetilamina, Dietilamina, Dietil formamida, N-metil pirrolidona, Acetonitrilo, Sales de amonio, y Beta-metoxi-propionitrilo.*

La corriente de agua de lavado tiene una temperatura de 100°C y una presión de 26.7 kg/cm^2 , pasa por la válvula V1 donde disminuye su presión hasta 9.5 kg/cm^2 posteriormente se enfría en el intercambiador de calor 02-C-106 hasta una temperatura de 38°C . La corriente se divide enviando el 75% de ésta hacia la planta de TAME y cerca de 2071 kg/hr (corriente 3) a la columna de lavado 02-E-101. Esta columna consta de 30 etapas de equilibrio.

La corriente de alimentación de C_4 's (corriente 1), proveniente de las unidades de FCC tiene una temperatura de 38°C y una presión de 7.2 kg/cm^2 .

El agua se alimenta en la etapa 1 de la columna 02-E-101 y la corriente de C_4 's se alimenta en la etapa 30. El agua arrastra las impurezas y se envía a las torres de enfriamiento para posteriormente reutilizarse, corriente 4. La mezcla de C_4 's se envía a la sección de reacción principal; previamente se mezcla con una corriente de metanol que proviene de la planta de TAME y se precalienta en el intercambiador 02-C-101, para entrar al reactor 02-D-101 a una temperatura cercana a 60°C .

- **Sección de reacción principal.**

La mayor conversión de Isobutileno ocurre en el reactor principal 02-D-101, el cual está diseñado para una buena operación térmica y mecánica del catalizador.

En este reactor la temperatura de operación es lo suficientemente alta para maximizar la actividad del catalizador. La corriente que sale del reactor pasa por un divisor donde se recicla el 60% de los productos, los cuales se envían a un enfriador soloaire (02-CA-101) para disminuir su carga térmica y posteriormente ser mezclados con la corriente de C_4 's-metanol. Dicha recirculación permite disminuir la carga térmica de intercambiador 02-C-101.

- **Sección de destilación catalítica.**

La corriente producto del reactor 02-D-101 se precalienta con la corriente de fondos de la columna catalítica 02-E-102, hasta una temperatura de 75°C, mediante el intercambiador proceso-proceso 02-C-103, y posteriormente se alimenta a la Columna Catalítica 02-E-102. La columna catalítica está constituida por 58 etapas de equilibrio, un condensador total y un rehervidor. Ésta columna se divide en tres zonas (como se ejemplifica en la Figura 3)

1 **Rectificación** (etapa 2 a 14)

2 **Reacción** (etapa 15 a 20)

3 **Agotamiento** (etapa 21 a 59)

La corriente de MTBE y C_4 's, que no reaccionó, se alimenta por debajo de la zona de reacción, etapa 37.

Una alimentación de metanol proveniente de la planta de TAME, puede ubicarse en las etapas: 13 (sobre la zona de reacción), 15 ó 17 (dentro de la zona de reacción), ésta permite tener un exceso de metanol y con lo que se favorece la reacción de formación de MTBE.

Por el fondo de la columna catalítica se obtiene el MTBE como producto y por el domo la corriente de C_4 's, agua y metanol, que no reaccionarán. La corriente de MTBE intercambia calor en el equipo 02-C-103 y posteriormente se enfría en el intercambiador 02-C-104 hasta una temperatura de 38°C y 3.6 kg/cm² de presión, para ser enviado a almacenamiento de gasolinas. La corriente del domo se enfría en el intercambiador 02-E-105 hasta una temperatura de 38°C y una presión de 12.5 kg/cm², y se envía a la sección de lavado de refinado.

- **Sección de lavado de refinado.**

La corriente de C₄'s proveniente del domo de la columna catalítica esta saturada con metanol, el cual puede recuperarse y ser reutilizado

El exceso de metanol que está mezclado con la corriente de C₄'s, se recupera mediante lavado con agua en la columna de lavado de refinado 02-E-103, ésta consta de 30 etapas de separación

La corriente de C₄'s-metanol-agua proveniente de la columna catalítica se alimenta en la etapa 30 y el agua de lavado proveniente de la planta de TAME se alimenta en la etapa 1, de la columna 02-E-103

La mezcla de C₄'s libre de metanol y agua que sale por el domo de la columna a una temperatura de 38°C y presión de 7.6 kg/cm², se envía a almacenamiento de LPG, y la mezcla metanol/agua que sale por el fondo de la columna se envía a la sección de recuperación de metanol ubicada en la planta de TAME.

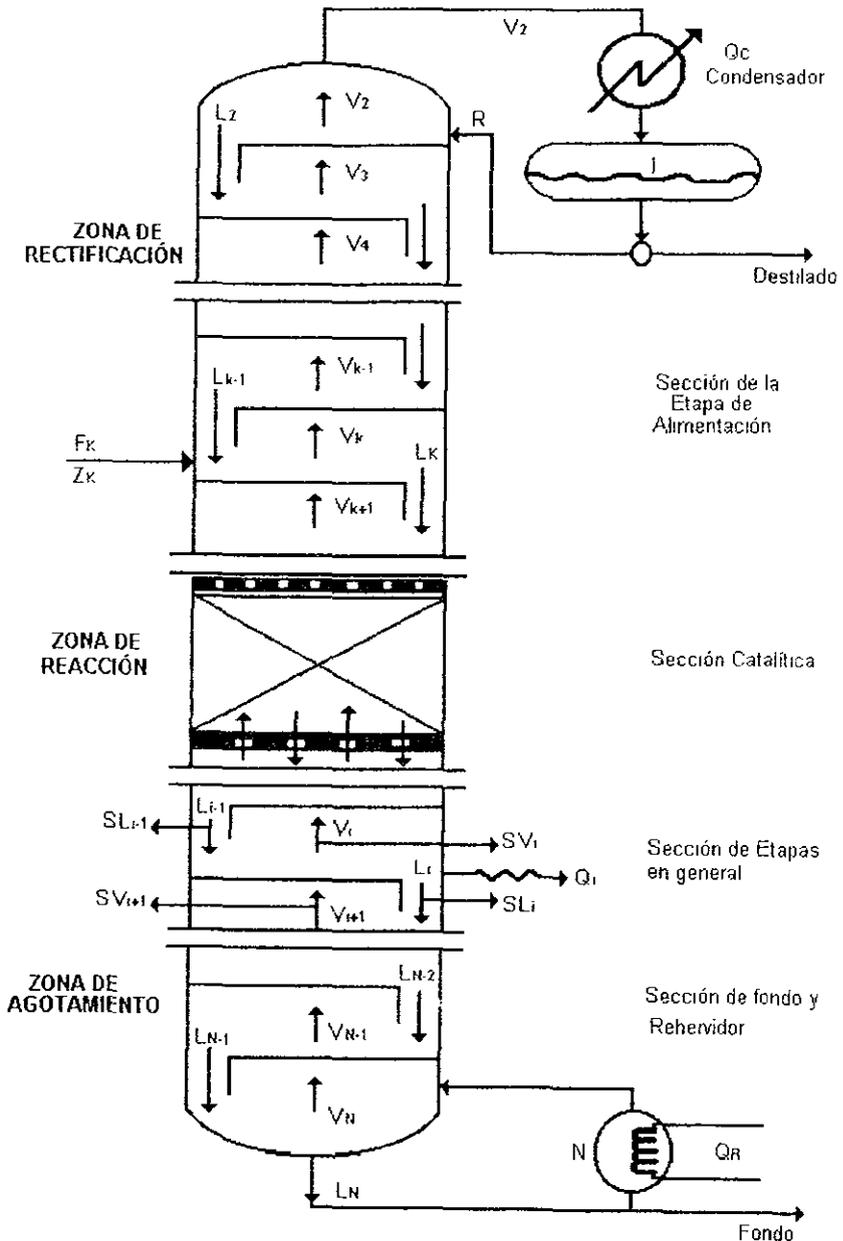
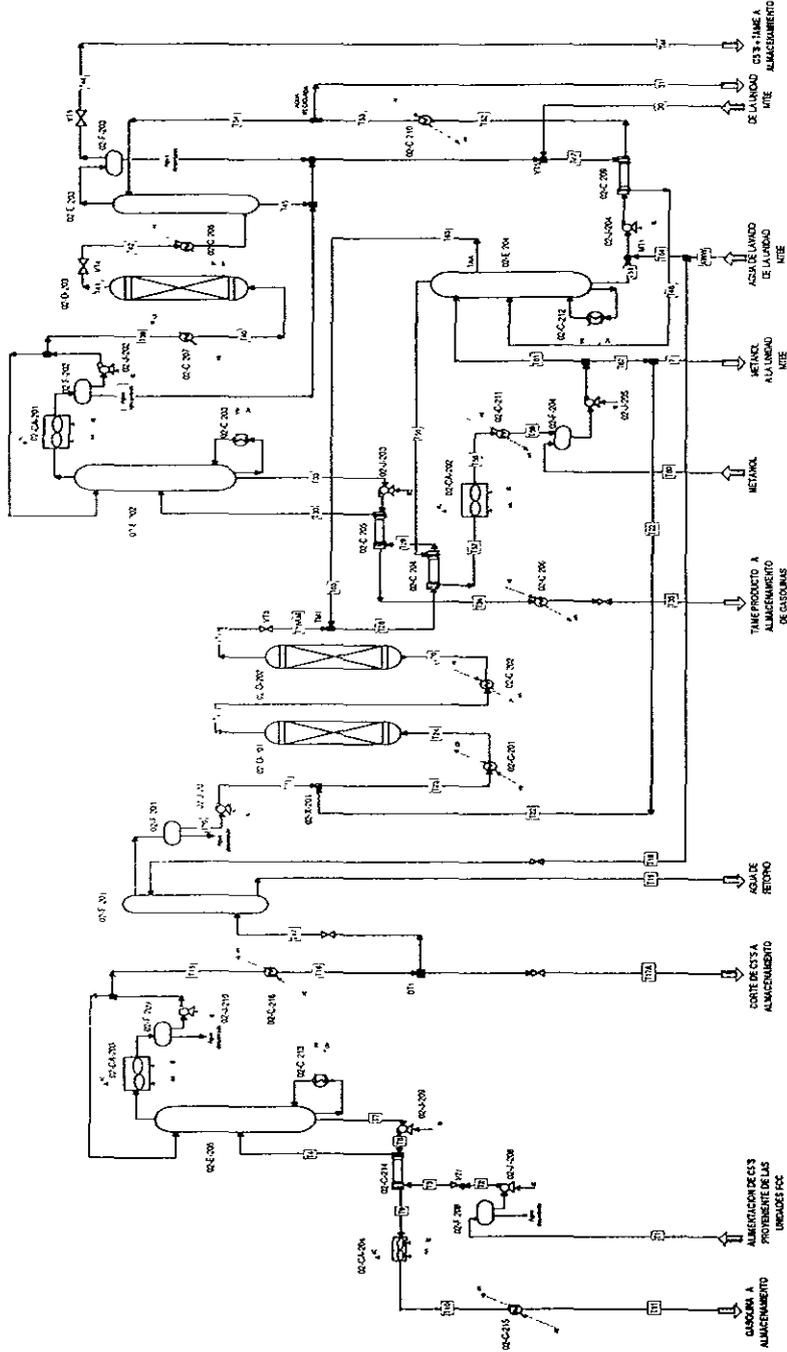


Figura 3. Representación esquemática de una Columna de Destilación Catalítica.

DESCRIPCION DE LOS PROCESOS



- AE Agua de Enfriamiento
- VB Vapor de Baja
- AP Agua de Retorno
- CB Condensado de Baja
- AA Aire Atmosferico
- VM Vapor de Meda
- CM Condensado de Meda
- AC Aire Caliente
- EE Energia Electrica

Figura 4. Diagrama de Flujo de Proceso de la Planta de TAME

PLANTA DE TAME.

El Diagrama de Flujo de Proceso de la Planta de Teramil Metil Éter se muestra en la Figura (4). La planta de TAME consta de las siguientes secciones:

- **Sección de Depentanizado.**

La corriente proveniente de las unidades de Cracking Catalítico Fluidizado (FCC) 1 y 2 esta compuesta de un corte de C_5 's y gasolina, de esta mezcla solamente se requiere el corte de C_5 's para obtener los Isoamilenos necesarios para la formación de TAME.

La corriente se alimenta al tanque acumulador 02-F-208 a una temperatura de $38^{\circ}C$ y una presión de 2.5 kg/cm^2 , y posteriormente se envía mediante la bomba 02-J-208 a una presión de 8.6 kg/cm^2 , a un precalentamiento con la corriente de fondos de la columna depentanizadora 02-E-205, en el intercambiador proceso-proceso 02-C-214, hasta una temperatura de $117^{\circ}C$ y presión de 5.9 kg/cm^2 .

La columna depentanizadora 02-E-205 consta de 42 etapas de equilibrio, un condensador total y un rehervidor, la mezcla a separar se alimenta en la etapa 26. Por el fondo, de la columna 02-E-205, se obtiene el corte de gasolina que se envía a enfriamiento mediante la bomba 02-J-209 a una presión de 7.5 kg/cm^2 , en el intercambiador 02-C-214, en el enfriador soloaire 02-CA-204 y en el intercambiador 02-C-215 hasta una temperatura de $38^{\circ}C$ y una presión de 3.1 kg/cm^2 , para posteriormente enviarla a almacenamiento. Por el domo de la columna se obtiene el corte de C_5 's, se enfría en el intercambiador 02-C-216 hasta una temperatura de $38^{\circ}C$ y una presión de 9.8 kg/cm^2 , después se divide la corriente el 44% se envía a almacenamiento y el 56% restante es la carga a la planta de TAME, la presión en ambas corrientes es de 8.0 kg/cm^2 .

- **Sección de Lavado de la corriente de C_5 's.**

En esta sección se eliminan las impurezas que pueden contaminar el catalizador de los reactores. Los contaminantes principales son. *Acetonitrilo* y *Propionitrilo*.

La sección está constituida por una columna de lavado de 30 etapas. En la primera etapa se alimenta agua de lavado a una temperatura de 38°C y presión de 8.3 kg/cm², la cual proviene de la planta de MTBE y en la etapa 30 se alimenta la corriente de C₅'s, a una temperatura de 38°C y presión de 8.0 kg/cm²

Por el domo de la columna se obtiene la corriente de C₅'s libre de impurezas a una temperatura de 38°C y presión de 3.7 kg/cm², y por el fondo agua con las impurezas a una temperatura de 38°C y presión de 5.8 kg/cm², ésta se envía a las torres de enfriamiento que están fuera de las plantas de TAME y de MTBE, para posteriormente recircularla

La corriente de C₅'s se envía mediante la bomba 02-J-201 a la sección de reacción a una presión de 21.3 kg/cm²

- **Sección de Reacción Principal (Reactor Principal y de Terminado).**

La corriente de C₅'s se mezcla con una corriente de metanol que proviene de la sección de recuperación de metanol, se precalienta en el intercambiador 02-C-201 hasta una temperatura de 55°C y presión de 17.3 kg/cm² para alimentarse al reactor principal 02-D-201

En el *Reactor Principal* 02-D-201 ocurre la mayor conversión de isoamilenos (71%), se tiene una temperatura de operación lo suficientemente alta (55 °C) para maximizar la actividad del catalizador, de esta forma la pérdida de la actividad catalítica es mínima. El efluente del reactor tiene una temperatura de 81°C y presión de 16 kg/cm², por lo que se enfría en el intercambiador 02-C-202 hasta una temperatura de 55°C y presión de 15 kg/cm² para ser enviado al reactor de terminado 02-D-202

El *Reactor de Acabado* o de *Terminado* 02-D-202, puede operar a temperaturas menores a 55 °C; en éste la conversión de isoamilenos es del 11%, la temperatura del efluente es de 58°C y la presión de 13.7 kg/cm²

El efluente del reactor 02-D-202 se envía mediante control de presión a la sección de Fraccionamiento a una presión de 6.2 kg/cm².

- **Sección de Fraccionamiento.**

La corriente proveniente del reactor 02-D-202 se mezcla con la corriente de Alcohol Teramílico (TAA) proveniente de la columna recuperadora de metanol (02-E-204), la mezcla se precalienta intercambiando calor con la corriente de domo de la columna 02-E-204 mediante el intercambiador proceso-proceso 02-C-204 hasta una temperatura de 83°C, y posteriormente cede calor a la corriente de fondos de la columna fraccionadora 02-E-202 mediante el intercambiador proceso-proceso 02-C-205 para posteriormente alimentarse a la Columna Fraccionadora de TAME 02-E-202, a una temperatura de 82°C y presión de 5.4 kg/cm².

La columna fraccionadora consta de 36 etapas de equilibrio, un condensador total y un rehevador. La corriente a fraccionar se alimenta en la etapa 24. Por el fondo de la columna se obtiene la mezcla rica en TAME y por el domo se obtiene la mezcla no reaccionante de C₅'s, isoamilenos y metanol que no reaccionaron.

La mezcla rica en TAME se envía como producto a almacenamiento de gasolinas mediante la bomba 02-J-203, previo intercambio de calor en el intercambiador proceso-proceso 02-C-205 y en el intercambiador 02-C-206, a una temperatura de 38°C y presión de 3.2 kg/cm².

El producto de domo se envía mediante la bomba 02-J-202 a la sección del tercer reactor a una temperatura de 55°C y presión de 17.5 kg/cm².

- **Sección del Tercer Reactor.**

La corriente proveniente del domo de la columna fraccionadora 02-E-202 se precalienta en el intercambiador 02-C-207 hasta una temperatura de 65°C y presión de 13.2 kg/cm², posteriormente se alimenta al *Tercer Reactor* 02-D-203,, éste opera a temperaturas menores a 80°C.

En el reactor se obtiene una conversión de isoamilenos del 18%. El efluente del reactor se envía a la sección de Lavado de Refinado a una temperatura de 71 5°C y presión de 11.8 kg/cm².

- **Sección de Lavado de Refinado.**

En esta sección se separan la mezcla de C_5 's-TAME de la mezcla Metanol-Agua para recuperar el metanol no reaccionante y reutilizarlo en las secciones de reacción de las plantas de MTBE y de TAME.

El efluente del reactor 02-D-203 se enfría en el intercambiador 02-C-208 hasta una temperatura de 38°C y presión de 9.8 kg/cm^2 , para posteriormente alimentarse a la *Columna de Lavado de Refinado* 02-E-203.

La columna 02-E-203 consta de 30 etapas de equilibrio, en la etapa 1 se alimenta agua proveniente de la sección de recuperación de metanol, a una temperatura de 38°C y presión de 5 kg/cm^2 , por la etapa 30 se alimenta la mezcla de C_5 's-TAME-Metanol-Agua a una temperatura de 38°C y presión de 9.8 kg/cm^2 .

Por el domo de la columna se obtiene C_5 's-TAME a una temperatura de 38°C y presión de 7.6 kg/cm^2 , ésta mezcla se envía a almacenamiento mediante una válvula de control de presión a 4.7 kg/cm^2 y 38°C de temperatura

Por el fondo de la columna 02-E-203, se obtiene la mezcla Metanol-Agua a una temperatura de 38°C y presión de 9.4 kg/cm^2 , ésta se envía a la sección de Recuperación de Metanol.

- **Sección de Recuperación de Metanol (compartida con la planta de MTBE).**

La mezcla Metanol-Agua proveniente de la sección de Refinado se mezcla con la *corriente de Metanol-Agua de la Sección de Lavado de Refinado* de la planta de MTBE. La mezcla final intercambia calor, en el intercambiador proceso-proceso 02-C-209, con la *corriente de fondo de la Columna Recuperadora de Metanol* 02-E-204, obteniendo una temperatura de 107°C y una presión de 6.1 kg/cm^2 .

La columna 02-E-204 consta de 42 etapas de equilibrio y un rehervidor; cuenta con dos alimentaciones: en la etapa 1 se alimenta metanol que proviene del tanque de mezclado de metanol 02-F-204, y en la etapa 27 se alimenta la mezcla a separar. Se obtienen tres corrientes de productos: por domo se obtiene metanol, tiene una salida lateral en la etapa 23 cuyo principal componente es Alcohol Teramílico, y por el fondo se obtiene agua.

La corriente de metanol sale a una temperatura de 104°C y una presión de 4.1 kg/cm². se enfría en el intercambiador proceso-proceso 02-C-204 hasta una temperatura de 101.5°C y una presión de 3.9 kg/cm²; en el enfriador soloaire 02-CA-202 hasta una temperatura de 55°C y una presión de 3.6 kg/cm², finalmente pasa por el intercambiador 02-C-211 logrando una temperatura de 43°C y una presión de 3.3 kg/cm². La corriente se mezcla con metanol, proveniente de almacenamiento, en el tanque de mezclado 02-F-204; la mezcla que se obtiene se envía mediante la bomba 02-J-205 a un divisor donde el 42% es la corriente de alimentación de la etapa 1 en la columna 02-E-204 y el 58% restante es el metanol de las secciones de reacción en las plantas de TAME y de MTBE.

El alcohol teramilico se mezcla con la corriente proveniente del reactor 02-D-202 y se envía a la sección de Fraccionamiento.

El agua producto de fondo a una temperatura de 147.1°C y un presión de 4.5 kg/cm², se recircula mediante la bomba 02-J-204 hacia las columnas de lavado 02-E-103 (planta de MTBE) y 02-E-203 (planta de TAME). Previamente se enfría en el intercambiador proceso-proceso 02-C-209 hasta una temperatura de 70.5°C y presión de 14.3 kg/cm², posteriormente se enfría hasta una temperatura de 38°C y presión de 13.7 kg/cm² en el intercambiador 02-C-210.

PARÁMETROS DE OPERACIÓN.

- PLANTA DE MTBE.

1) Componentes Principales.

Propano	1,3-Butadieno
Isobutano	Isopentano
Isobutileno	Metanol
N-Butano	Agua
1-Butano	Metil Terbutil Éter
Trans-2-Butano	Alcohol Terbutílico
Cis-2-Butano	Metil Secbutil Éter

2) Temperatura.

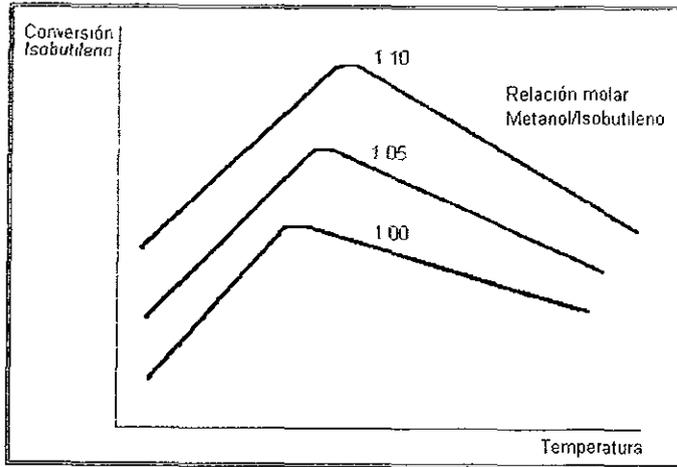
La reacción de síntesis de MTBE se aproxima a un máximo de conversión termodinámica si la temperatura es menor a 90°C; la reacción es inversamente proporcional con la temperatura ya que a temperaturas mayores a 90°C la velocidad de reacción es alta pero la formación de MTBE es pequeña, favoreciéndose la formación de subproductos. En cambio a condiciones de temperatura entre 60 y 90°C se minimizan la formación de dimetil éter y de dímeros, maximizando la conversión a MTBE.

3) Presión.

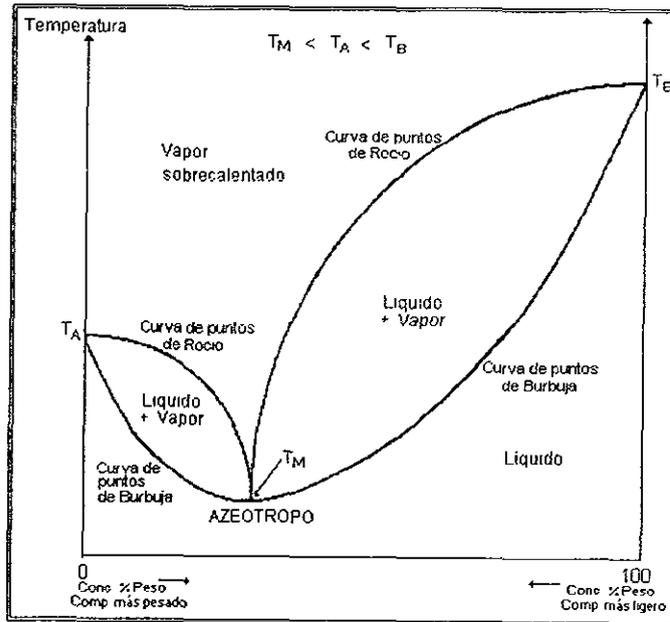
La presión de operación en el reactor 02-D-101 es de 19.4 kg/cm² en fase líquida. La presión en la columna catalítica 02-E-102, es de 8.6 kg/cm². Esta presión puede ajustarse para lograr tener una temperatura entre 60°C y 90°C (como máximo).

4) Relación Metanol/Isobutileno.

La conversión varía con la relación metanol/isobutileno de acuerdo con la Gráfica (1). La conversión se incrementa con la relación metanol/isobutileno a temperatura constante. Sin embargo, un exceso muy grande de metanol incrementa los costos en su recuperación para poder reciclarlo. El contenido de metanol también está limitado por la composición del azeótropo con MTBE en la parte superior de la columna catalítica, como se muestra en la Gráfica (2).



Gráfica 1: Efecto del exceso de Metanol sobre la Velocidad de Conversión.



Gráfica 2: Diagrama de Equilibrio

(T_A Punto de ebullición del componente más ligero,
 T_B Punto de ebullición del componente más pesado,
 T_M : Punto de ebullición del Azeótropo)

- PLANTA DE TAME.

1) Componentes Principales.

Dimetil-Éter	Metanol
Isobutano	Agua
Isobutileno	N-Pentano
1-Butano	1-Pentano
N-Butano	Cis-2-Pentano
Trans-2-Butano	Trans-2-Pentano
Cis-2-Butano	2-Metil-1-Buteno (2MB1)
Isopentano	2-Metil-2-Buteno (2MB2)
Metil Isobutil Éter	3-Metil-1-Buteno (3MB1)
Metil Secbutil Éter	Teramil Metil Éter (TAME)
Ciclo Pentano	2-Metil-Pentano
Ciclo Penteno	Alcohol Terbutílico (TBA)
2,4,4-Termetil Pentano	Alcohol Teramílico (TAA)
Deceno	2-Metil-Butano
2-Metil-2-Butano	Trans-5-Diene
4-Metil-Pentano	Cis-5-Diene
2,2-Dimetil-Butano	2,3-Dimetil-Butano
2,3-Dimetil-1-Butano	4-Metil-Ciclo-Pentano
2-Metil-Pentano	4-Metil-Trans-2-Pentano
3-Metil-Pentano	2-Metil-1-Pentano
Hexano	2-Etil-1-Butano
N-Hexano	Trans-2-Hexano
2-Metil-2-Pentano	2-ciclo-Hexano
2,2-Dimetil-Pentano	Metil-Ciclo-Pentano
Metil Terbutil Éter (MTBE)	Propano
Mezcla de Hidrocarburos	

2) Temperatura.

La temperatura de reacción puede ser menor a 90°C, de acuerdo con la cinética de las reacciones, esto es contrario a los requerimientos de alta temperatura para lograr altas velocidades de reacción. Las bajas temperaturas de reacción disminuyen la formación de subproductos (DME y Dimeros), favoreciendo la producción de TAME.

3) Presión

Para operar satisfactoriamente la presión en la fase líquida debe mantenerse en 12.7 kg/cm^2 para el caso del reactor 02-D-202, y de 10.9 kg/cm^2 para el tercer reactor 02-D-203

4) Relación Metanol/Isoamilenos.

La conversión a TAME puede variar con la relación de Metanol/Isoamilenos. Al incrementar la relación Metanol/Isoamilenos se incrementa la conversión, manteniendo la temperatura constante. En el tercer reactor el contenido de metanol está limitado a un 5% en peso de éste en el efluente del reactor. Concentraciones mayores de metanol tienen un efecto negativo en la velocidad de formación de TAME, puede presentarse la formación de DME y agua.

CONDICIONES BÁSICAS PARA LA FORMACIÓN DE MTBE Y DE TAME:

1. La reacción principal es reversible.
2. Todas las reacciones involucradas en los procesos son exotérmicas.
3. Las altas temperaturas incrementan la velocidad de la reacción y disminuyen la formación de MTBE y de TAME.
4. Las bajas temperaturas favorecen la reacción de formación de MTBE y de TAME, minimizando la formación de subproductos.

ESTRUCTURA DEL CATALIZADOR.

El catalizador utilizado en los procesos de eterificación es una resina de intercambio iónico que puede remover finos componentes y preseleccionarlos para tener como producto principal al Metil Terbutil Éter, o al Teramil Metil Éter según sea el proceso que se esté analizando.

Suponiendo que las unidades operan a condiciones óptimas y que la alimentación coincide con las especificaciones de diseño, el primer cambio de catalizador se

CAPÍTULO IV

ECUACIONES DEL MODELADO.

Todos los modelos de operaciones unitarias requieren del cálculo de propiedades termodinámicas y de datos cinéticos para generar resultados. El desarrollo de modelos termodinámicos para el cálculo de propiedades de componentes puros se ha establecido usando las ecuaciones de estado de Peng-Robinson o de Redlich-Kwong-Soave. La opción Predictiva del modelo de Soave-Redlich-Kwong (PSRK) es una extensión de la ecuación de estado de Redlich-Kwong-Soave, junto con el factor acéntrico, mediante el uso de más de tres parámetros polares, puede calcular la presión de vapor de compuestos polares.

El método PSRK predice las interacciones binarias a cualquier presión, es recomendable para mezclas de compuestos tanto no-polares como polares, en combinación con gases ligeros, por lo que es la opción que se emplea en la simulación de las plantas de MTBE y de TAME.

MODELO TERMODINÁMICO PSRK.

Este modelo utiliza las reglas de mezclado de Holderbaum y Gmehling (1991), las cuales emplean una relación entre la energía de Helmholtz de exceso y la ecuación de estado. La expresión de la presión está explícita para la ecuación de estado y es la siguiente:

$$p = - \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_T \quad (1)$$

donde la energía de Helmholtz se calcula por integración de la Ecuación (1).

A^E de la mezcla se obtiene por:

$$A_m^E = A_m - \sum_i x_i A_i^* - RT \sum_i x_i \ln x_i \quad (2)$$

donde:

A_m^E representa la Energía de Helmholtz en exceso de la mezcla.

A_i^* representa la Energía de Helmholtz de cada componente en la mezcla.

A_m representa la Energía de Helmholtz de la mezcla.

A_i^* y A_m se calculan mediante la Ecuación (1) y se sustituyen en la Ecuación (2) para evaluar la energía de Helmholtz en exceso de la mezcla.

Como ya se mencionó, la ecuación PSRK es una modificación de la ecuación de Soave-Redlich-Kwong, y tiene la siguiente forma:

$$p = \frac{RT}{V_m - b_m} - \frac{a_m}{V_m - b_m} \quad (3)$$

donde:

$$a_m = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$$b_m = \sum_i x_i b_i$$

$$a_i = \alpha_i 0.42747 \frac{R^2 T_{c_i}^2}{P_{c_i}}$$

$$\alpha_i = \left(1 + m_i \left[1 - T_n^{1/2} \right] \right)^2$$

$$m_i = 0.48 + 1.57 \omega_i - 0.176 \omega_i^2$$

$$b_i = 0.08664 \frac{R T_{c_i}}{P_{c_i}}$$

x_i = fracción mol de los componentes de la mezcla.

R = Constante universal de los gases.

T = Temperatura.

T_c = Temperatura crítica

P_c = Presión crítica

ω = Factor acéntrico

la regla de mezclado de Holderbaum y Gmehling es.

$$\frac{a_m}{b_m} = \sum_i x_i \frac{a_i}{b_i} - \frac{1}{\Lambda} A_m^E \quad (4)$$

donde Λ se calcula mediante la siguiente ecuación

$$\Lambda = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left(\frac{\frac{V_m}{b_m} + \lambda_1}{\frac{V_m}{b_m} + \lambda_2} \right) \quad (5)$$

Donde λ_1 y λ_2 dependen de la ecuación de estado (ver Apéndice C)

Si la Ecuación (5) se aplica a una presión infinita, $\lambda_1 \rightarrow 1$ y $\lambda_2 \rightarrow 0$, la energía de Helmholtz en exceso es igual a la energía de Gibbs en exceso, y se recupera la regla de mezclado de Huron-Vidal y la ecuación de Soave-Redlich-Kwong.

El banco de datos del simulador ASPEN, cuenta con los parámetros binarios necesarios para la simulación de las plantas de MTBE y de TAME ; en el caso de no contar con los parámetros binarios el simulador emplea el modelo de la ecuación de

UNIFAC, la cual no necesita de datos experimentales, ya que hace uso de la Teoría de Contribución de Grupos y de esta forma obtiene su valor

MODELOS DE BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA DE LOS EQUIPOS:

- **Columnas de Extracción (LAVADO).**

El balance de materia que representa una etapa de una columna de extracción líquido-líquido, considerando que las etapas alcanzan el equilibrio de fases, operan en forma isotérmica, es:

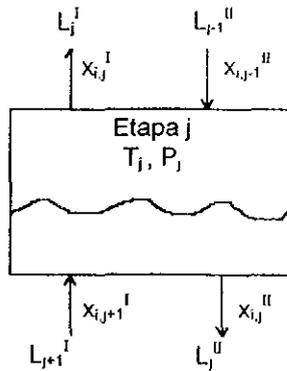


Figura 1 Representación de una Etapa de Equilibrio de una Columna de Extracción.

Balance de materia total:

$$L_{j-1}^I + L_{j+1}^{II} = L_j^I + L_j^{II}$$

Balance de materia del componente i :

$$L_{j-1}^I x_{i,j-1}^I + L_{j+1}^{II} x_{i,j+1}^{II} = L_j^I x_{i,j}^I + L_j^{II} x_{i,j}^{II}$$

Equilibrio de fases:

$$K_i^{L-L} = \frac{x_i^I}{x_i^{II}}$$

• LAS COLUMNAS DE DESTILACIÓN, MODELO RADFRAC.

En la Figura (2) se muestra un esquema de una etapa de equilibrio, se asume que cada etapa tiene una alimentación F_k , una salida lateral de vapor SV_k , una salida lateral de líquido SL_k y una de calor Q_k

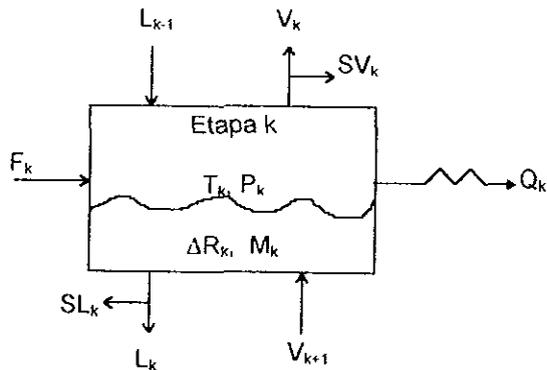


Figura 2: Representación de una Etapa de Equilibrio.

Balance total de materia en la etapa k :

$$\frac{dM_k}{dt} = L_{k-1} + V_{k+1} - (L_k + SL_k) - (V_k + SV_k) + F_k + R_k$$

Balance de materia del componente i en la etapa k .

$$\frac{d(M_k X_{k,i})}{dt} = L_{k-1} X_{k-1,i} + V_{k+1} Y_{k+1,i} - (L_k + SL_k) X_{k,i} - (V_k + SV_k) Y_{k,i} + F_k Z_{k,i} \pm \sum_{j=1}^r R_{j,i}$$

Balance de energía en la etapa k :

$$\frac{d(M_k h_k)}{dt} = L_{k+1} h_{k+1} + V_{k+1} H_{k+1} - (L_k + S L_k) h_k - (V_k + S V_k) H_k + F_k h_{jk} - Q_k + \sum_{j=1}^r R_{jk} H_{jk}$$

Relaciones de equilibrio por componente en la etapa k .

$$Y_{k,i} = \gamma_{k,i} K_{k,i} X_{k,i}$$

Ecuaciones de restricción para las fracciones mol:

$$\sum_i Y_{k,i} - 1 = 0$$

$$\sum_i X_{k,i} - 1 = 0$$

Ecuación para la fase líquida:

$$M_k = \bar{\rho}_k V_k$$

como ninguna reacción ocurre en el condensador total (considerado la etapa 1), entonces

$$V_1 = L_1 + S L_1$$

Las siguientes suposiciones fueron hechas para formular el modelo de la columna catalítica 02-E-102 de la planta de MTBE:

1. Se cuenta con un condensador total
2. El vapor y líquido de cada etapa se encuentran en equilibrio (excepto en el condensador).
3. Las reacciones ocurren solamente en la fase líquida y en la zona empacada.
4. La presión y temperatura son constantes en cada etapa.
5. Los términos SL_k y SV_k se eliminan del balance de materia, ya que en la columna catalítica no hay extracciones laterales.

El modelo puede aplicarse a todas las columnas con la única diferencia del término de reacción, el cual no existe en las columnas convencionales

- **LOS REACTORES.**

Los reactores de las plantas de MTBE y de TAME (02-D-101, 02-D-201, 02-D-202 y 02-D-203), son tubulares. El balance de materia para los reactores, se hace a una sección diferencial, asumiendo un reactor de flujo tapón, es el siguiente:

$$\frac{\partial X_i}{\partial \left(\frac{Z_R}{L_R} \right)} = r \frac{W}{F_i}$$

El balance de energía, para el reactor tubular considerándolo adiabático es el siguiente

$$\frac{\partial (FC_p T)}{\partial \left(\frac{Z_R}{L_R} \right)} = rW(-\Delta H_R)$$

Ambas ecuaciones se resuelven simultáneamente para obtener los perfiles de concentración y temperatura a lo largo de los reactores.

COLUMNAS DE DESTILACIÓN, MODELO RIGUROSO “RATEFRAC”.

Este modelo se aplicó exclusivamente a la Columna Catalítica 02-E-102 de la planta de MTBE, por que para emplear el modelo RATEFRAC se necesita información sobre las dimensiones de las columnas y solo se contaba con los datos de ésta columna

El modelo RATEFRAC describe simultáneamente los fenómenos de transferencia de masa y energía en sistemas multicomponentes, únicamente se supone equilibrio en la interfase líquido-vapor, en el rehervidor y en el condensador. Para sistemas sin reacción, este modelo incluye los balances de materia y energía alrededor de las fases líquida y vapor, utilizando modelos y correlaciones de transferencia de masa y de energía, correlaciones de equilibrio para la interfase, y modelos para el área interfacial.

Para sistemas con reacción, además de las correlaciones antes mencionadas, el modelo considera la influencia de la reacción sobre los procesos de transferencia de masa y calor

En la Figura (3) se muestra un esquema de una etapa de equilibrio de una columna con reacción, se asume que cada etapa tiene una alimentación líquida F_{ij}^L ; una alimentación vapor F_{ij}^V , una salida lateral de vapor $S_{ij}^V V_j$; una salida lateral de líquido $S_{ij}^L L_j$, una salida lateral de calor en la fase vapor Q_{ij}^V ; y otra en la fase líquida Q_{ij}^L

Al final de ésta sección se establece el significado de los términos empleados en las diferentes ecuaciones.

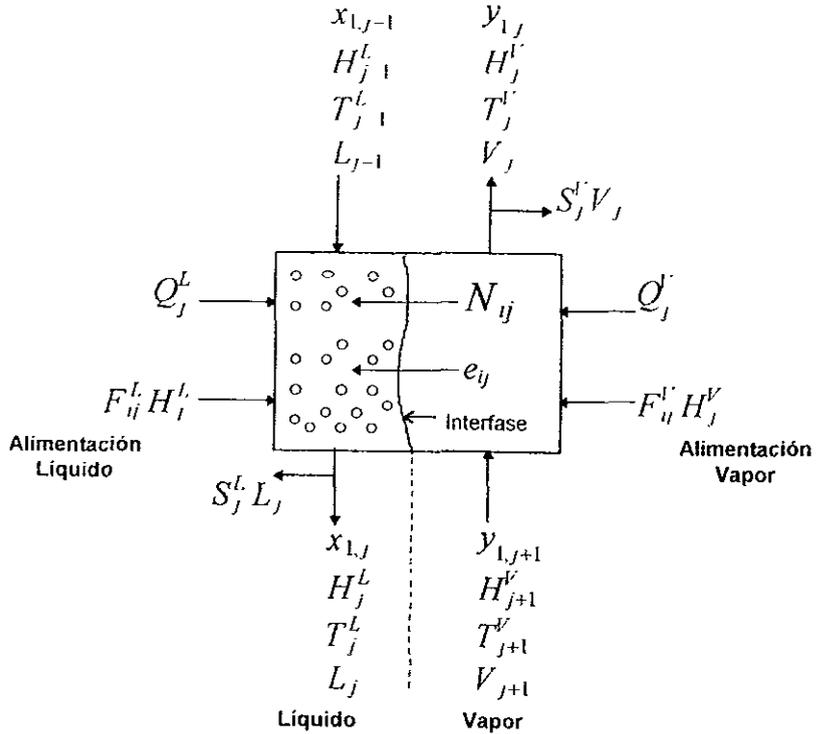


Figura 3: Representación de una Etapa de Equilibrio para el modelo RATEFRAC.

BALANCE DE MATERIA:

Fase vapor

$$(1 + S_j^V) V_{i,j} - V_{i,j+1} - F_{i,j}^V + N_{i,j} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, C$$

Fase líquida

$$(1 + S_j^L) L_{i,j} - L_{i,j-1} - F_{i,j}^L - N_{i,j} - r_{i,j} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, C$$

BALANCE DE ENERGÍA:

Fase vapor

$$(1+S_j^V)H_j^V \sum_{i=1}^C V_{i,j} - H_{j+1}^V \sum_{i=1}^C V_{i,j+1} + Q_j^V - H_j^{LF} \sum_{i=1}^C F_{i,j}^L + h_j^V a_j \frac{\varepsilon_j^V}{\exp \varepsilon_j^V - 1} (T_j^V - T_j^L) + \sum_{k=1}^C N_{k,j} H_{k,j}^V = 0$$

Fase líquida

$$(1+S_j^L)H_j^L \sum_{i=1}^C L_{i,j} - H_{j-1}^L \sum_{i=1}^C L_{i,j-1} + Q_j^L - H_j^{LF} \sum_{i=1}^C F_{i,j}^L + h_j^L a_j (T_j^L - T_j^V) + \sum_{k=1}^C N_{k,j} H_{k,j}^L - Q_j^R = 0$$

ECUACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

Fase vapor

$$N_{i,j} - \sum_{k=1}^{C-1} k_{i,k,j}^V a_j (y_{k,j}^V - y_{k,j}^L) - y_{i,j}^V \sum_{k=1}^C N_{k,j} = 0 \quad i=1,2,\dots,C-1$$

Fase líquida

$$N_{i,j} - \sum_{k=1}^{C-1} k_{i,k,j}^L a_j (x_{k,j}^L - x_{k,j}^V) - x_{i,j}^L \sum_{k=1}^C N_{k,j} = 0 \quad i=1,2,\dots,C-1$$

ECUACIÓN DE TRANSFERENCIA DE ENERGÍA.

$$h_j^V a_j \frac{\varepsilon_j^V}{\exp \varepsilon_j^V - 1} (T_j^V - T_j^L) + \sum_{k=1}^C N_{k,j} H_{k,j}^V - h_j^L a_j (T_j^L - T_j^V) - \sum_{k=1}^C N_{k,j} H_{k,j}^L = 0$$

RELACIÓN DE EQUILIBRIO ENTRE FASES.

$$K_{i,j}^L x_{i,j}^L - y_{i,j}^V = 0 \quad i=1,2,\dots,C$$

EFICIENCIA DE MURPHREE.

Basada en la fase vapor:

$$E_{MF} = \frac{y_n - y_{n+1}}{y_n^* - y_{n+1}}$$

donde:

L : Flujo de líquido [mol tiempo]

V : Flujo de vapor [mol tiempo]

F : Flujo de alimentación [mol tiempo]

x : Fracción mol en la fase líquida.

y : Fracción mol en la fase vapor.

H : Entalpía molar [energía mol]

T : Temperatura.

Q : Flujo de energía térmica [energía tiempo]

K : Relación de equilibrio de fases.

r : Rapidez de reacción [mol/(tiempo)(masa de catalizador)]

a : Área efectiva interfacial.

k : Coeficiente de transferencia de masa [mol/(área)(tiempo)]

h : Coeficiente de transferencia de calor [energía (área)(tiempo)(temperatura)]

N : Rapidez de transferencia de masa [mol/tiempo]

S : Razón entre la corriente de salida de la etapa y la corriente lateral.

ϵ : Factor de transferencia de calor.

y_n : Composición del vapor que sale de la etapa.

y_{n+1} : Composición del vapor que entra a la etapa.

y_n^* : Composición de la fase vapor que se encontrará en equilibrio con el líquido que sale de la etapa.

los subíndices representan:

i, k . Índice del número de componente

j . Índice del número de etapa

los superíndices hacen referencia a:

l : Interfase

L : Fase líquida

V : Fase vapor

F : Corriente de alimentación

R : Reacción

CAPÍTULO V

SIMULACIÓN DE LAS PLANTAS DE MTBE Y DE TAME.

La Simulación de Procesos es una parte del análisis de procesos, se basa en la representación de un proceso mediante un modelo matemático, analógico o físico, que al resolverse proporciona información acerca del comportamiento de las variables de dicho proceso. Por lo tanto, la simulación de una planta o equipo permite predecir como se comportarían estos en operación normal, o ante supuestas modificaciones en las condiciones de operación, así como otras modificaciones que se deseen analizar y que pueden ser producto de una optimización del modelo matemático.

En el caso de un proceso químico los modelos se basan en los fenómenos fundamentales que describen los procesos de transporte y de reacción química. Por lo que entre mejor sea el modelo, más eficiente y confiable será la simulación y por ende la interpretación del sistema.

SIMULACIÓN DE PROCESOS.

Existen dos modalidades para implementar la simulación de un proceso químico.

- **La Simulación Dinámica y**
- **La Simulación en Estado Estacionario.**

La *simulación dinámica* procura representar sistemas en condiciones de régimen transitorio en su operación; caso común en el arranque o paro de una planta, esto con el fin de formular los sistemas de control

La *simulación en estado estacionario*, como su nombre lo dice, consiste en el modelamiento de procesos en estado estacionario, es decir, se considera que las condiciones de operación y los flujos de las corrientes de proceso son constantes, esta situación incluye a las condiciones de diseño y de operación normal de la planta así como una operación en continuo de la planta.

Debido a que la representación de un proceso mediante modelos matemáticos implica la resolución de un gran número de ecuaciones, se han tomado como herramienta sistemas de cómputo especializados, como son los sistemas de simulación de procesos, llamados *Simuladores de Procesos*.

El sistema de simulación de procesos que se utilizó en éste trabajo, es un sistema que acepta información acerca del proceso a nivel del diagrama de flujo del mismo, y es capaz de implementar en detalle los análisis utilizados en el desarrollo, diseño y operación del proceso.¹

Usualmente la entrada de un sistema de simulación de procesos, es la información contenida en el diagrama de flujo, mientras que las salidas son: todas las características de las corrientes de proceso; los parámetros y dimensiones de todos los equipos; una evaluación económica; etc. De esta forma el sistema de simulación

nos ayuda a tomar decisiones concernientes al desarrollo, diseño y operación de procesos químicos.

Los elementos principales de un sistema de simulación de procesos son los siguientes:

- **Modelos**
 - **Algoritmos**
 - **Soporte Computacional (Software)**
 - **Interfase con el usuario**
- Los **modelos** son el fundamento de cualquier sistema de simulación, estos son la base del análisis. Los modelos de procesos están integrados con las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, ecuaciones cinéticas, de cálculo de propiedades fisicoquímicas, relaciones de conexión y restricciones de diseño y control.

Dichos modelos matemáticos toman la forma de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales, y tienen que contener el nivel de detalle, precisión, validez y generalidad que se requieran para describir el tipo de proceso en cuestión.

Los modelos de las diferentes operaciones unitarias 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; en tanto que los parámetros son aquellos valores que permiten especificar la operación de las diversas unidades del proceso, finalmente las variables de salida son los valores de todas las corrientes de salida del proceso y los resultados de las variables de operación no especificadas; en la Figura (1) se esquematiza el modelo de una operación unitaria.

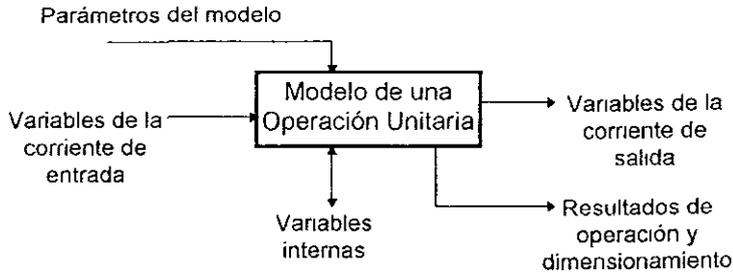


Figura 1 Modelo de una operación unitaria.

- Los **algoritmos**, utilizan los modelos para generar los resultados requeridos. Éstos resuelven los problemas matemáticos generados por los modelos. El tipo de problema matemático que debe resolverse depende en gran medida del tipo de análisis de interés, casi siempre es necesario resolver conjuntos de ecuaciones diferenciales y algebraicas (lineales y no lineales), por lo que el algoritmo utilizado debe cumplir con ciertos requerimientos: deben ser robustos; ser tan generales como sea posible; eficientes en su ejecución, almacenamiento y manejo de información. Continuamente todos estos requerimientos se contraponen unos con otros, por lo que se debe hacer un análisis del objetivo principal del modelo, para encontrar el algoritmo que contenga la mejor combinación de ellos.
- El **Soporte Computacional**, incluye todos aquellos implementos que se requieran para ejecutar los algoritmos en una computadora y un sistema operativo especial, esta 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 soporte computacional debe ser de fácil entendimiento, mantenimiento, y sencillo de ser modificado.

- El domo de la estructura esta ocupado por **la interfase con el usuario**, la cual incluye el lenguaje de entrada, por medio del cual se describe el problema, reportes que contienen los resultados, la documentación que explica el funcionamiento del sistema y los protocolos de interacción con otros programas y sistemas. La interfase con el usuario debe de permitir una introducción de información tan natural como sea posible y permitir la obtención de los resultados de la forma más útil y sencilla posible

El esquema ideal estaría marcado por un sistema de simulación en el que el soporte computacional y los algoritmos fuesen entendibles al usuario, de tal forma que este pudiera interactuar directamente con los modelos a través de la interfase. De esta forma mensajes generados durante la ejecución del programa, tales como "el algoritmo no convergió" o "la capacidad de almacenamiento ha sido excedida", deben llegar hasta el usuario para tomar las medidas correctivas necesarias

TIPOS DE SIMULACIÓN:

Existen tres tipos de simulación:

- **Matemática**
 - **Analógica**
 - **Física**
-
- La simulación **matemática**, como su nombre lo indica, emplea modelos matemáticos para representar un fenómeno, y cuando se realiza vía un ordenador digital se denomina simulación digital; y consiste en la investigación del comportamiento de un sistema por medio de una computadora. Para realizar este tipo de simulación se requiere de una estructura de soporte constituida de modelos matemáticos que describen el comportamiento del sistema en estudio. Así mismo, los sistemas de computo y los simuladores de proceso (programas) permiten llevar a cabo estudios de procesos que antes eran inaccesibles debido a

su complejidad y al tiempo que se requería, en las antiguas computadoras, para llevarlos a cabo. En contraste con la simulación matemática, en la simulación analógica se emplean circuitos para representar las diferentes operaciones de un proceso.

La simulación puede estar orientada a módulos; en este sentido se clasifica como

1. Modular (subrutinas)

1.1 Secuencial

1.2 Simultáneo

Orientación Modular, considera la partición del proceso en módulos. Cada módulo esta conformado por los distintos modelos que describen una operación unitaria, de esa forma el proceso puede representarse por la unión de los diferentes módulos.

- *En el enfoque modular secuencial* cada módulo se implementa dentro de una rutina de cálculo, que se encarga de obtener los valores de las variables de salida como una función de los valores de las variables de entrada y de los parámetros de cada unidad. Las rutinas correspondientes a cada módulo las maneja un programa central, por lo que este enfoque implica la ejecución progresiva de los diferentes módulos, en el sentido de flujo normal de materia y energía, partiendo de las corrientes de alimentación al proceso, hasta llegar a los productos finales. En la Figura (2), se presenta el caso de un proceso totalmente secuencial.

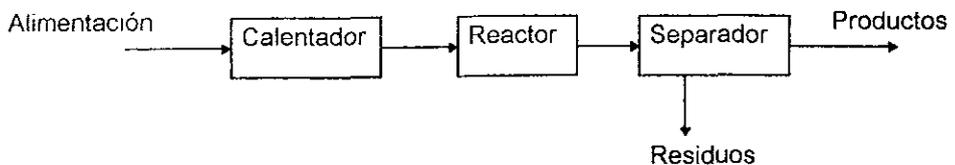


Figura 2. Esquema de un proceso secuencial.

En la industria química la mayoría de las plantas tienen una configuración compleja, que implica corrientes de recirculación, por lo que el cálculo se complica notablemente, principalmente porque las recirculaciones introducen cálculos iterativos, ya que la información concerniente a una corriente esta asociada a la entrada y salida de cada módulo simultáneamente.

Con el fin de realizar el cálculo del proceso en forma totalmente secuencial, se tienen que identificar los ciclos de recirculación y asignar valores estimados a las corrientes de corte, estas son las corrientes que al ser asignadas convierten al sistema en acíclico. Una vez determinados los ciclos y asignadas las corrientes de corte, es necesario especificar la secuencia de cálculo del sistema, es decir el orden con que los diferentes módulos se ejecutaran durante la simulación. De esta forma los módulos se resuelven progresivamente, hasta encontrar los nuevos valores de las corrientes de corte. El cálculo se continua hasta llegar a la convergencia de las corrientes de corte

El control del flujo de información lo controla el programa central, este transfiere los valores de las corrientes de salida de un módulo en forma de valores de entrada del módulo siguiente, además de asignar a cada módulo los parámetros que lo caracterizan

La implementación de este enfoque hace necesaria la representación de cada operación mediante un conjunto de ecuaciones que constituyen a cada módulo; para la resolución de dichas ecuaciones es necesaria la evaluación de las propiedades termofísicas del sistema, y esto forma un primer ciclo iterativo dentro de la simulación. Por otro lado, la resolución simultánea de las ecuaciones que componen a cada módulo puede considerarse como un segundo ciclo iterativo, el cual tiene que tratarse cuando el primero ha sido resuelto.

El tercer ciclo iterativo, superior a los anteriores, se establece para la convergencia de las corrientes de corte presentes en los ciclos de recirculación.

Cuando la simulación se encuentra sujeta a restricciones en los parámetros o en alguno de los valores de las corrientes; lo cual implica la búsqueda de las condiciones de operación que permitan satisfacer dichas restricciones, lo que

genera un cuarto ciclo iterativo, ya que el sistema tiene que evaluarse repetitivamente hasta que se cumplan las especificaciones de diseño.

La secuencia de resolución para los cuatro ciclos iterativos del enfoque modular secuencial, esta esquematizado en la Figura (3).

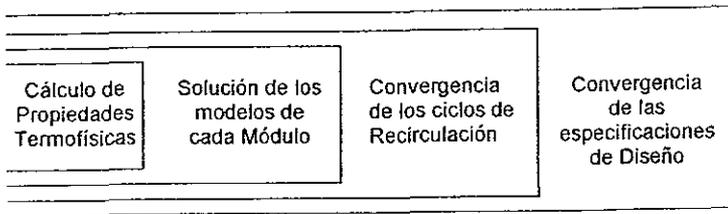


Figura 3. Ciclos múltiples de cálculo en el enfoque modular secuencial.

Las principales ventajas de los sistemas que utilizan el enfoque modular secuencial son las siguientes:

- Los modelos que representan a cada módulo son lo suficientemente rigurosos para asegurar su eficiencia, además de que existe una gran diversidad de operaciones unitarias que se pueden modelar.
- Es posible implementar algoritmos especializados de cálculo para cada módulo de acuerdo a características de éste.
- Permite analizar el comportamiento de puntos específicos del proceso, aún cuando alguna secuencia de cálculo no se haya completado o no haya llegado a la convergencia, con lo que la visualización y diagnóstico de errores durante el cálculo se facilita
- Es una modalidad fácil de entender para el usuario, ya que existe gran semejanza entre el diagrama de flujo de proceso y la estructura matemática generada por la interconexión de los módulos.

Enfoque modular Simultáneo. el esquema básico de operación de este enfoque se muestra en la Figura (4).

El enfoque modular simultáneo tiene dos tipos de modelos:

- *Rigurosos*, y
- *Simplificados*.

Los modelos *rigurosos* son los conjuntos de ecuaciones que forman los diferentes módulos en el enfoque modular secuencial, simultáneamente para cada unidad; un módulo adicional se plantea mediante modelos simplificados, que resultan de la combinación lineal de todas las variables de entrada. De tal forma, que para un conjunto de variables de entrada X_{ij} a un módulo i con parámetros U_i , el modelo riguroso tiene la forma:

$$Y_{ij} = f(X_{ij}, U_i)$$

Mientras que los modelos *simplificados* tienen la forma:

$$Y_{ij} = \sum B_{ijk} X_{ik}$$

donde

k es el número de la corriente de entrada al módulo i .

B_{ijk} es el coeficiente de la ecuación simplificada que relaciona la salida j con las entradas k .

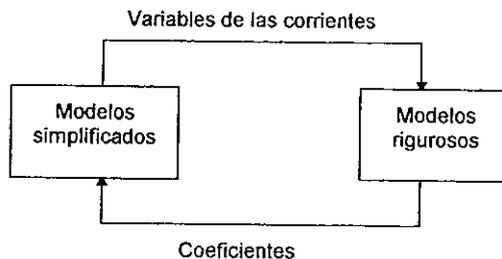


Figura 4. Concepto básico del enfoque Modular Simultáneo.

Los coeficientes de los modelos simplificados se determinan a partir de valores generados por los rigurosos, (por ejemplo utilizando el método de Mínimos Cuadrados); esta estrategia tiene la ventaja de permitir añadir las especificaciones de diseño al sistema en forma de ecuaciones lineales sin que esto represente complejidad adicional

La solución de los modelos simplificados proporciona valores aproximados de las corrientes de proceso, si al verificar la convergencia ésta no se alcanza, se puede proceder a modificar los coeficientes de los modelos simplificados, o bien a utilizar los rigurosos para generar valores más precisos.

La característica más importante del enfoque modular simultáneo es que maneja modelos simplificados, los cuales contienen menor número de variables que los rigurosos y, por lo tanto, es más sencilla su solución. Desde este punto de vista su resolución puede plantearse como un problema reducido, y de esta forma se evita el uso excesivo de tiempo de cálculo

Los *modelos simplificados*, también pueden implementarse usando modelos no lineales; en tal caso se les conoce como modelos aproximados de ingeniería, y tienen la ventaja de representar en forma más precisa los comportamientos irregulares de los procesos

Este enfoque ha sido llamado *modular Simultáneo* debido a que utiliza los diferentes módulos formados por las ecuaciones que describen una operación y porque se resuelve simultáneamente, para encontrar los valores de todas las variables de las corrientes del proceso. Su estructura es muy familiar para el ingeniero químico, ya que éste acostumbra utilizar modelos aproximados para hacer análisis preliminares y después verificar con modelos rigurosos

Las principales ventajas del *enfoque modular simultáneo* son:

- Permite manejar las especificaciones de diseño paralelamente a todo el proceso, lo que elimina los ciclos de control.

- Es capaz de utilizar los módulos desarrollados por sistemas modulares secuenciales, para proveerse de buenos estimados y para el manejo de casos especiales de simulación.
- Si ocurren errores o los cálculos no convergen, el usuario puede referirse a los resultados de la parte modular para aclarar o diagnosticar los errores.

Para el caso en que los procesos a simular sean muy complejos, se sugiere descomponer el proceso en uno o más bloques de módulos². Cada bloque puede contener uno o más módulos, los cuales se resuelven simultáneamente, mientras que el proceso global se resuelve utilizando el enfoque modular secuencial considerando cada bloque como si fuese un módulo.

SECUENCIA DE LA SIMULACIÓN DE LAS PLANTAS DE MTBE Y DE TAME DE LA REFINERÍA DE SALINA CRUZ, OAXACA.

En el presente trabajo, se empleó la simulación con orientación modular, para modelar las plantas de MTBE y de TAME. Utilizando el **simulador ASPEN PLUS versión 9.3**, el cual cuenta con los modelos de las operaciones unitarias involucradas en los procesos, además de los algoritmos que permiten detectar los ciclos y los conjuntos de corte, que se requieren para resolver los balances de materia y energía.

Para llevar a cabo la simulación de las plantas de MTBE y de TAME, fue necesaria la siguiente información:

- Diagrama de Flujo del Proceso, para especificar la conectividad de los diferentes equipos y de las corrientes del proceso.
- Características de las corrientes de alimentación, tales como: temperatura, presión, flujo y composición.

- Especificaciones de las características de los equipos, tales como: temperatura, presión, dimensiones (longitud y diámetro), número de etapas, etapa de alimentación, etc
- Criterios de convergencia, para establecer cada uno de los métodos numéricos que se utilizaron
- La secuencia de cálculo, es decir, el orden en que se simulan los diferentes equipos

Para llevar a cabo la simulación fue necesario caracterizar a las sustancias que están involucradas en los procesos, conocer sus propiedades para poder predecir como interactúan y/o como reaccionan unas con otras, y de esta forma poder elegir la ecuación de estado, el modelo termodinámico y el modelo cinético, que mejor reproducen las especificaciones de diseño y de operación de las plantas

La aproximación de los resultados de la simulación con la realidad, depende esencialmente de que tan fielmente representen al problema real, los modelos matemáticos. Por lo que, conforme a los procesos de las plantas de MTBE y de TAME los modelos que se emplearon para la simulación fueron los siguientes:

• PARA LA PLANTA DE MTBE.

BLOQUE	MODELO	NOMBRE
02-C-101	HEATER	Pre calentador de la mezcla de carga al reactor principal.
02-C-102	HEATER	Rehervidor de la columna catalítica
02-C-103	HEATX	Intercambiador alimentación/fondo de la columna catalítica
02-C-104	HEATER	Enfriador de MTBE producto
02-C-105	HEATER	Enfriador de Rafinado
02-C-106	HEATER	Enfriador de Agua tratada
02-J-101	PUMP	Bomba de transferencia de carga al reactor principal
02-J-102	PUMP	Bomba de recirculación del reactor principal
02-J-103	PUMP	Bomba de reflujo de la columna catalítica
D1	FSPLIT	Divisor de agua tratada
D2	FSPLIT	Divisor del efluente del reactor principal
D3	FSPLIT	Divisor de metanol

BLOQUE	MODELO	NOMBRE
M2	MIXER	Mezclador carga/reflujo del reactor principal
M3	MIXER	Mezclador de la mezcla de carga al reactor principal
V1	VALVE	Válvula de la corriente de alimentación de agua tratada
V2	VALVE	Válvula de la corriente efluente del reactor principal
02-F-101	DECANTER	Decantador de la columna de lavado de la corriente de C ₄ 's
02-F-102	DECANTER	Decantador de la columna catalítica
02-F-103	DECANTER	Decantador de la columna de lavado de refinado
02-E-101	EXTRACT	Columna de lavado de la corriente de C ₄ 's
02-E-102	RADFRAC	Columna catalítica
02-E-103	EXTRACT	Columna de lavado de refinado
02-D-101	RPLUG	Reactor principal
02-CA-101	HEATER	Enfriador con aire de la corriente de recirculación del reactor principal
02-CA-102	HEATER	Enfriador con aire de la corriente de condensación de la columna catalítica

• PARA LA PLANTA DE TAME

BLOQUE	MODELO	NOMBRE
02-C-201	HEATER	Pre calentador de la carga al reactor 02-D-201
02-C-202	HEATER	Enfriador de la mezcla de carga al reactor 02-D-202
02-C-203	HEATER	Rehervidor de la columna Fraccionadora 02-E-202
02-C-204	HEATX	Pre calentador del efluente del reactor 02-D-202
02-C-205	HEATX	Intercambiador de la alimentación / la corriente de fondo, de la columna 02-E-202
02-C-206	HEATER	Enfriador de TAME producto.
02-C-207	HEATER	Pre calentador de la carga al Tercer Reactor
02-C-208	HEATER	Enfriador del efluente del Tercer Reactor
02-C-209	HEATX	Enfriador del agua recuperada en la columna 02-E-204
02-C-210	HEATER	Enfriador del agua Recirculada
02-C-211	HEATER	Enfriador de Metanol
02-C-212	HEATER	Rehervidor de la columna 02-E-204
02-C-213	HEATER	Rehervidor de la columna 02-E-205
02-C-214	HEATX	Enfriador del corte de Gasolina
02-C-215	HEATER	Enfriador de Gasolina Producto
02-C-216	HEATER	Enfriador del corte de C5

BLOQUE	MODELO	NOMBRE
02-J-201	PUMP	Bomba de transferencia de carga al reactor 02-D-201
02-J-202	PUMP	Bomba de recirculación de la columna 02-E-202
02-J-203	PUMP	Bomba de TAME producto
02-J-204	PUMP	Bomba para el Agua recuperada
02-J-205	PUMP	Bomba para el metanol
02-J-208	PUMP	Bomba de transferencia de carga a la columna 02-E-205
02-J-209	PUMP	Bomba para la gasolina producto
02-J-210	PUMP	Bomba de reflujo de la columna 02-E-205
DT1	FSPLIT	Divisor de la corriente de C5
02-X-201	MIXER	Mezclador de la carga al reactor principal
TM1	MIXER	Mezclador Efluente del reactor principal/corriente de TAA
MT1	MIXER	Mezclador de la corriente de fondo de la columna 02-E-204
VT5	MIXER	Mezclador de la carga agua/metanol de la columna 02-E-204
VT1	VALVE	Válvula de la mezcla a la columna 02-E-205
VT3	VALVE	Válvula de la corriente de productos del reactor 02-D-202
VT4	VALVE	Válvula de la corriente de productos del reactor 02-D-203
VT5	VALVE	Válvula de la corriente de Refinado de la columna 02-E-203
02-F-201	DECANTER	Decantador de la columna de lavado 02-E-201
02-F-202	DECANTER	Decantador de la columna Fraccionadora 02-E-202
02-F-203	DECANTER	Decantador de la columna de lavado 02-E-203
02-F-204	MIXER	Mezclador de las corrientes de metanol
02-F-208	DECANTER	Decantador de la carga a la columna 02-E-205
02-F-209	DECANTER	Decantador de la columna 02-E-205
02-E-201	EXTRACT	Columna de lavado de la corriente de C ₅ 's
02-E-202	RADFRAC	Columna Fraccionadora
02-E-203	EXTRACT	Columna de lavado de refinado
02-E-204	RADFRAC	Columna Recuperadora de Metanol y Agua
02-E-205	RADFRAC	Columna Depentanizadora
02-D-201	RPLUG	Reactor Principal
02-D-202	RPLUG	Reactor de Terminado
02-D-203	RPLUG	Tercer Reactor

BLOQUE	MODELO	NOMBRE
02-CA-201	HEATER	Soloaire de condensación de la columna 02-E-202
02-CA-202	HEATER	Soloaire de Enfriamiento de la corriente de Metanol
02-CA-203	HEATER	Soloaire de condensación de la columna 02-E-205
02-CA-204	HEATER	Soloaire de Enfriamiento de la corriente de Gasolina a almacenamiento.

Una vez seleccionados los modelos se continuo con el armado del esquema de simulación, de acuerdo con los diagramas de flujo de proceso y con la información de la cinética de las reacciones principales, tanto de MTBE como de TAME. Con los esquemas de las plantas por separado se planteó la necesidad de efectuar los Análisis de Sensibilidad para ubicar las principales operaciones unitarias que forman los cuellos de botella, y establecer los parámetros de operación manipulables que puedan disminuir su efecto; para establecer las propuestas que ayuden a obtener mayor calidad y producción de MTBE y de TAME en la refinería.

Para obtener los Balances de Materia y Energía, se consideraron a las plantas unidas mediante la sección de recuperación de Metanol, como se muestra en la Figura (5).

ESPECIFICACIONES DE LOS EQUIPOS.

Las especificaciones, de los equipos principales, necesarias para llevar a cabo la simulación de los procesos son las siguientes.

<i>EQUIPO</i>	<i>TEMPERATURA (°C)</i>	<i>PRESIÓN (Kg/cm²)</i>
Columna de Lavado 02-E-101	Etapa 1: 38 Etapa 30: 38	Etapa 1: 4.5 Etapa 30: 6.8
Reactor Principal 02-D-101	Entrada: 60 Salida: 75	Entrada: 20.9 Salida: 19.4
Columna Catalítica 02-E-102	Etapa 1: 55 Etapa 60: 144	Etapa 1: 8.1 Etapa 60: 9.6
Columna de Lavado de Refinado 02-E-103	Etapa 1: 38 Etapa 30: 38	Etapa 1: 10.2 Etapa 30: 11.2
Columna Depentanizadora 02-E-205	Etapa 1: 55 Etapa 56: 168	Etapa 1: 3.7 Etapa 56: 4.8
Columna de Lavado 02-E-201	Etapa 1: 38 Etapa 30: 38	Etapa 1: 3.5 Etapa 30: 5.8
Reactor Principal 02-D-201	Entrada: 55 Salida: 80.9	Entrada: 17.3 Salida: 16.0
Reactor de Terminado 02-D-202	Entrada: 55 Salida: 58.3	Entrada: 15.0 Salida: 13.7
Columna Fraccionadora 02-E-202	Etapa 1: 55 Etapa 40: 142	Etapa 1: 4.5 Etapa 40: 5.3
Tercer Reactor 02-D-203	Entrada: 65 Salida: 71.5	Entrada: 13.2 Salida: 11.8
Columna de Lavado de Refinado 02-E-203	Etapa 1: 38 Etapa 30: 38	Etapa 1: 7.6 Etapa 30: 9.4
Columna Recuperadora de Metanol 02-E-204	Etapa 1: 104 Etapa 43: 147	Etapa 1: 4.1 Etapa 43: 4.5

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN.

Los resultados de la simulación se obtienen directamente del simulador en forma gráfica

El modelo empleado para simular los intercambiadores de calor (HEATER) no permite cuantificar los servicios de enfriamiento y/o calentamiento; pero podemos observar, según la simulación de la planta de MTBE, que se requiere menor cantidad de servicios de calentamiento lo que se puede cuantificarse en recuperación de inversión y menos gasto por servicios; el único equipo que requiere mayor cantidad de servicio de agua de enfriamiento es el enfriador de agua tratada 02-E-106, para enfriar el agua de lavado que se utiliza en las columnas de lavado 02-E-101 y 02-E-201, como puede observarse en la Tabla (1).

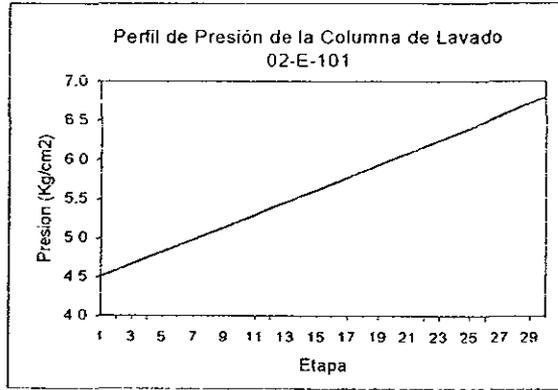
<i>Intercambiador</i>	<i>Carga diseño (MMkcal/hr)</i>	<i>Carga simulación (MMkcal/hr)</i>
02-C-101	0.0	0.0
02-C-102	1.688	1.6880
02-C-103	0.104	0.0050
02-C-104	-0.128	-0.1090
02-C-105	-0.125	-0.0451
02-C-106	-0.511	-0.5478
02-CA-101	-0.509	-0.0226
02-CA-102	-1.831	-1.6717

Tabla 1. Comparación de las cargas de los Intercambiadores.

A continuación se presentan los principales perfiles de presión, temperatura y composición de los diferentes equipos de la planta de MTBE:

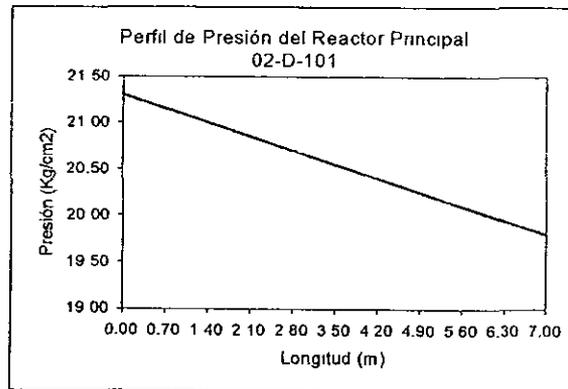
En la Gráfica (1), el perfil de presión de la columna de lavado 02-E-101 es lineal, no presenta ningún cambio de pendiente, debido a que el este tipo de columnas no

tienen un condensador y rehervidor que provoquen cambio alguno en el perfil, y solo se lleva a cabo el equilibrio líquido-líquido entre las corrientes involucradas



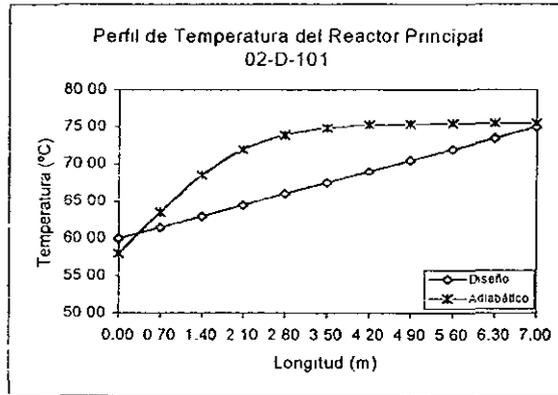
Gráfica 1.

En el reactor principal 02-D-101 el perfil de presión también es lineal (Gráfica 2), ya que en las especificaciones del modelo RPLUG, que tiene el simulador, se especifica la presión de salida o la caída de presión en el reactor y el simulador cuantifica la presión a cada intervalo de longitud del reactor.

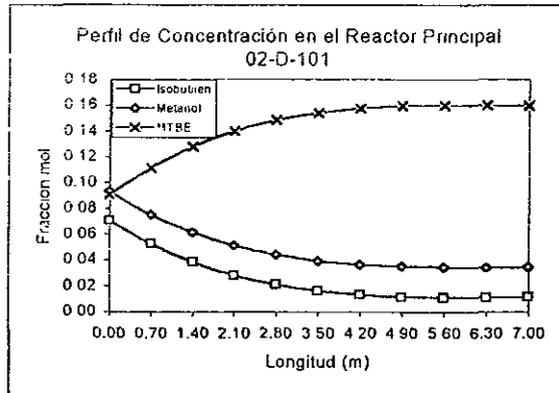


Gráfica 2.

En el perfil de temperatura del reactor principal 02-D-101 (Gráfica 3), con las condiciones de diseño se tiene un perfil lineal y se calcula un calor que se requiere remover del reactor ya sea mediante un sistema de enfriamiento o al medio ambiente. Si se establece un modelo *Adiabático* ($Q_{remover}=0$) se obtiene la misma temperatura a la salida de reactor que la especificada en las condiciones de diseño, así como la misma conversión a MTBE.



Gráfica 3.

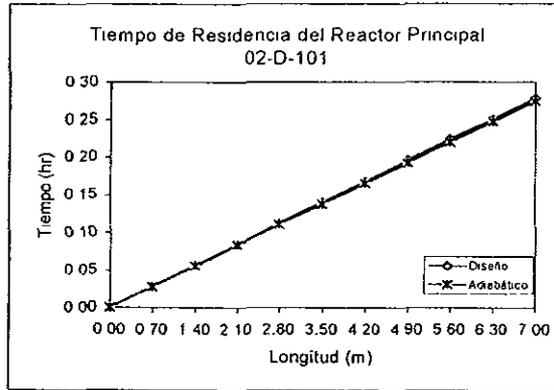


Gráfica 4.

En la Gráfica (4) se observa que la composición de MTBE es constante a partir de los 5 metros de longitud del reactor, de ésta forma la condición de reacción limitada por el equilibrio se cumple, ya que la composición permanece constante; la reacción

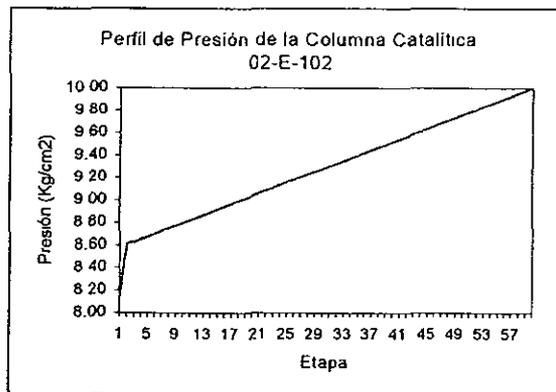
continua en la zona empacada de la columna catalítica 02-E-102, para lograr mayor conversión de MTBE.

En la Gráfica (5), los tiempos de residencia con especificaciones de diseño y adiabáticamente son semejantes, lo que indica que la conversión a MTBE es la misma si se considera que el reactor es adiabático



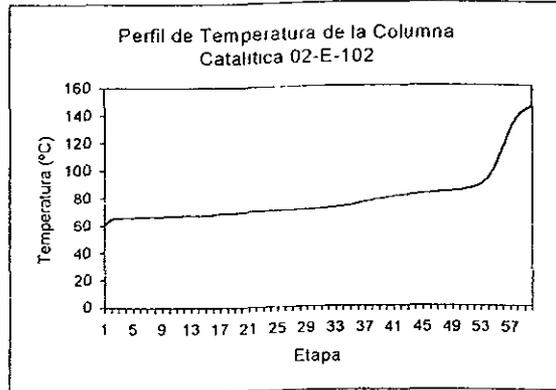
Gráfica 5.

Para modelar la zona de Reacción de la Columna Catalítica se empleó la subrutina RAM5 (Apéndice A) programada en lenguaje FORTRÁN, para evaluar la conversión a MTBE que hay en las etapas empacadas.



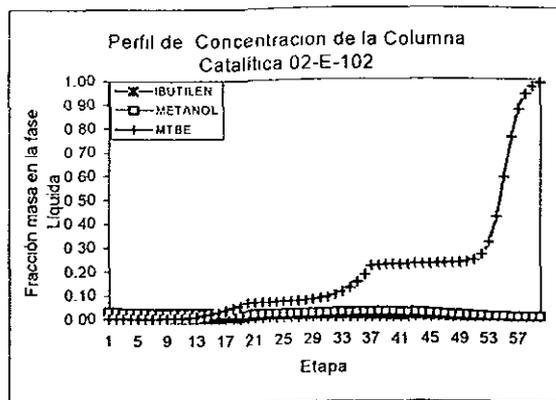
Gráfica 6.

El perfil de presión de la columna catalítica 02-E-102 (Gráfica 6), es lineal el único cambio apreciable se debe a la presencia del condensador (02-CA-102) y del rehervidor (02-C-102), ya que la columna catalítica se simuló de forma acoplada, es decir, se considero al condensador y al rehervidor como la etapa 1 y la 60 de la columna



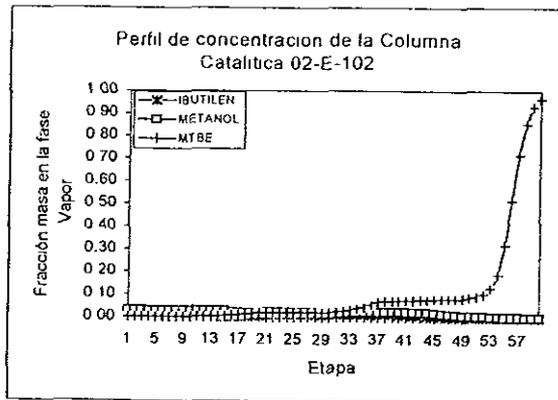
Gráfica 7.

En el caso del perfil de temperatura de la columna catalítica 02-E-102 (Gráfica 7), no se observan cambios fuertes en la trayectoria, esto indica que las condiciones de presión y temperatura de las corrientes de alimentación son semejantes a las de las etapas de la columna



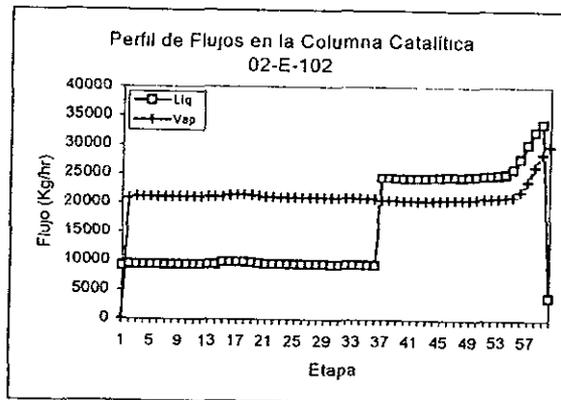
Gráfica 8.

En el perfil de concentración (Gráficas 8 y 9) la cantidad de Isobutileno y de Metanol presentes en la mezcla es mínima en comparación a la cantidad de MTBE y de C₄'s no reaccionantes. El MTBE que se obtiene por fondos de la columna catalítica tiene una pureza superior al 95%



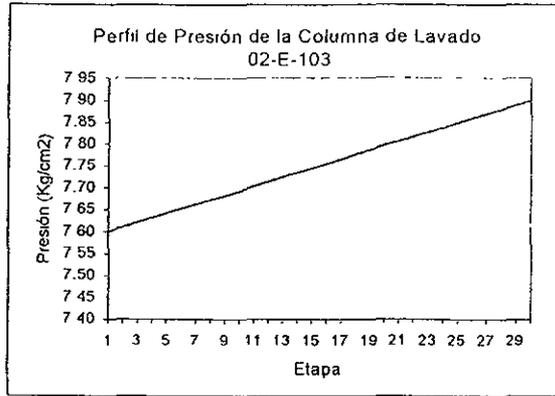
Gráfica 9.

En los flujos de líquido y vapor de la columna catalítica (Gráfica 10), el flujo de vapor permanece constante a lo largo de las etapas 2-54, posteriormente sufre un incremento probablemente debido al reflujo de la columna. El flujo de líquido se incrementa en la etapa 37, ya que en ésta se alimenta la mezcla a separar.



Gráfica 10.

En la Gráfica 11, el perfil de presión de la columna de lavado de refinado 02-E-103 es lineal, no presenta ningún cambio de pendiente debido a que las columnas de lavado no cuenta con condensador ni con rehervidor.

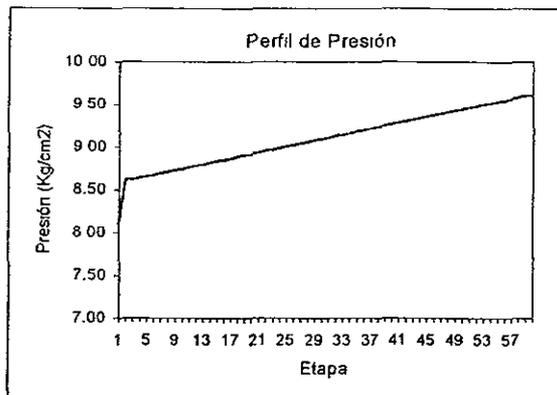


Gráfica 11.

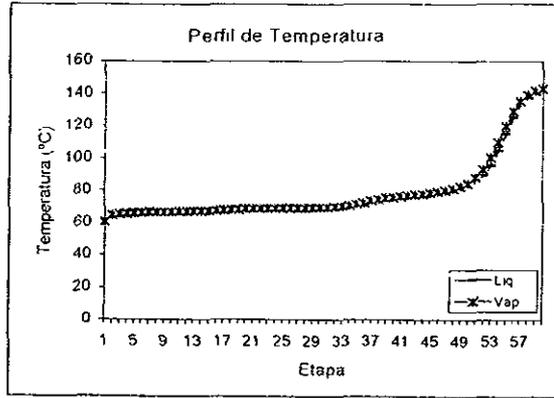
ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

SIMULACIÓN DE LA COLUMNA CATALÍTICA CON EL MODELO RATEFRAC:

Al emplear el modelo de No-Equilibrio **RATEFRAC** para simular la columna catalítica 02-E-102, los perfiles de presión (Gráfica 12) y de temperatura de líquido y vapor (Gráfica 13) tienen el mismo comportamiento que el perfil de presión y de temperatura de la columna modelada con RADFRAC (Gráficas 6 y 7).

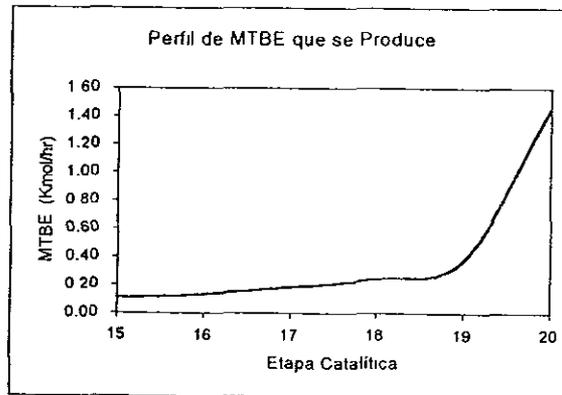


Gráfica 12.



Gráfica 13.

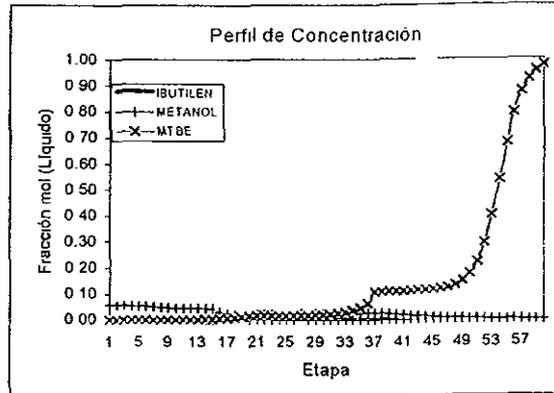
En la Gráfica (14) se muestra en perfil de MTBE que se produce en las etapas empacadas con catalizador de la columna catalítica 02-E-102, observamos que en las etapas 19 y 20 la cantidad de MTBE que se produce es mayor que en las etapas 15 a 18; debido, probablemente, a que la cantidad de reactivos es superior en las etapas inferiores de la columna y a medida que los componentes ascienden por la columna la cantidad de reactivos disminuye.



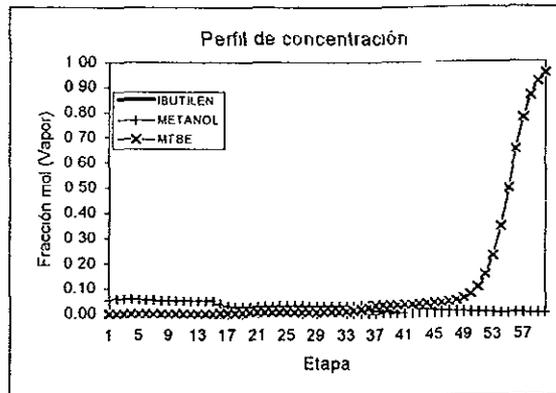
Gráfica 14.

La concentración de reactivos y productos que se muestra en las Gráficas (15) y (16) es igual a los perfiles de concentración obtenidos mediante el modelo RADFRAC (Gráficas 8 y 9); esto puede indicar los problemas de transferencia de masa y de energía tienen poca influencia en el funcionamiento de la columna catalítica 02-E-

102



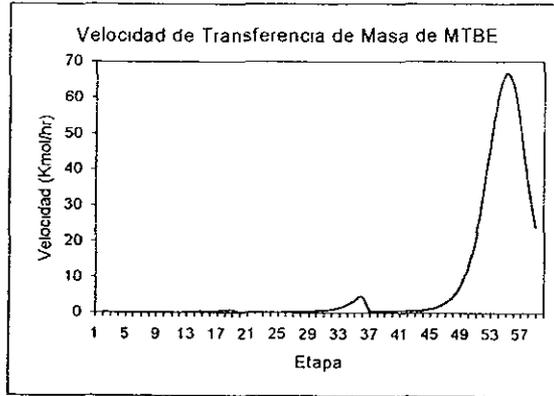
Gráfica 15.



Gráfica 16.

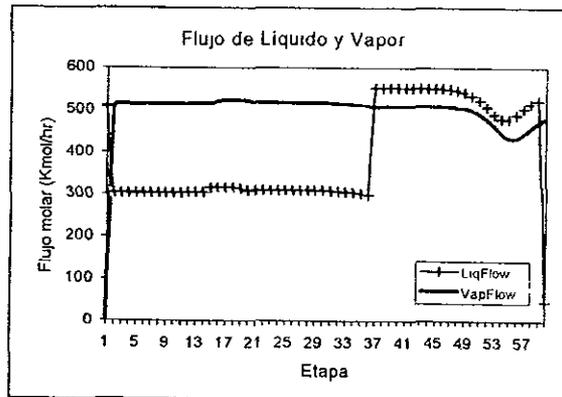
La transferencia de masa de MTBE (Gráfica 17), se incrementa en las etapas de alimentación (15 y 36) y en la zona de agotamiento debido a la gran interacción de las moléculas de C_4 's que se están destilando; la posterior disminución de

transferencia de masa puede ser causada por la extracción de MTBE que se obtiene como producto de fondo en la columna catalítica 02-E-102.



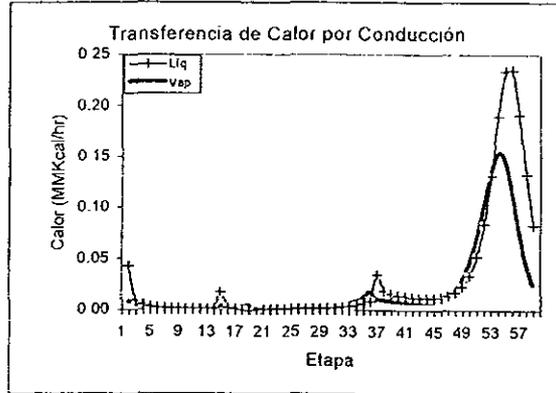
Gráfica 17.

Los flujos de líquido y vapor en ambos modelos (RADFRAC y RATEFRAC) tienen un comportamiento semejante (Gráficas 10 y 18), esto podría indicar poca influencia de los problemas de transferencia, tanto de masa como de energía, en el proceso de la destilación catalítica de MTBE.



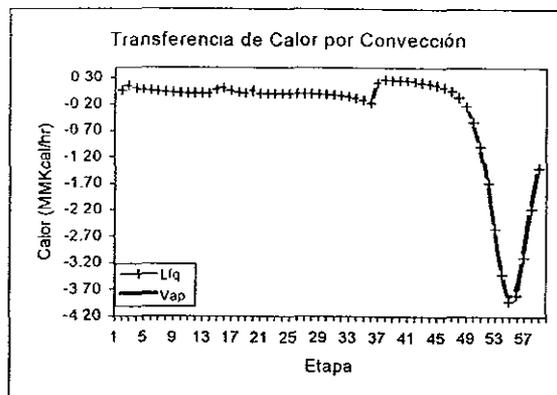
Gráfica 18.

La transferencia de calor por *Conducción* (Gráfica 19), al igual que el perfil de transferencia de masa (Gráfica 17), sufre un incremento en las etapas de alimentación y en la etapa 55, posiblemente por que el reflujo de MTBE (prácticamente puro) cede calor a la corriente de C₄'s para lograr su destilación. Se observa también una separación entre las fases líquida y vapor, debida a que la fase líquida puede transferir (mediante el contacto que tiene con la fase vapor), mayor cantidad de energía a la fase vapor, para que ésta pueda destilarse.



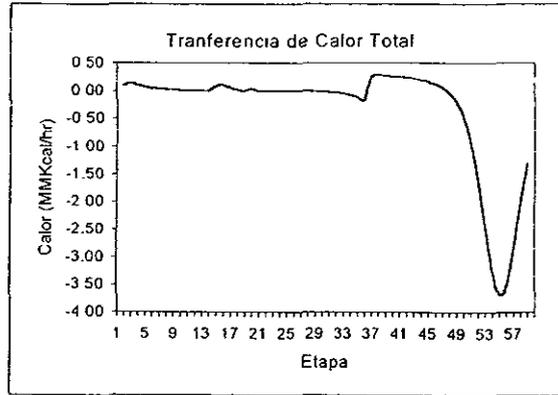
Gráfica 19.

En la transferencia de calor por *Convección* (Gráfica 20), ambas fases pueden transferir la misma cantidad de calor ya que se tiene un mezclado perfecto.



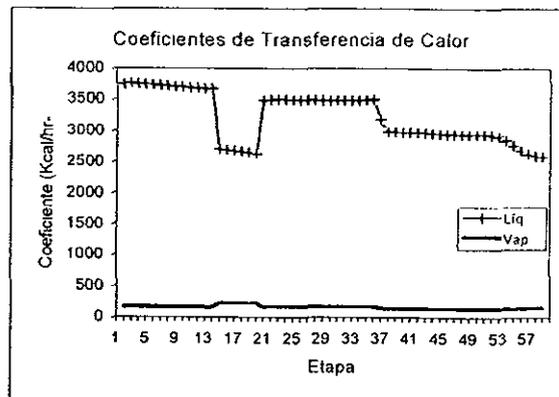
Gráfica 20.

La transferencia de calor total (Gráfica 21) tiene un perfil semejante a la transferencia de calor por convección, por lo que podemos concluir que la transferencia de calor predominante es la *Transferencia de Calor por Convección*



Gráfica 21.

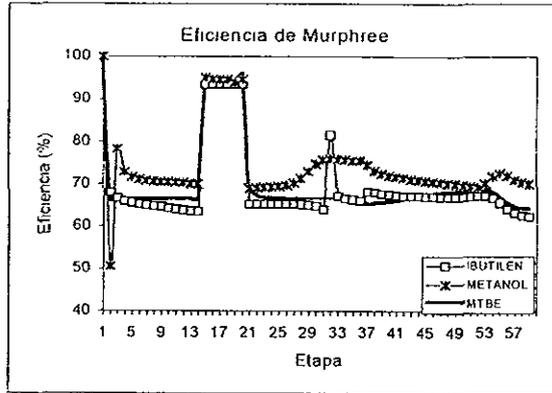
Los coeficientes de transferencia de calor para la fase líquida son mayores debido a que ésta fase cede mayor energía (calor), para pasar a la fase vapor (Gráfica 22)



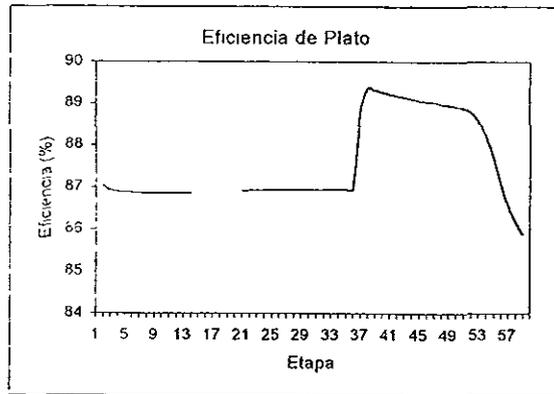
Gráfica 22.

La eficiencia de Murphree representa la composición del vapor que sale y entra a la etapa con respecto a la composición de la fase vapor que se encuentra en equilibrio con el líquido real que sale de la etapa; como podemos observar en la Gráfica (23)

se tiene mayor eficiencia en las etapas de reacción pues están empacadas y como consecuencia hay mayor contacto entre las fases líquida y vapor.



Gráfica 23.



Gráfica 24.

La eficiencia de plato en la columna catalítica 02-E-102 se define en base a la diferencia que habría entre los flujos de salida de líquido y vapor, en equilibrio con los flujos reales; es decir, se espera que los flujos de salida de la etapa, si se alcanzara el equilibrio, fueran mayores que los calculados con el modelo de No-Equilibrio; al no alcanzarse la separación máxima de los componentes la eficiencia de plato es menor al 100%, se logra una mayor eficiencia en el plato de

eficiencia de plato es menor al 100%, se logra una mayor eficiencia en el plato de alimentación de la mezcla MTBE-Metanol-C₄'s y posteriormente decae hasta el 85%, no son eficiencia pequeñas por lo que consideramos que la columna catalítica, al operar con condiciones de diseño, logra obtener la máxima conversión de MTBE (Grafica 24)

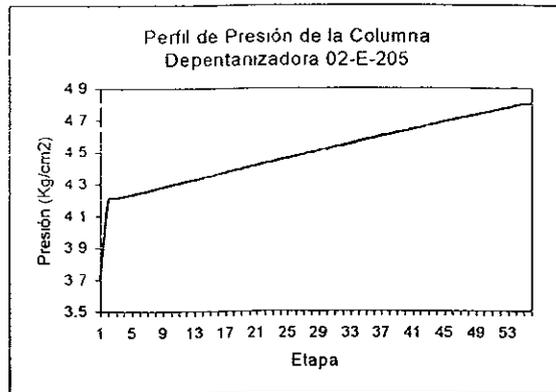
PLANTA DE TAME.

Los resultados de la simulación de la planta de TAME, se obtienen directamente del simulador ASPEN PLUS en forma gráfica.

En la Tabla (2) se comparan las cargas térmicas que se requieren en los diferentes equipos de transferencia de calor en la planta de TAME. Como puede observarse los servicios de calentamiento que se requieren considerando las condiciones de diseño, son equivalentes a los que se obtienen en la simulación de la planta. Los servicios de enfriamiento como son el aire atmosférico, requerido en los aeroenfriadores (soloaires), es ligeramente mayor en la simulación, y la cantidad de agua de enfriamiento es mayor en la simulación que en las condiciones de diseño, ya que con las cantidades establecidas en el diseño de la planta no se lograban reproducir las especificaciones de las corrientes y como consecuencia en las secciones de reacción y de fraccionamiento de la planta de TAME no se obtenían los productos con las características deseadas.

Intercambiador	Carga diseño (MMkcal/hr)	Carga simulación (MMkcal/hr)
02-C-201	0.334	0.4026
02-C-202	-0.504	-0.6260
02-C-203	2.703	2.3000
02-C-204	1.410	1.2095
02-C-205	0.127	0.1200
02-C-206	-0.316	-0.334
02-C-207	0.151	0.0987
02-C-208	-0.492	-0.435
02-C-209	0.597	0.6153
02-C-210	-0.239	-0.199
02-C-211	0.050	0.0481
02-C-212	1.966	1.9582
02-C-213	17.522	17.522
02-C-214	10.158	10.153
02-C-215	-1.559	-1.5931
02-C-216	-----	0.4890
02-CA-201	-3.931	-2.7011
02-CA-202	-0.211	-0.4929
02-CA-203	-13.645	-13.696
02-CA-204	-1.792	-1.1578

Tabla 2 Comparación de las cargas de los Intercambiadores.

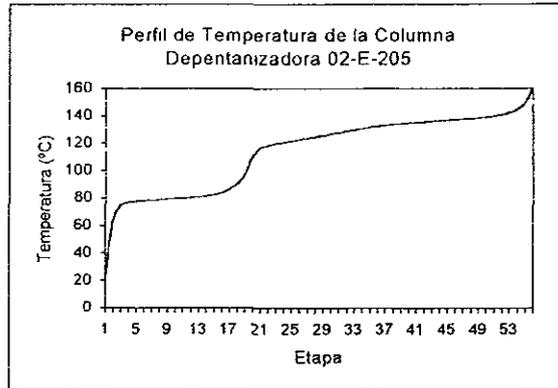


Gráfica 25.

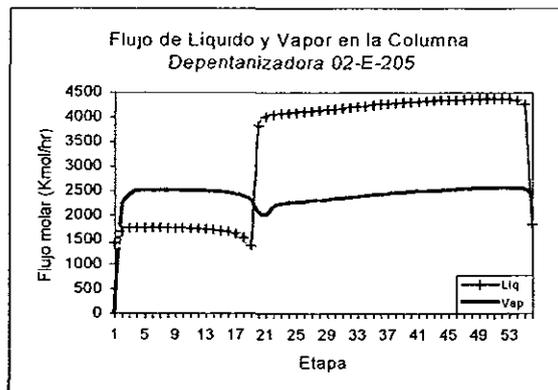
La función principal de la columna depentanizadora 02-E-205 es separar el corte de gasolina y obtener una mezcla de C₅'s rica en Isoamilenos, al simular la columna con las condiciones de diseño se obtiene la separación de la gasolina de la mezcla de C₅'s. El perfil de presión de la columna 02-E-205 es lineal y solo sufre un cambio

de C_5 's. El perfil de presión de la columna 02-E-205 es lineal y solo sufre un cambio de pendiente en la etapa 1, ya que se consideró como una columna acoplada con el condensador y el rehervidor como la etapa 1 y 56 respectivamente (Gráfica 25)

En la Gráfica 26, perfil de temperatura de la columna depentanizadora 02-E-205 se observa un cambio brusco de pendiente en la etapa de alimentación, ya que la temperatura de la corriente de alimentación es superior a la temperatura de la etapa.



Gráfica 26.



Gráfica 27.

En la Gráfica (27) se muestran los perfiles de flujo de líquido y vapor a lo largo de la columna depentanizadora: el flujo de vapor puede considerarse constante a lo largo de la columna y, el flujo de líquido sufre un incremento a partir de la etapa de

alimentación. El líquido que se obtiene por fondo de la columna es el corte de gasolina con pseudocomponentes de 66°API hasta 47.8°API (Tablas 3 y 4)

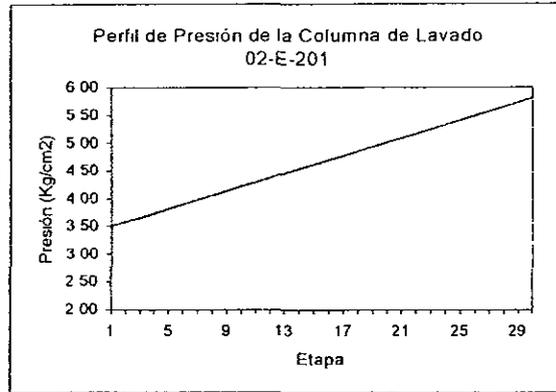
Componente	NBP (°C)	°API	Gravedad Específica	Peso Molecular
PC92C	91.676163	66.232735	0.715612	96.041107
PC106C	106.227364	63.671661	0.725003	107.248291
PC120C	120.291092	61.317890	0.733853	114.615189
PC134C	133.801254	59.160080	0.742159	122.065903
PC148C	147.834915	57.017521	0.750593	130.205322
PC162C	161.859879	54.969379	0.758838	138.759048
PC176C	175.878799	53.008266	0.766903	147.739914
PC190C	189.907761	51.125816	0.774808	157.169937
PC204C	203.923904	49.319534	0.782548	167.044617
PC216C	216.141846	47.801769	0.789172	176.030212

Tabla 3. Pseudocomponentes del corte de gasolina.

Componente	% Mol	% Peso	% Volumen
PC92C	49.887779	42.594807	43.748798
PC106C	12.642193	12.053638	12.219848
PC120C	8.043775	8.196103	8.208913
PC134C	6.859632	7.443899	7.372098
PC148C	5.566595	6.443527	6.309665
PC162C	4.634521	5.717042	5.537450
PC176C	3.933605	5.166470	4.951544
PC190C	3.400636	4.751546	4.507420
PC204C	3.011469	4.472148	4.200417
PC216C	2.019794	3.160820	2.943847

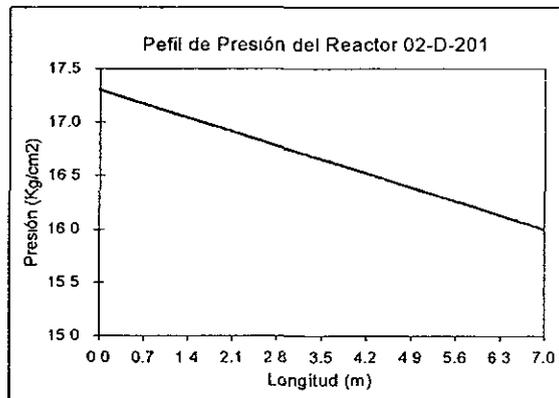
Tabla 4. Composición de los pseudocomponentes.

Las columnas de lavado de la planta de TAME tiene perfiles de Presión semejantes a los perfiles de las columnas de lavado de la planta de MTBE, ya que fueron simuladas con los mismos modelos, es decir considerando columnas de extracción en donde solo hay equilibrio Líquido-Líquido (Gráficas 1, 11, 28 y 43)



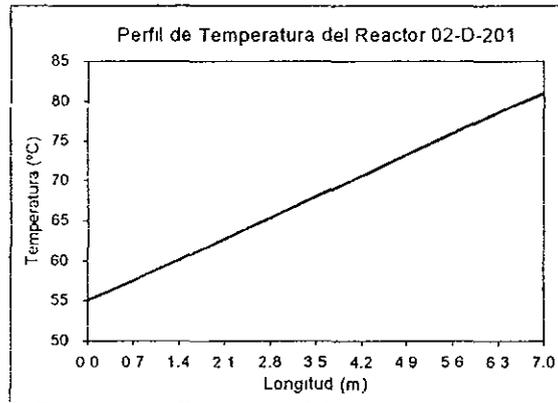
Gráfica 28.

El perfil de presión del reactor principal 02-D-201 de la planta de TAME tiene una tendencia lineal, ya que al modelo empleado en la simulación solo se le especificó la presión de salida y el simulador cuantifico la presión a lo largo del reactor con decrementos de presión constantes, como se muestra en la Gráfica (29)



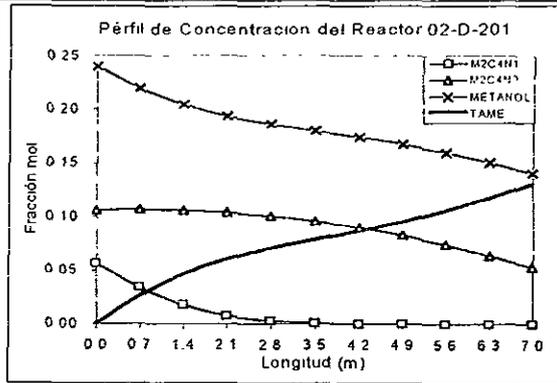
Gráfica 29.

El perfil de temperatura del reactor principal 02-D-201 de la planta de TAME (Gráfica 30), es lineal ya que solo se consideraron las especificaciones de diseño, y al modelo empleado en la simulación del reactor solo se le especifico la temperatura de la corriente de salida, el simulador cuantifica el aumento de temperatura constante a cada intervalo de longitud del reactor. No se elaboró la simulación del reactor en forma *Adiabática*, pero podríamos predecir que tendría un comportamiento semejante al encontrado en el reactor principal (02-D-101) de la planta de MTBE



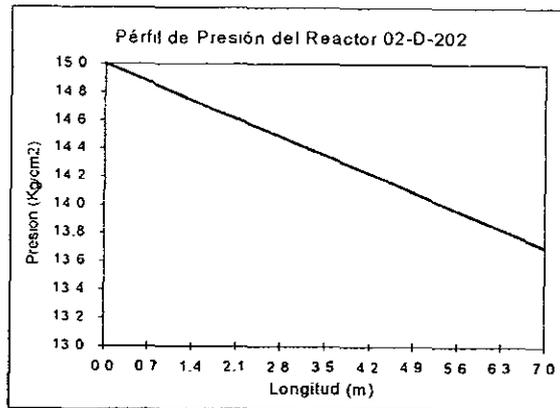
Gráfica 30.

El perfil de concentración del Reactor Principal 02-D-201 (Gráfica 31), indica el consumo casi total del 2-Metil-1-Buteno (2MB1), ya que la reactividad de los Isoamienos es. **2-Metil-1-Buteno > 2-Metil-2-Buteno >> 2-Metil-3-Buteno**; y en la especificacion de la corriente de alimentación de C5's no hay alimentación de 2-Metil-3-Buteno.



Gráfica 31.

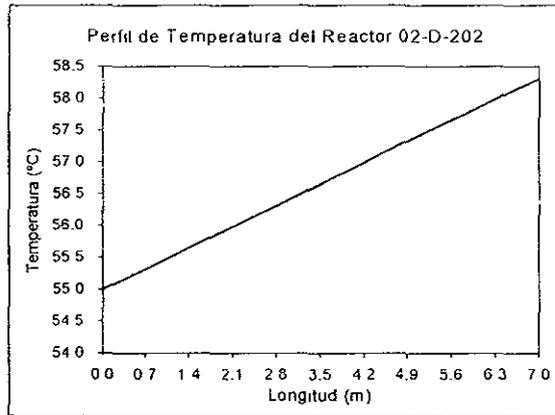
El perfil de presión del reactor de acabado 02-D-202 de la planta de TAME tiene una tendencia lineal, semejante al reactor principal 02-D-201, ya que al modelo empleado en la simulación solo se le especificó la presión de salida y el simulador cuantificó la presión a lo largo del reactor con decrementos de presión constantes, como se muestra en la Gráfica (32).



Gráfica 32.

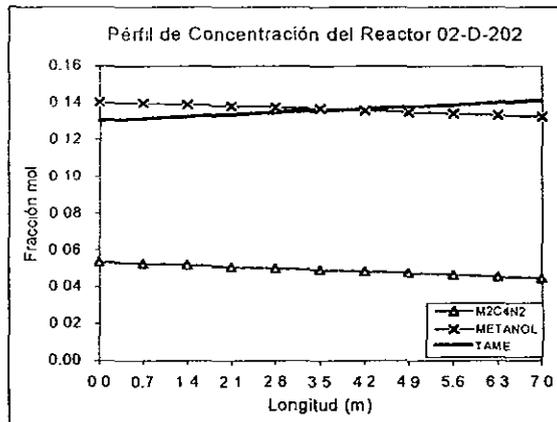
El perfil de temperatura del reactor de acabado 02-D-202 de la planta de TAME (Gráfica 33), es lineal ya que solo se consideraron las especificaciones de diseño, y al modelo empleado en la simulación del reactor solo se le especificó la temperatura de la corriente de salida, el simulador cuantifica el aumento de temperatura

constante a cada intervalo de longitud del reactor. No se elaboró la simulación del reactor en forma *Adiabática*, pero podríamos predecir que tendría un comportamiento semejante al encontrado en el reactor principal (02-D-101) de la planta de MTBE.



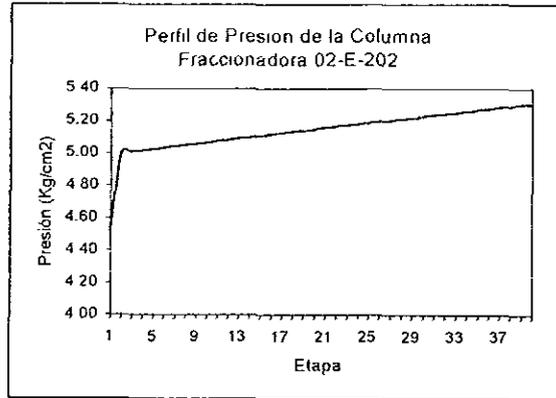
Gráfica 33.

En el perfil de concentración del reactor de acabado 02-D-202, el consumo de 2-Metil-2-Buteno (M2C4N2) es pequeño y la fracción de TAME solo se incrementa de 13 a 14% en fracción mol, como se muestra en la Gráfica (34).



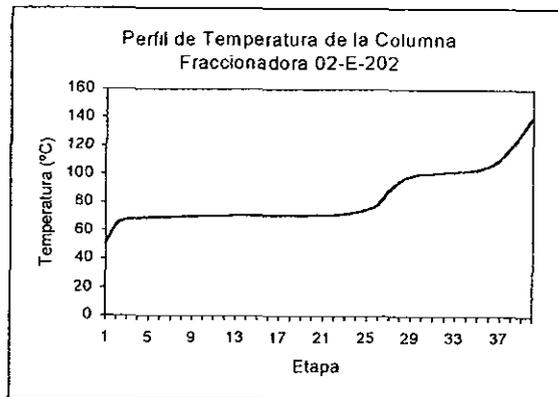
Gráfica 34.

El perfil de presión de la columna fraccionadora 02-E-202 (*Gráfica 35*), de forma semejante a las columnas de destilación modeladas con RADFRAC, solo tiene un cambio de pendiente en la etapa correspondiente al condensador (etapa 1).



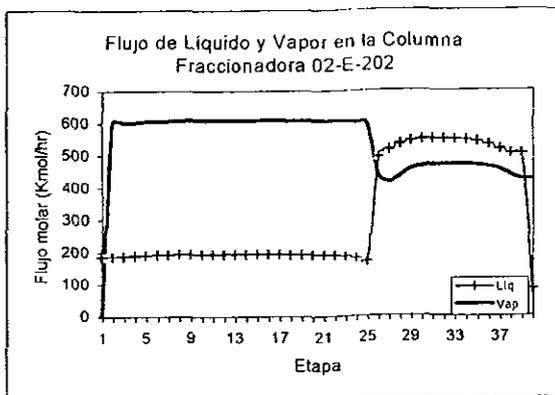
Gráfica 35.

El perfil de temperatura de la columna fraccionadora 02-E-202 (*Gráfica 36*), tiene un cambio de pendiente en la etapa de alimentación de la mezcla a separar, ya que la temperatura de la corriente de alimentación es mayor que la temperatura de la etapa



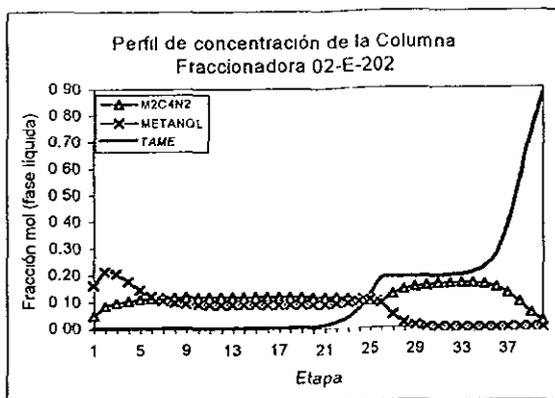
Gráfica 36.

Los flujos de líquido y de vapor en la columna fraccionadora 02-E-202, indican una mayor proporción de vapor (componentes con volatilidad mayor) en las etapas 2 a 26, etapas de rectificación, y posteriormente en la zona de agotamiento los flujos de vapor y de líquido tienen valores muy cercanos (Gráfica 37)

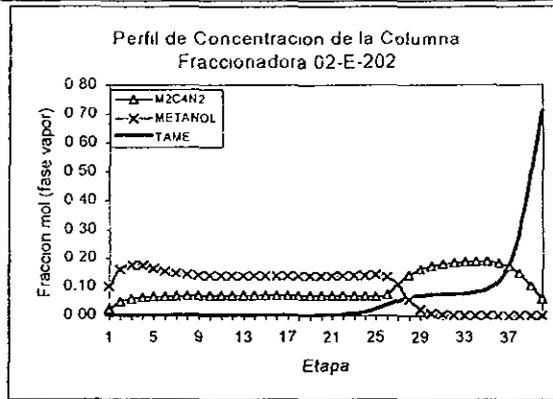


Gráfica 37

En los perfiles de concentración de la columna fraccionadora 02-E-202 de la planta de TAME (Gráficas 38 y 39) se observa que la separación de la mezcla es rica en TAME, mayor al 88% (corriente de fondo T33), y que prácticamente el Metanol y el isoamileno M2C4N2 no están presentes en la corriente de fondos de la columna.

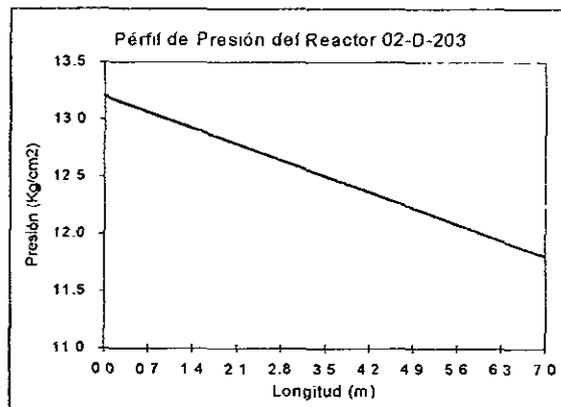


Gráfica 38.



Gráfica 39.

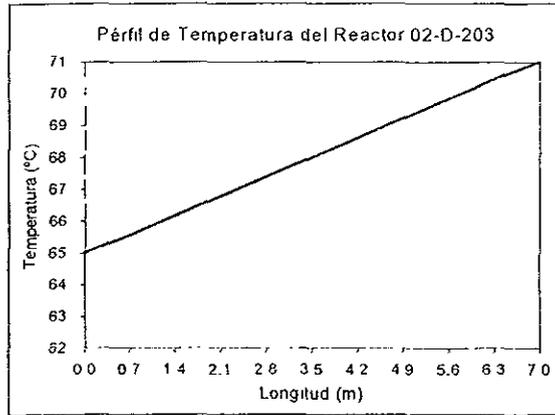
El perfil de presión del tercer reactor 02-D-203 de la planta de TAME tiene una tendencia lineal, semejante a los reactores 02-D-201 y 02-D-202, ya que al modelo empleado en la simulación solo se le especificó la presión de salida y el simulador cuantificó la presión a lo largo del reactor con decrementos de presión constantes, como se muestra en la Gráfica (40).



Gráfica 40.

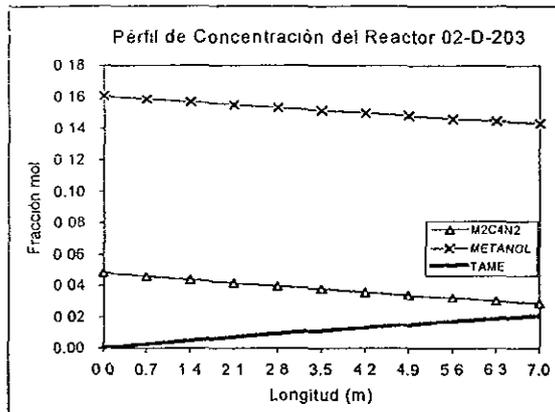
El perfil de temperatura del tercer reactor 02-D-203 de la planta de TAME (Gráfica 41), es lineal (semejante a los perfiles de temperatura de los reactores 02-D-201 y 02-D-202), ya que solo se consideraron las especificaciones de diseño, y al modelo empleado en la simulación del reactor solo se le especificó la temperatura de la

corriente de salida, el simulador cuantifica el aumento de temperatura constante a cada intervalo de longitud del reactor



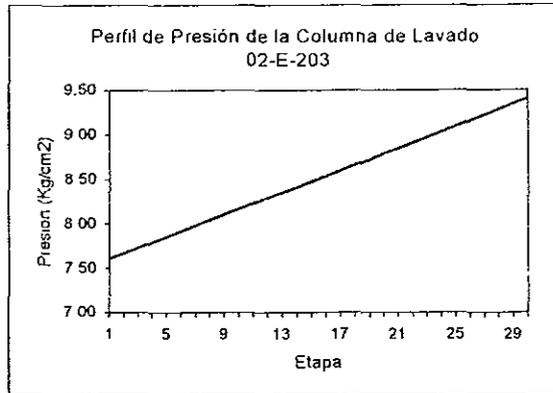
Gráfica 41.

El perfil de concentración del Tercer Reactor 02-D-203 (Gráfica 42), establece que la conversión a TAME solo depende de la cantidad del isoamileno M2C4N2 contenida en la corriente de alimentación (corriente T40) y la reacción no depende del equilibrio químico, ni de un exceso de metanol.



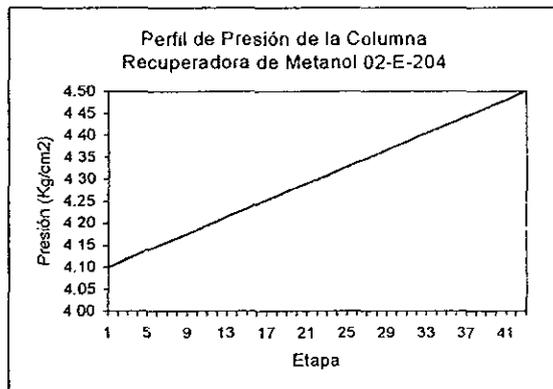
Gráfica 42.

El perfil de presión de la columna de lavado de refinado 02-E-2'3 de la planta de TAME es semejante a los perfiles de presión de las columnas de lavado de la planta de MTBE, ya que fueron simuladas con los mismos modelos, es decir considerando columnas de extracción en donde solo hay equilibrio Líquido-Líquido (Gráfica 43)



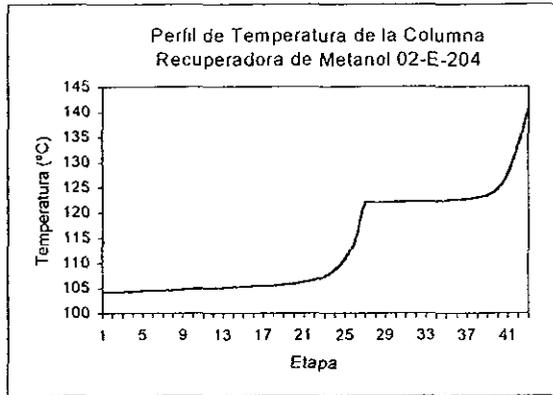
Gráfica 43.

El perfil de presión de la columna recuperadora de metanol 02-E-204 (Gráfica 44), no presenta cambio de pendiente debido a que esta columna no cuenta con un condensador como etapa 1.



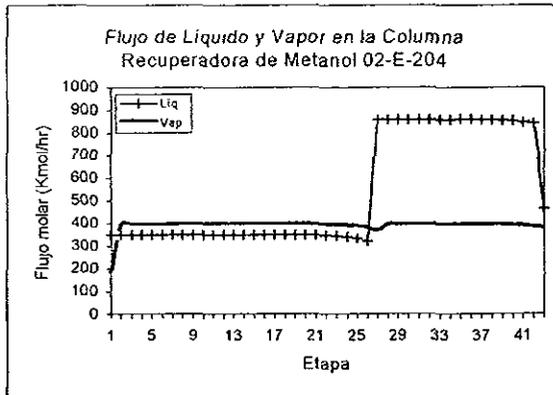
Gráfica 44.

El perfil de temperatura de la columna recuperadora de metanol 02-E-204 (Gráfica 45), tiene un cambio de pendiente en la etapa de alimentación de la mezcla a separar, ya que la temperatura de la corriente de alimentación es mayor que la temperatura de la etapa



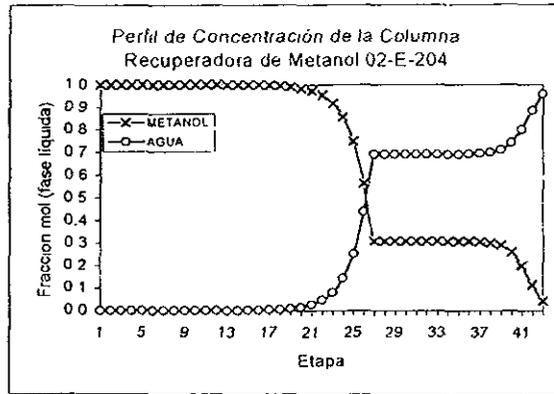
Gráfica 45.

Los flujos de líquido y de vapor en la columna recuperadora de metanol 02-E-204, (Gráfica 46) indican la separación casi nula del metanol y el agua hasta la etapa de alimentación 27, posteriormente en la zona de agotamiento se logra romper el azeotropo por lo que el flujo de líquido aumenta, destilando metanol.

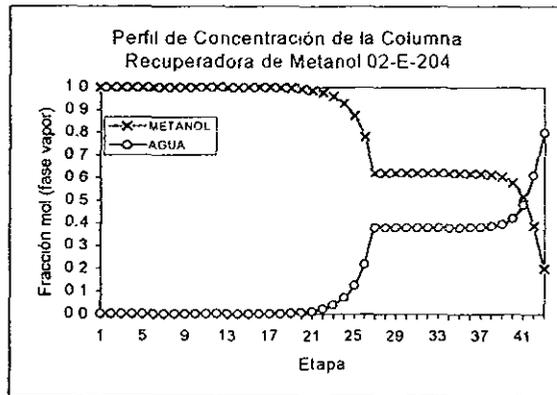


Gráfica 46.

En las Gráficas (47) y (48) del perfil de concentración de la columna recuperadora de metanol se observa que se logra obtener al Metanol libre de Agua, es decir se logra romper el azeotropo, y de ésta forma reciclar ambas corrientes a las plantas de MTBE y TAME



Gráfica 47.



Gráfica 48.

CAPÍTULO VI

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD.

La simulación de procesos nos permite ubicar los principales cuello de botella y mediante los *análisis de sensibilidad* encontrar las condiciones óptimas a las que se obtiene una producción máxima de MTBE y TAME.

Un Análisis de Sensibilidad es una herramienta que permite visualizar la sensibilidad del proceso a variables de Operación y de Diseño. Los bloques de sensibilidad son usados para generar tablas y/o gráficas de resultados de simulación como función de la variación en corrientes de alimentación, especificaciones de los equipos o de otras variables de entrada. Los resultados que se generan en el reporte pueden ser:

- *Cualquier variable designada a una corriente.*
- *Funciones de las variables de la corriente designada.*

Los análisis de sensibilidad dan información adicional a los resultados del caso base, y no tienen ningún efecto sobre la simulación de éste. Los bloques de sensibilidad con más de una variable generan una columna, en el reporte se genera una tabla para cada combinación de valores. Si se desea hacer análisis para variables por separado, se hacen bloques de sensibilidad independientes para cada variable a analizar.

Los bloques de sensibilidad crean ciclos que pueden ser evaluados una vez para cada columna de la tabla de resultados. El Simulador ASPEN PLUS genera la secuencia de sensibilidad para los bloques automáticamente, pero tiene la opción de que el usuario la cambie según las necesidades del problema.

Para definir un Análisis de Sensibilidad se requiere:

- Identificar las variables de la corriente de salida (variable a conocer el efecto del análisis).
- Identificar las variables a manipular.
- Definir lo que se desea tabular en los resultados.

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD EN LAS PLANTAS DE MTBE Y DE TAME.

Mediante este análisis se ubicaron los principales cuellos de botella en ambas plantas. En la planta de MTBE los equipos que forman los principales cuellos de botella son la Columna Catalítica 02-E-102 y el Reactor Principal 02-D-101. En la Tabla (1) se presentan los principales parámetros manipulables de la planta de MTBE.

EQUIPO	PARÁMETRO A MANIPULAR.
Reactor Principal 02-D-101	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (Isotérmico) • Flujo de Isobutileno (corriente 1) • Flujo de Metanol (corriente 9) • Reflujo de la corriente 14 • Longitud
Columna Catalítica 02-E-102	<ul style="list-style-type: none"> • La etapa de alimentación de Metanol • Flujo de Metanol (corriente 8) • La relación de reflujo • Calor del Rehevridor (Q_N)

Tabla 1. Parámetros a manipular en la planta de MTBE.

En la planta de TAME los equipos que forman los principales cuellos de botella son: los Reactores 02-D-201, 02-D-202 y 02-D-203; la Columna Fraccionadora de TAME 02-E-202; la Columna Depentanizadora 02-D-205, y la Columna Recuperadora de Metanol 02-E-204. En la Tabla (2) se presentan los principales parámetros manipulables de la planta de TAME:

EQUIPO	PARÁMETRO A MANIPULAR:
Reactores: 02-D-201, 02-D-202, 02-D-203 (individualmente)	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura • Longitud • Flujo de Metanol (corr. T22)
Columna Fraccionadora de TAME 02-E-202	<ul style="list-style-type: none"> • La relación de reflujo • Calor del Rehervidor (Q_N)
Columna Recuperadora de Metanol 02-E-204	<ul style="list-style-type: none"> • La relación de reflujo • Calor del Rehervidor (Q_N)
Columna Depentanizadora 02-E- 205	<ul style="list-style-type: none"> • La relación de reflujo • Calor del Rehervidor (Q_N)

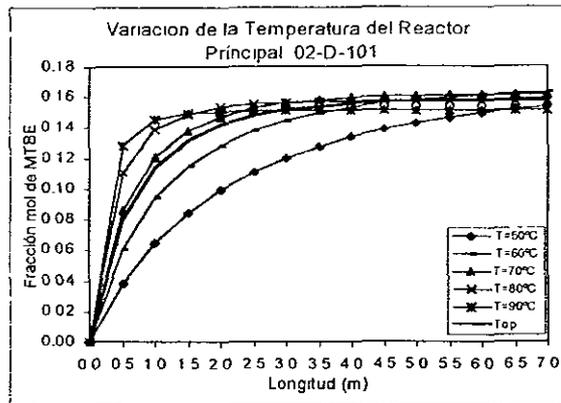
Tabla 2. Parámetros a manipular en la planta de TAME.

RESULTADOS DEL ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD EN LA PLANTA DE MTBE.

- En el Reactor Principal 02-D-101.

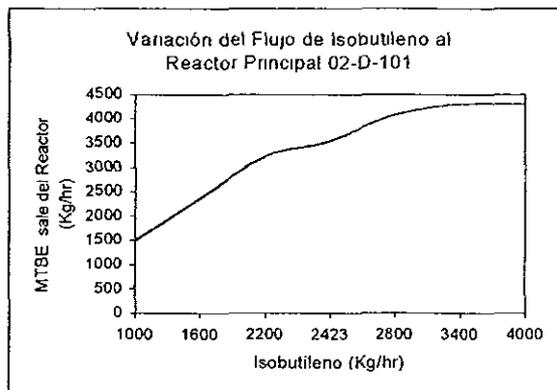
Al variar la temperatura del Reactor Principal 02-D-101 se logra saber si este equipo es un cuello de botella en el proceso de obtención de MTBE. Mediante la *Gráfica (1)* podemos visualizar que cuando la temperatura del reactor es de 50°C al final del reactor se obtiene una cantidad de MTBE de 14% en fracción mol y si el reactor opera a 90°C la fracción de MTBE es de 15% mol, con ambos resultados podemos concluir que el Reactor 02-D-101 puede operar en un intervalo de temperatura de 50

a 70 °C, de esta forma se disminuye la carga térmica del intercambiador 02-C-101 y del aire atmosférico del enfriador con aire, soloaire 02-CA-101.



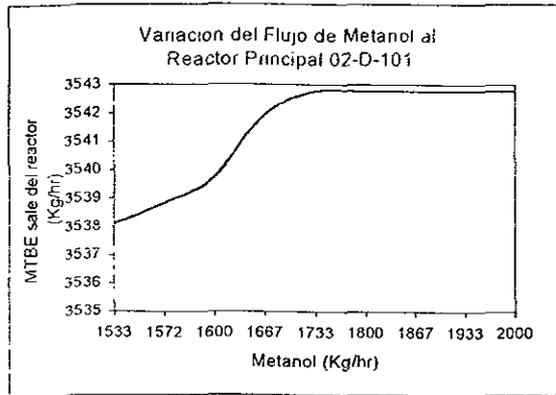
Gráfica 1

En la Gráfica (2), Variación del flujo de Isobutileno al Reactor Principal 02-D-101, es un factor importante en la producción de MTBE; cuando el flujo de Isobutileno es mayor a 3400 kg/hr la cantidad de MTBE que se produce en el reactor principal es la misma. Por lo que, no es necesario manejar cantidades mayores a 3400 kg/hr de Isobutileno, en el reactor principal.

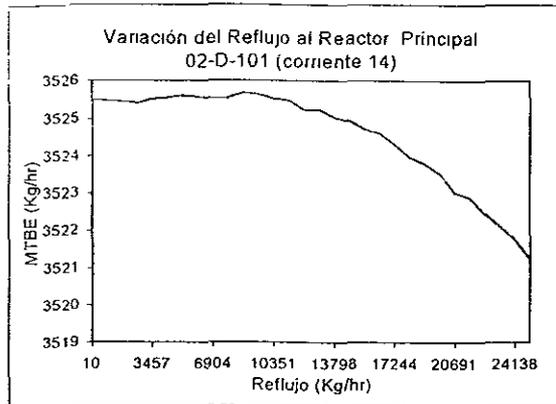


Gráfica 2.

La Gráfica (3), Variación del flujo de Metanol al Reactor Principal 02-D-101, muestra un máximo en la conversión de Isobutileno, hasta de 3542 kg/hr de MTBE, cuando la cantidad de metanol es de 1800 kg/hr. A medida que el flujo de metanol aumenta la cantidad de MTBE que se produce es la misma, por lo que no es recomendable exceder el flujo de metanol a cantidades mayores de 1850 kg/hr, pues su recuperación es costosa, y en caso desfavorable se puede provocar la formación de Dimetil éter (DME) y Agua, y con ello provocar corrosión en los equipos y en las tuberías.



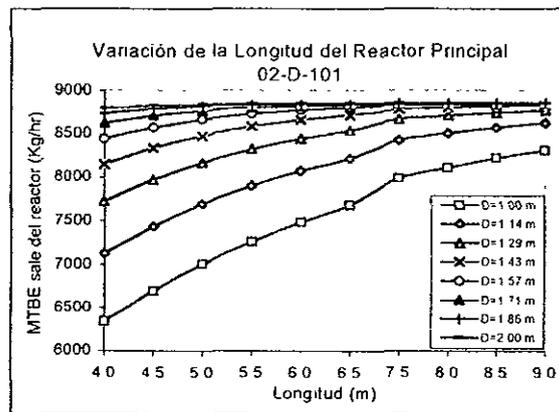
Gráfica 3.



Gráfica 4.

En la *Gráfica (4)*, se observa que la Variación del Reflujo al Reactor Principal 02-D-101 (corriente 14), tiene poca influencia en la formación de MTBE, ya que éste puede aumentarse hasta 24138 kg/hr y la cantidad de MTBE solo disminuye en 5 kg/hr, por lo que es recomendable un reflujo mínimo y de esta forma el intercambiador 02-C-101 y el enfriador con aire, soloaire 02-CA-101, trabajan menos y la cantidad de servicio de vapor de media presión y de aire atmosférico disminuyen.

La variación simultánea de la longitud y del diámetro del Reactor Principal 02-D-101, que se representa en la *Gráfica (5)*, muestra el perfil de concentración de MTBE en cualquier punto del reactor, de esta forma se puede establecer el buen funcionamiento del mismo y del catalizador, ya que se pueden comparar los resultados de simulación con los resultados que se obtienen en la planta; y de esta forma cuantificar cuando la vida del catalizador a decaído.

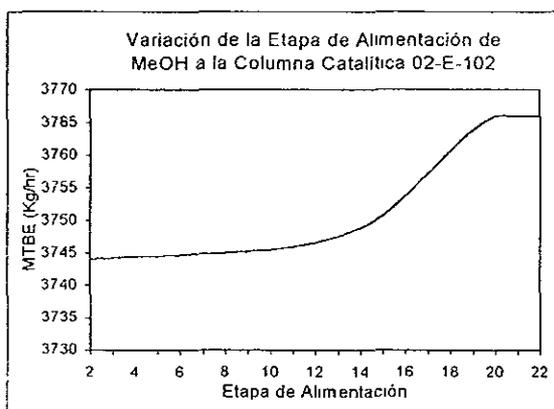


Gráfica 5.

- **En la Columna Catalítica 02-E-102**

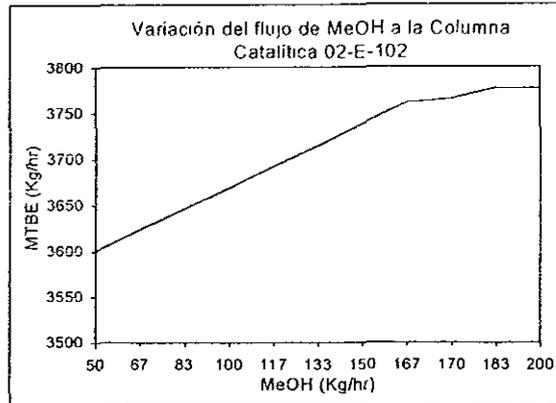
Físicamente la columna catalítica 02-E-102 cuenta con tres alimentaciones de metanol, en la etapa 13 (sobre la zona de reacción), en la 15 y en la 17 (dentro de la

zona de reacción); en la *Gráfica (6)* se consideraron como etapas de alimentación desde la etapa 2 hasta la etapa 22, solo como un ejemplo representativo, observándose que al alimentar el metanol por debajo de la zona de reacción la cantidad de MTBE que se logra obtener es mayor, tal vez porque hay mayor área y tiempo de contacto entre los reactivos



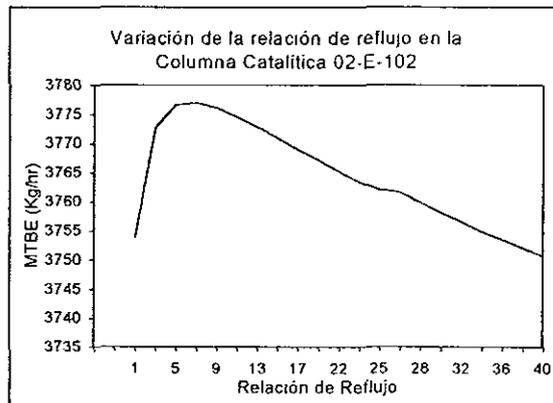
Gráfica 6.

La variación del flujo de metanol a la columna catalítica se muestra en la *Gráfica (7)*, donde se tiene un máximo en la conversión a MTBE cuando el flujo de metanol es de 183 kg/hr. Flujos menores de metanol disminuyen drásticamente la cantidad de MTBE que se produce, y flujos mayores a 183 kg/hr no causan incrementos significativo en la producción de MTBE, tal vez por que la cantidad de isobutileno se agotó, en cambio, si representa un aumento en los costos de recuperación de metanol en la planta de TAME; y en el peor de los casos, exceder la cantidad de metanol en la columna catalítica puede aumentar la cantidad del subproducto DME y de agua, lo que puede provocar corrosión en los equipos y en las tuberías.



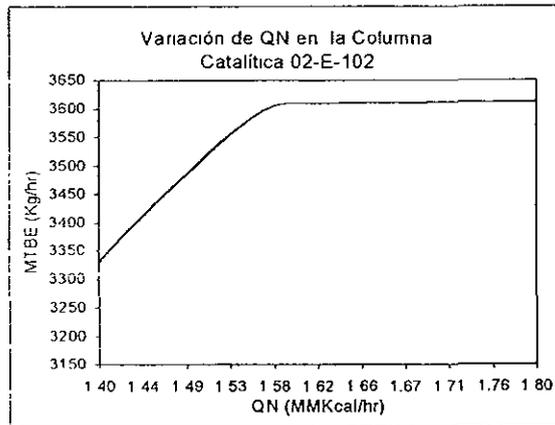
Gráfica 7.

En la Gráfica (8), Variación de la relación de reflujo en la Columna Catalítica 02-E-102, se observa un máximo en la producción de MTBE cuando el reflujo tiene valores entre 5 y 6, la variación en la producción de MTBE es de 25 kg/hr; se recomienda trabajar con relaciones de reflujo inferiores a 6, de esta forma el rehervidor maneja menor carga, se ahorra en servicio de calentamiento, y no se afecta la producción de MTBE.



Gráfica 8.

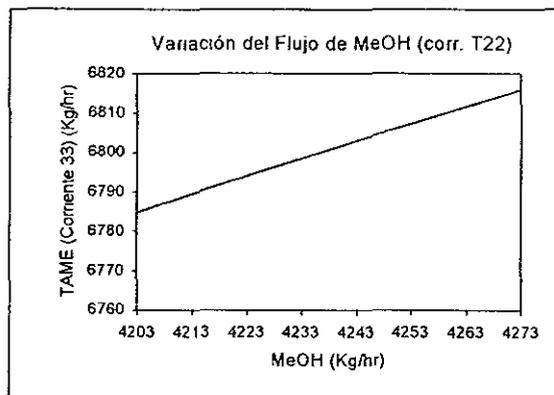
El valor de diseño del flujo de calor en el rehervidor de la columna catalítica es de 1 688 mmkcal/hr, en la *Gráfica (9): Variación de QN en la Columna Catalítica 02-E-102* se observa que a medida que aumentamos este valor la cantidad de MTBE que se produce es la misma, lo que indica que el valor de 1.688 es el límite para lograr la máxima producción, en cambio al disminuirlo también disminuye la producción de MTBE, ya que la temperatura en la zona de rectificación disminuye y los compuestos ligeros, como el metanol y el isobutileno se incorporan a la corriente que se obtiene por el fondo de la columna catalítica; es decir, no llegan a la zona de reacción



Gráfica 9.

RESULTADOS DEL ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD EN LA PLANTA DE TAME.

En la planta de TAME los análisis de sensibilidad que se realizaron fue considerando solamente a los equipos principales, como son los reactores y las columnas de destilación. Se realizó un análisis de sensibilidad variando el flujo de metanol de la corriente T22, para observar la influencia del metanol en la producción de TAME. La variación del flujo de metanol a la unidad TAME puede favorecer la producción de éste, como se muestra en la *Gráfica (10): Variación del Flujo de Metanol (corr. T22)*, ya que se cuenta con un exceso de reactivo metanol. La cantidad de metanol no debe ser exageradamente excesiva pues puede provocar la formación de Dimetil Éter y Agua, y provocar corrosión en los equipos y en las tuberías, además los costos de operación pueden incrementarse por la recuperación del metanol que no reacciona.

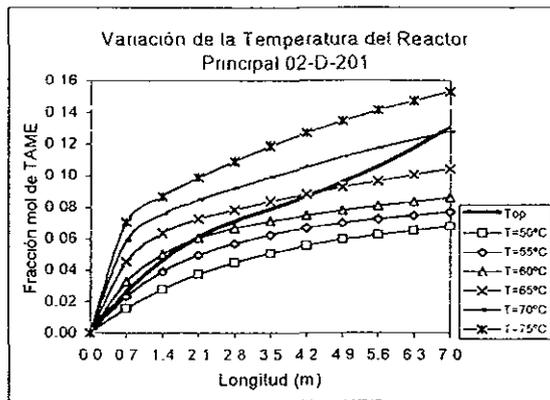


Gráfica 10.

- **En el Reactor Principal 02-D-201.**

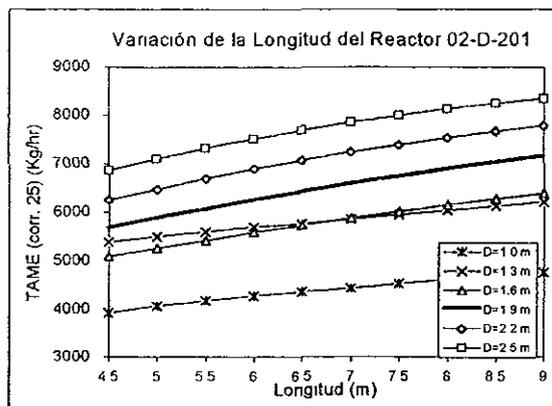
Para el caso del Reactor Principal 02-D-201 la variación de temperatura es fundamental para obtener la cantidad de TAME establecida en el diseño del proceso, pues a temperaturas inferiores a 70°C la cantidad que se obtiene es inferior al 10% fracción mol, esto podría indicar que las reacciones de formación de TAME

son fuertemente dependientes de la cinética de reacción y esta a su vez es dependiente de la temperatura, como se muestra en la *Gráfica (11)*.



Gráfica 11.

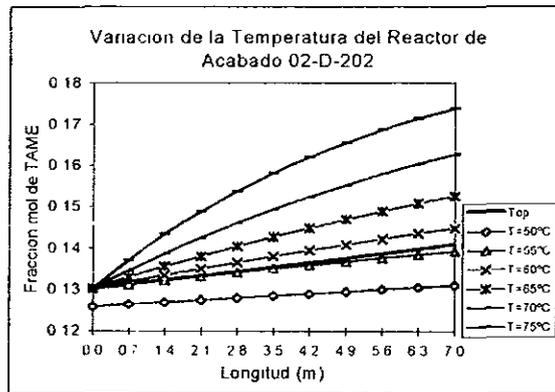
La variación simultánea de la longitud y del diámetro del Reactor Principal 02-D-201, que se representa en la *Gráfica (12)*, muestra el perfil de concentración de TAME en cualquier punto del reactor, de esta forma se puede establecer el buen funcionamiento del mismo y del catalizador, ya que se pueden comparar los resultados de simulación con los resultados que se obtienen en la planta; y de esta forma cuantificar cuando la vida del catalizador a decaído.



Gráfica 12.

- En el Reactor de Acabado 02-D-202.

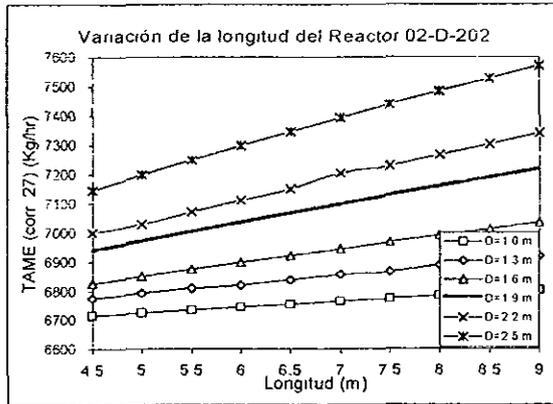
En la Gráfica (13): Variación de la Temperatura del Reactor de Acabado o de Terminado 02-D-202, se observa que el reactor puede operar a temperaturas menores a 70°C y la conversión a TAME no se incrementa apreciablemente ya que la cantidad de isoamilenos reactivos es menor que en el reactor Principal.



Gráfica 13.

La variación simultánea de la longitud y del diámetro del Reactor 02-D-202, que se representa en la Gráfica (14), muestra el perfil de concentración de TAME en cualquier punto, de esta forma se puede establecer el buen funcionamiento del mismo y del catalizador, ya que se pueden comparar los resultados de simulación con los resultados que se obtienen en la planta

Cuando decae la vida del catalizador de el Reactor Principal 02-D-201, el Reactor de Acabado puede contribuir a satisfacer la producción de TAME, ya que la vida útil de su catalizador es mayor; en comparación a la del catalizador del reactor principal, ya que en éste se lleva a cabo la mayor conversión de isoamilenos a TAME.

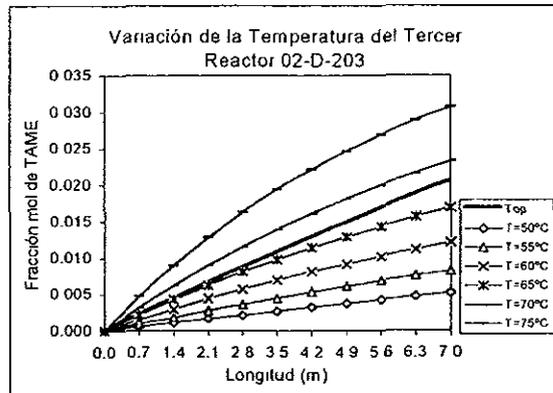


Gráfica 14

- En el Tercer Reactor 02-D-203.

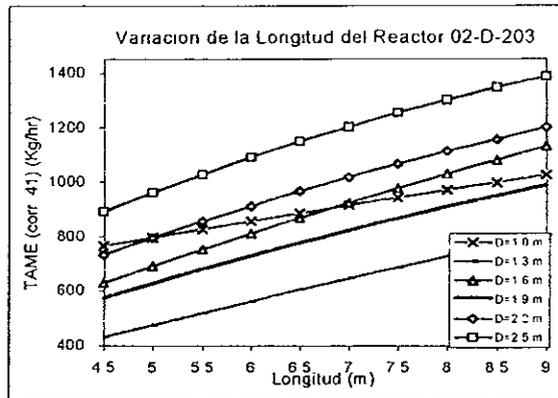
La cantidad de TAME que se logra producir en el Tercer Reactor 02-D-203, no se separa de la mezcla de compuestos ligeros, y se envía a almacenamiento (Corriente T44 del Apéndice B).

En el Tercer Reactor 02-D-203, un incremento en la temperatura no es necesario ya que la cantidad de Isoamilenos es mínima y la conversión a TAME es de solo 3% en fracción mol cuando la temperatura es de 75°C; por lo que la conversión, en este reactor, solo depende de la cantidad de isoamilenos y metanol, como se muestra en la Gráfica (15)



Gráfica 15.

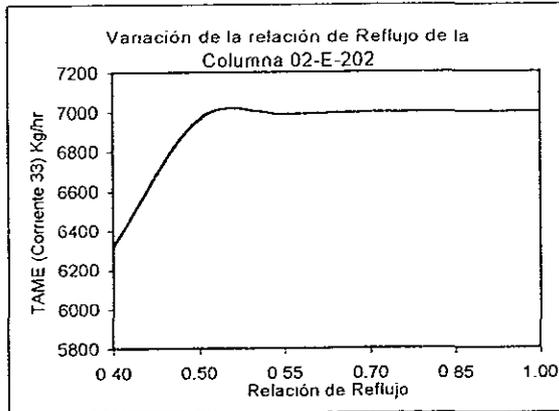
La variación simultánea de la longitud y del diámetro del Tercer Reactor 02-D-203, que se representa en la *Gráfica (16)*, muestra el perfil de concentración de TAME en cualquier punto del reactor, de esta forma se puede establecer el buen funcionamiento del mismo y del catalizador.



Gráfica 16.

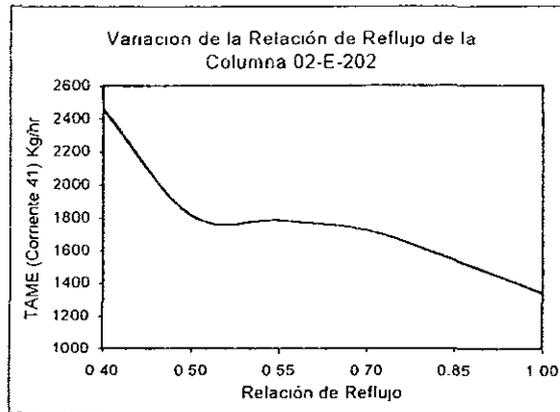
- **En la Columna de Fraccionamiento 02-E-202.**

Al aumentar el reflujo de la Columna de Fraccionamiento 02-E-202 se obtiene un incremento en la producción de TAME (en la corriente T33) hasta un valor constante, que en este caso es la cantidad de TAME que se produce en los reactores 02-D-201 y 02-D-202; por lo que no es necesario tener relaciones de reflujo superiores a 0,55, como se observa en la *Gráfica (17)*



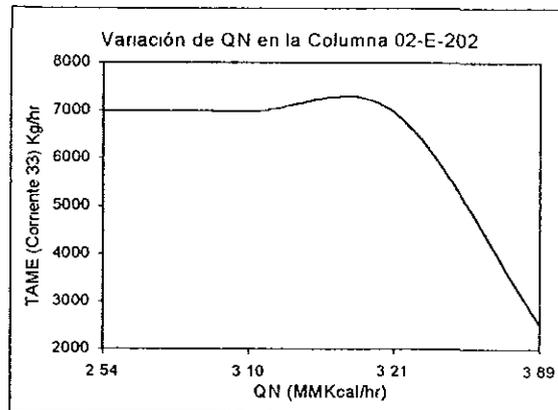
Gráfica 17.

En la Gráfica (18): *Variación de la relación de Reflujo de la Columna 02-E-202*, se muestra la influencia que tiene la relación de reflujo de la columna de Fraccionamiento 02-E-202 en la producción de TAME en la corriente T44, en este caso cuando la relación de reflujo es pequeña la cantidad de TAME es de 2450 kg/hr, hay una zona de valor constante en la producción (1800 kg/hr) y posteriormente decae hasta 1400 kg/hr de TAME. El hecho de tener un flujo de 2450 kg/hr indica que los isoamilenos que no reaccionaron en los reactores 02-D-201 y 02-D-202 y que pudiera llevar la corriente T33, se están destilando y enviando a la sección del Tercer Reactor 02-D-203 para producir una mayor cantidad de TAME que posteriormente se envía a almacenamiento junto con el corte de C5's que no reaccionaron. Se puede establecer como propuesta que se trabaje la Columna de Fraccionamiento 02-E-202 con una relación de reflujo de 0,55, de esta forma se obtiene mayor cantidad de TAME en las corrientes T33 y T44.

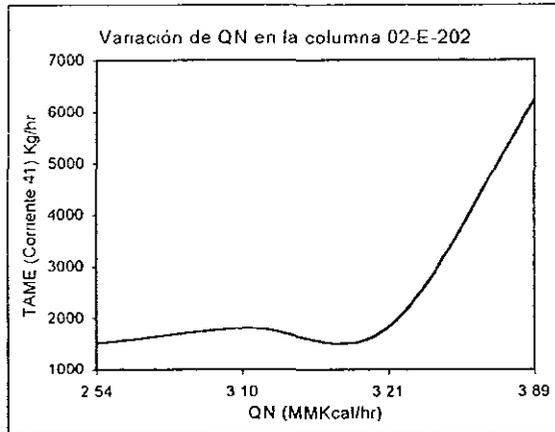


Gráfica 18.

El caso contrario se observa al aumentar el calor del rehedidor de la columna 02-E-202, en donde al aumentar la energía suministrada se destila TAME y como consecuencia la cantidad de TAME en la corriente T33 disminuye y en la corriente T41 aumenta (Gráficas 19 y 20)

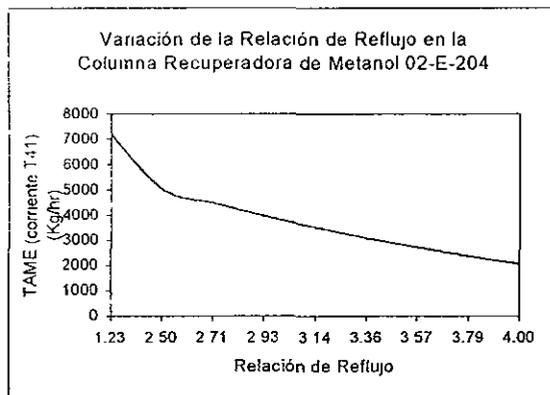


Gráfica 19.

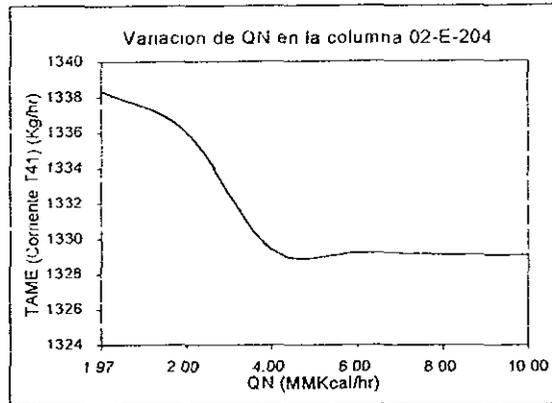


Gráfica 20.

Al variar la relación de Reflujo de la columna recuperadora de Metanol 02-E-204 la cantidad de TAME que se obtiene en el Tercer Reactor disminuye, debido a que la cantidad de metanol que se recupera disminuye (Gráfica 21); en forma semejante al aumentar el calor del rehervidor la cantidad de TAME en la corriente T41 disminuye hasta 1348 kg/hr (Gráfica 22).

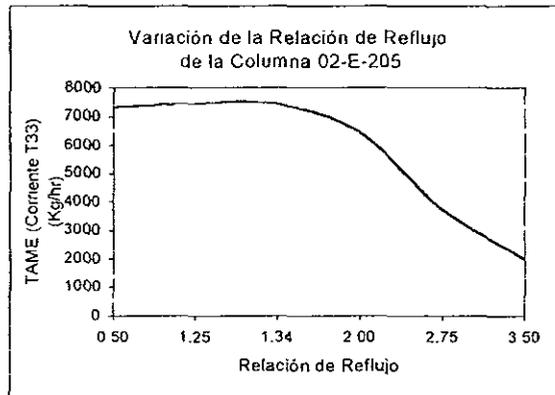


Gráfica 21.



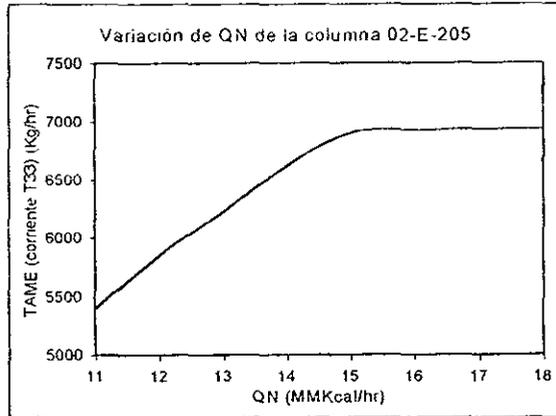
Gráfica 22.

La variación de la Relación de Reflujo en la Columna Depentanizadora 02-E-205 permite obtener un máximo de producción de TAME en la corriente T33, cuando su valor es de 1.34 (Gráfica 23).

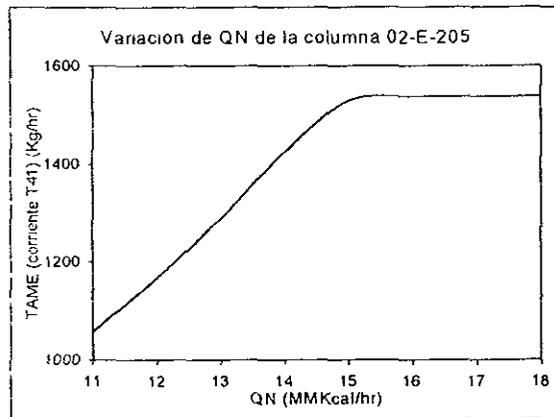


Gráfica 23.

La variación de calor del rehervidor en la columna también genera un máximo de producción de TAME en la corriente T33 y en la T41, por tener mayor cantidad de Isoamilenos (Gráficas 24 y 25).



Gráfica 24.



Gráfica 25.

CAPÍTULO VII

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

Las tendencias en el mundo sobre el consumo de gasolinas se están orientando hacia una mayor eficiencia de los motores de combustión interna y de esta manera disminuir las emisiones de contaminantes. Las nuevas reglamentaciones en las especificaciones de los combustibles se han proyectado para mejorar y controlar la calidad del aire e impactarán notablemente en la forma de elaborar las gasolinas; así los contenidos de hidrocarburos aromáticos, olefinas ligeras y butanos, tendrán que limitarse y/o ser sustituidos por otros cuyas emisiones sean inocuas para la salud. Tal es el caso de las isoparafinas, de los oxicompuestos: MTBE, TAME, ETBE, METANOL y ETANOL, así como hidrocarburos ramificados.

En México se cuenta con procesos de innovación tecnológica que permiten obtener oxicompuestos, tal es el caso de las plantas de MTBE y de TAME ubicadas en diferentes Refinerías, las cuales proporcionan un bajo contenido de olefinas a las gasolinas y como consecuencia se incrementa el nivel de octano de las mismas.

Al emplear un simulador de Procesos, como el ASPEN PLUS, se pueden determinar las condiciones óptimas de operación de una planta. La simulación de Procesos es una herramienta útil en la operación de las plantas, ya que teniendo el modelo del proceso elaborado en el simulador, se puede predecir el funcionamiento de los equipos y las características de los productos que se obtengan físicamente en cada punto del proceso.

CONCLUSIONES.

Los aspectos más importantes sobre los resultados obtenidos mediante la Simulación de los procesos y los Análisis de Sensibilidad nos permiten observar las ventajas que ofrecen los Simuladores de Procesos a la industria; así como las respuestas de los procesos a la manipulación de alguna variable en las condiciones de operación de las plantas de MTBE y de TAME

Con la Simulación de Procesos fue posible reproducir las condiciones de diseño y de operación de las plantas de MTBE y de TAME de la refinería de Salina Cruz, Oaxaca; de esta forma, mediante una comparación de los resultados obtenidos, se ubicaron los equipos que funcionan eficientemente.

Mediante los Análisis de Sensibilidad se localizaron los equipos que forman los principales cuellos de botella de las plantas, y se identificó a la variable de operación que los provoca. Los resultados de estos análisis se traducen en las propuestas de cambios en las condiciones de operación de las plantas, que ayudaran a obtener mayor calidad y cantidad de MTBE y de TAME.

La importancia de la Columna Recuperadora de Metanol 02-E-204 radica en disminuir la cantidad de metanol (corriente T60) que se requiere suministrar a los procesos, disminuyendo de esta forma los costos de producción.

Es importante considerar la importancia que representan todos y cada uno de los equipos que integran a las plantas de producción de MTBE y de TAME, como son el Reactor Principal de la planta de MTBE y la Columna Catalítica, de forma semejante son el Reactor Principal y de Acabado de la planta de TAME, la columna Fraccionadora 02-E-202; pero el Tercer Reactor no considero que tenga función alguna ya que la cantidad de TAME que se logra obtener no se recupera en forma libre, se envía a almacenamiento mezclado con los componentes de C₅'s que no reaccionan en el proceso.

RECOMENDACIONES.

Las recomendaciones se hicieron tomando en cuenta los resultados obtenidos en los Análisis de Sensibilidad de los diferentes equipos, en la planta de MTBE se consideraron equipos principales al Reactor Principal 02-D-101 y a la Columna Catalítica 02-E-102; y en la planta de TAME a la Columna Fraccionadora 02-E-202, la Columna Depentanizadora 02-E-205; y los tres reactores 02-D-201, 02-D-202 y 02-D-203.

EN LA PLANTA DE MTBE SE RECOMIENDA:

- Trabajar siempre con un exceso de metanol.
- Que el intervalo de temperatura del Reactor Principal sea entre 60-80 °C
- Disminuir el Reflujo al Reactor Principal (corriente 14AB)
- Trabajar la Columna Catalítica 02-E-102 con una relación de reflujo entre 5-7
- La etapa de alimentación de metanol en la Columna Catalítica se recomienda sea debajo de la zona de reacción (etapas 15 y 17).

EN LA PLANTA DE TAME SE RECOMIENDA:

- Trabajar con un exceso de metanol
- Que la Columna Fraccionadora 02-E-202 trabaje con un suministro de calor menor a 3.5 MMkcal/hr en el rehervidor.
- Que el reflujo de la columna 02-E-202 este entre 0.4 y 0.5
- Trabajar la Columna Depentanizadora 02-E-205 con un suministro de calor mayor a 15 MMkcal/hr.
- Que los intervalos de temperatura de los reactores sea entre 60-80 °C.

Como se observa en las recomendaciones y resultados estos deben ser tomados en cuenta con el fin de reducir los cuellos de botella que fueron detectados a través de los Análisis de Sensibilidad correspondientes, con los cuales se determinaron las mejores condiciones de operación a las cuales se puede obtener la máxima producción de MTBE y de TAME.

BIBLIOGRAFÍA.

1. Institut Francais du Petrole
Operating manual of the MTBE and TAME units of Salina Cruz, Refinery, Mexico.
2. Abufares, Assanousi A
*Thesis for the Degree of Master of Applied Science in Chemical Engineering
Mathematical Modelling and Simulation of a Catalytic Distillation Process using
Speedup & AspenPlus"*
Waterloo, Ontario, Canada, 1993.
- 3 Berg, David Allen
*Thesis for the degree of Doctor of Philosophy
Transport Resistences in MTBE Reactive Distillation Processes"*
Queen's University at Kingston
Kingston, Ontario, Canada, 1993
- 4 Thiel Christian, Sundmacher, Kai and Hoffmann, Ulrich
Chem Eng Sc., Vol 52, No. 6 pp. 993-1005, 1997
- 5 Hauan Steinar, Hertzberg, Terje and Lien, Kristian M.
Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 34 pp. 987-991, 1995
6. Matouq, Mohammed; Tagawa, Tomohiko and Goto, Shigeo
J. Chem. Eng. Japan, Vol. 27 No. 3, pp. 302-306, 1994
7. Il'in, Andrew and Luss, Dan
Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 32, pp. 247-252, 1993

-
8. Arce, Antonio, Blanco, A , Blanco, M., Soto, A and Vidal, I
Can. J Chem. Eng , Vol 72, October, pp. 935-938, 1994
 9. Sola, Lluís; Pericas, M., Cunill, F. and Iborra, M
Ind Eng. Chem. Res , Vol. 33 pp 2578-2583, 1994
 - 10 Bravo, Jose L and Phyhalahti, Antti
Ind. Eng Chem. Res., Vol. 32 pp. 220-2225, 1993
 - 11 Nijhuis, S. A.
Ind Eng Chem Res., Vol. 32 pp. 2767-2774, 1993
 - 12 Izquierdo, José F.; Cunill, F.; Vila, M.; Iborra, M. and Tejero, J.
Ind Eng. Chem. Res , Vol. 33 pp 2830-2835, 1994
 13. Cunill, Fidel, Vila, M , Izquierdo, J. F , Iborra, M and Tejero, J.
Ind Eng Chem. Res , Vol. 32 pp 564-569, 1993
 - 14 Rehfinger, Alwin and Hoffmann, Ulrich
Chem. Eng. Sc. Vol. 45, No. 6, pp. 1605-1617, 1990
 15. Rehfinger, Alwin and Hoffmann, Ulrich
Chem. Eng. Sc. Vol. 45, No. 6, pp. 1619-1626, 1990
 16. Rehfinger, Alwin and Hoffmann, Ulrich
Chem. Eng Technol. Vol. 13, pp. 150-156, 1990
 17. Nikolopoulos, A A ; Oukaci, R.; Goodwin, J. G. and Marcelin, G.
Catalysis Letters, Vol. 27, pp. 149-157, 1994
 18. Lee, Jong Koog; Song, In Kyu and Lee, Wha Young
Catalysis Letters, Vol. 29, pp. 241-248, 1994
-

-
- 19 Ali, A. and Bhatia, S.
Chem Eng J., Vol. 44, pp 97-106, 1990
- 20 Berg, D. A. and Harris, T. J.
Ind Eng. Chem Res., Vol. 32 pp. 2147-2158, 1993
- 21 Ruiz, C. A.; Basualdo, M. S. and Scenna, N. J.
Trans IChemE, Vol 73, Part A, May 1995
- 22 Ladisch, M.; Westgate, P., Hendrickson, R. and Brewer, M.
Ind. Eng Chem Res., Vol 34 pp 811-2816, 1995
- 23 Zhang, T. and Datta, R.
Ind Eng Chem Res, Vol. 34 pp. 730-740, 1995
24. Sundmacher, K and Hoffmann, U.
Chem Eng Technol, Vol. 16, pp. 279-289, 1993
- 25 Oost, Carsten and Hoffmann, Ulrich
Chem. Eng Technol, Vol. 18, pp. 203-209, 1995
- 26 Oost Carsten: Sundmacher, Kai and Hoffmann, Ulrich
Chem. Eng Technol., Vol 18, pp. 110-117, 1995
27. Piccoli, Ricardo L. and Lovisi, Humberto R.
Ind Eng Chem. Res., Vol. 34, pp. 510-515, 1995
28. Rihko, Liisa K : Linnekoski, Juha A. and Krause, A Outi I.
J. Chem. Eng Data, Vol. 39, pp. 700-704, 1994
29. Xu, Xien; Zheng, Yuxiang and Zheng, Guowen
Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 34, pp. 2232-2236, 1995
-

-
30. Oost, Carsten and Hoffmann, Ulrich
Chem. Eng. Sc. Vol. 51, No 3, pp. 329-340, 1996
31. Rihko, Liisa K and Krause, A Outi I
Ind Eng Chem Res., Vol. 34, pp. 1172-1180, 1995
32. Jacobs, Ralph and Krishna, Rajamani
Ind Eng. Chem Res., Vol 32, pp 1706-1709, 1993
33. Yuxiang, Zheng and Xien, Xu
Trans IChemE, Vol. 70, Part A, September, 1992
34. Abufares, A A and Douglas, P. L
Trans IChemE, Vol. 73, Part A, January, 1995
35. Ung, Sophie and Doherty, Michael F.
AIChE Journal, Vol. 41, No. 11, November, pp. 2383-2392, 1995
36. Doherty, M F. and Buzad, G.
Trans IChemE, Vol. 70, Part A, September, 1992
37. Ung, Sophie and Doherty, Michael F.
Chem Eng. Sc., Vol. 50, No. 1, pp 23-48, 1995
38. Evans, Lawrence B.
"Advances in Process Flowsheeting Systems" en Mah, R. S. H , Seider, W. D.
Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design, Vol. 1, New York,
Engineering Foundations, 1981, pp. 425-469

FALTA PAGINA

No. 127

APÉNDICE A

La siguiente subrutina se utiliza para calcular la velocidad de reacción en la Columna Catalítica 02-E-102 de la Planta de MTBE.

```
C  Calculo de la velocidad de reacción para la síntesis de MTBE
C  usando una subrutina cinética para el modelo RADFRAC
C
SUBROUTINE RAM5 (NSTAGE, NCOMP, NR,  NRL,  NRV,
2      T,  TLIQ, TVAP, P,  VF,
3      F,  X,  Y,  IDX, NBOPST,
4      KDIAG, STOIC, IHLBAS, HLDLIQ, TIMLIQ,
5      IHVBAS, HLDVAP, TIMVAP, NINT, INT,
6      NREAL, REAL, RATES, RATEL, RATEV,
7      NINTB, INTB, NREALB, REALB, NIWORK,
8      IWORK, NWORK, WORK)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
```

```
C  Orden de los componentes
C  =====
C
PARAMETER(K_PROPANO=1)
PARAMETER(K_IBUTANO=2)
PARAMETER(K_IBUTILEN=3)
PARAMETER(K_1BUTENE=4)
PARAMETER(K_NBUTANO=5)
PARAMETER(K_2TBUTENE=6)
PARAMETER(K_2CBUTENE=7)
PARAMETER(K_PENTANOS=8)
PARAMETER(K_MTBE=9)
PARAMETER(K_METANOL=10)
PARAMETER(K_AGUA=11)
```

```
PARAMETER(N_COMP=11)
```

```
REAL*8 PHI(N_COMP)
REAL*8 DPHI(N_COMP)
REAL*8 ACTIV(N_COMP)
```

```
COMMON /USER/ RMISS, IMISS, NGBAL, IPASS, IRESTR,
2      ICONVG, LMSG, KFLAG, NHSTRY,
3      NRPT, NTRMNL, ISIZE
```

```
COMMON /MAXWRT/ MAXBUF
```

```
CHARACTER*80 MAXBUF(20)
```

```
DIMENSION X(NCOMP,3), Y(NCOMP), IDX(NCOMP), NBOPST(6),
2      STOIC(NCOMP,NR), INT(NINT), REAL(NREAL),
3      RATES(NCOMP), RATEL(NRL), RATEV(NRV), INTB(NINTB),
4      REALB(NREALB), IWORK(NIWORK), WORK(NWORK)
```

```
COMMON /PLEX/IB(1)
DIMENSION B(1)
EQUIVALENCE(B(1),IB(1))
```

```
DATA IDBG/0/
```

```
C Constante de velocidad termodinámica DKA
```

```
C =====
```

```
TZERO=298.15D+00
C1=-1493.D+00
C2=-77.4D+00
C3=0.508D+00
C4=-0.913D-03
C5=1.11D-06
C6=-0.628D-09
FT=C1*(1.D+00/T-1.D+00/TZERO)
* +C2*DLOG(T/TZERO)
* +C3*(T-TZERO)
* +C4*(T*T-TZERO*TZERO)
* +C5*(T**3-TZERO**3)
* +C6*(T**4-TZERO**4)
```

```
DKA=284D+00*DEXP(FT)
```

```
C Constante de velocidad de reacción
```

```
C =====
```

```
DKR=3.67D+12*DEXP(-11110.D+00/T)
```

```
IF(IDBG GE.1)THEN
WRITE(MAXBUF(1),9010) FT,DKA,DKR
CALL WRTRM(1)
ENDIF
```

```
9010 FORMAT(1X,3(G13.6,1X))
```

```
C Cálculo de las actividades de los componentes
```

```
C =====
```

```
C Cálculo del coeficiente de fugacidad
```

```
KPHI=1
```

```
C Coeficientes de fugacidad de los componentes en la mezcla
```

```
CALL FUGLY(T,P,X(1,1),Y,NCOMP,IDX,NBOPST,KDIAG,KPHI,PHI,DPHI,KER)
IF(KER.NE.0)THEN
WRITE(MAXBUF(1),9000) T,P,KER
```

```

CALL WRTRM(1)
ENDIF
9000 FORMAT(' fugly failed at T=',G12.5,' P=',G12.5,' ker=',I4)
L_GAMMA=IPOFF3(24)
DO J=1,NCOMP
  ACTIV(J)=DEXP(B(L_GAMMA+J))*X(J,1)
END DO
IF(IDBG GE 1)THEN
  DO J=1,NCOMP
    WRITE(MAXBUF(1),9020) J,X(J,1),ACTIV(J)
    CALL WRTRM(1)
  END DO
ENDIF
9020 FORMAT(' compo ',I3,' mole-frac=',G12.5,' activity=',G12.5)

C Velocidad de reacción
C =====
C RATE mol/s/kgcata
C Q equiv/kgcata
C DKR mol/s/equiv
Q=4.9D+00
RATE=Q*DKR*
* (ACTIV(K_ISOBY)/ACTIV(K_METANOL)
* -ACTIV(K_MTBE)/DKA/ACTIV(K_METANOL)**2)

RATNET=RATE*HLDLIQ*1.D-03

RATES(K_IBUTILEN)=-RATNET
RATES(K_METANOL)=-RATNET
RATES(K_MTBE)=RATNET
RATES(K_PROPANO)=0.D+00
RATES(K_IBUTANO)=0.D+00
RATES(K_1BUTENE)=0.D+00
RATES(K_NBUTANO)=0.D+00
RATES(K_2TBUTENE)=0.D+00
RATES(K_2CBUTENE)=0.D+00
RATES(K_PENTANOS)=0.D+00
RATES(K_AGUA)=0.D+00

IF(IDBG GE 1)THEN
  WRITE(MAXBUF(1),9030) NSTAGE,RATE,RATNET
  CALL WRTRM(1)
ENDIF
9030 FORMAT(' stage=',I4,' spec-rate=',G12.5,' net-rate=',G12.5)
RETURN
END

```

APÉNDICE B.

Balance de Materia y Energía de la Planta de MTBE de la Refinería de Salina Cruz, Oaxaca.

Comente	1	2	2DE	2DV	3	4	5	6	7	8
Equipo	From	V1	02-C-106	V1	D1	02-E-101	02-E-101	02-J-101	D5	D3
Temperatura °C	02-E-101	LIQUID	LIQUID	LIQUID	02-E-101	LIQUID	LIQUID	LIQUID	D3	02-E-102
Pressure KG/CM2	38.000	100.000	38.000	100.000	38.000	38.000	38.000	42.400	42.900	42.900
Vapor Frac.	7.200	26.700	7.300	8.500	7.300	6.800	4.700	25.500	25.300	25.300
Mole Flow KMOL/HR	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Mass Flow KG/HR	243.931	488.419	488.419	488.419	114.958	115.811	243.078	243.078	53.240	4.325
Volume Flow CUM/HR	13808.00	8799.000	8799.000	8799.000	2071.000	2098.479	13780.52	13780.52	1711.000	139.000
Enthalpy MMBTU/HR	24.594	12.415	11.798	12.422	2.777	2.147	24.560	26.607	2.927	0.238
Mass Flow KG/HR	-19.535	-129.714	-131.902	-129.728	-31.045	-31.186	-19.384	-19.297	-11.966	-0.972
PROPANO	286.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.467	285.533	285.533	0.354	0.029
IBUTANO	3832.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.763	3830.237	3830.237	1.732	0.141
1BUTILEN	2423.000	0.000	0.000	0.000	0.000	4.799	2418.201	2418.201	0.039	0.003
NBUTANO	2032.000	0.000	0.000	0.000	0.000	4.475	2027.525	2027.525	3.715	0.302
2BUTILEN	2345.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.080	2343.920	2343.920	1.070	0.087
2CBUTILEN	1718.000	0.000	0.000	0.000	0.000	3.403	1714.597	1714.597	2.849	0.231
PENTANOS	1133.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.852	1131.148	1131.148	1.583	0.129
MTBE	29.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	28.996	28.996	0.005	0.000
METANOL	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
AGUA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	10.000	8799.000	8799.000	8799.000	2071.000	2080.636	0.364	0.000	1698.303	137.968
									0.364	0.032

Contenido	9	10	11	12	13	14	14AB	15	16
Equipo	D3 M3 LIQUID	M3 02-C-101 LIQUID	M2 02-C-101 LIQUID	M2 02-D-101 LIQUID	D2 02-D-101 LIQUID	02-J-102 LIQUID	D2 02-J-102 LIQUID	02CA101 M2 LIQUID	D2 V2 LIQUID
Temperatura °C	42.900	34.700	34.700	58.000	75.500	76.100	75.900	74.500	75.500
Pressure KG/CM2	25.300	21.700	21.200	20.900	19.400	23.700	19.300	21.300	19.300
Vapor Frac	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Mole Flow KMOL/HR	48.914	291.992	291.992	670.099	629.947	378.107	378.107	378.107	251.840
Mass Flow KG/HR	1572.000	15352.521	15352.521	38402.520	38402.520	23050.000	23050.000	23050.000	15352.521
Volume Flow CUM/HR	2.690	28.823	28.831	74.946	77.691	46.517	46.636	46.376	31.062
Enthalpy MMBTU/HR	-10.994	-30.291	-30.291	-75.917	-75.917	-45.536	-45.567	-45.626	-30.350
Mass Flow KG/HR	0.325	285.858	285.858	715.039	715.039	429.182	429.182	429.182	285.858
PROPANO	1.592	3831.828	3831.828	9584.867	9584.867	5753.039	5753.039	5753.039	3831.828
IBUTANO	0.036	2418.237	2418.237	2666.545	413.696	248.309	248.309	248.309	165.387
1BUTENE	3.413	2030.938	2030.938	5080.151	5080.151	3049.213	3049.213	3049.213	2030.938
NBUTANO	0.983	2344.904	2344.904	5865.500	5865.500	3520.596	3520.596	3520.596	2344.904
2TBUTENE	2.617	1717.214	1717.214	4295.410	4295.410	2578.195	2578.195	2578.195	1717.215
2CBUTENE	1.454	1132.602	1132.602	2833.071	2833.071	1700.469	1700.469	1700.469	1132.602
PENTANOS	0.005	29.001	29.001	72.543	72.543	43.542	43.542	43.542	29.001
MTBE	0.000	0.000	0.000	5314.020	8853.438	5314.020	5314.020	5314.020	3539.418
METANOL	1560.334	1560.334	1560.334	1971.359	684.791	411.026	411.026	411.026	273.765
AGUA	0.359	0.722	0.722	1.808	1.808	1.085	1.085	1.085	0.723

Comente	17	18	21	22	23	27	27AB	28	29
Equipo	V2 02-C-103 LIQUID	02-C-103 02-E-102 LIQUID	02-E-102 02-C-103 LIQUID	02-C-103 02-C-104 MIXED	02-C-104 LIQUID	02-J-103 02-C-105 LIQUID	02-E-102 02-J-103 LIQUID	02-C-105 02-E-103 LIQUID	02-E-103 LIQUID
Temperatura °C	75.000	75.500	143.500	140.700	38.000	61.100	60.300	55.000	38.000
Pressure KG/CM2	10.200	9.900	9.600	9.100	3.600	13.200	8.100	12.500	10.200
Vapor Frac.	0.000	0.000	0.000	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Mole Flow KMOL/HR	251.840	251.840	43.469	43.469	43.469	210.000	210.000	210.000	200.109
Mass Flow KG/HR	15352.521	15352.521	3817.637	3817.637	3817.637	11673.884	11673.884	11673.884	11339.992
Volume Flow CUM/HR	31.325	31.396	7.260	8.171	5.685	24.189	24.246	23.698	20.264
Enthalpy MMBTU/HR	-30.362	-30.342	-11.764	-11.784	-12.660	-19.464	-19.485	-19.643	-18.033
Mass Flow KG/HR	285.858	285.858	0.000	0.000	0.000	285.867	285.867	285.867	284.648
PROPANO	3831.828	3831.828	0.012	0.012	0.012	3831.957	3831.957	3831.957	3825.862
IBUTANO	165.387	165.387	0.005	0.005	0.005	14.140	14.140	14.140	14.058
1BUTILEN	2030.938	2030.938	0.102	0.102	0.102	2031.137	2031.137	2031.137	2018.099
NBUTANO	2344.904	2344.904	1.415	1.415	1.415	2343.576	2343.576	2343.576	2339.858
2TBUTENE	1717.215	1717.215	2.252	2.252	2.252	1715.194	1715.194	1715.194	1705.268
2CBUTENE	1132.602	1132.602	6.486	6.486	6.486	1126.245	1126.245	1126.245	1120.769
PENTANOS	29.001	29.001	28.969	28.969	28.969	0.033	0.033	0.033	0.033
MTBE	3539.418	3539.418	3776.994	3776.994	3776.994	0.043	0.043	0.043	0.042
METANOL	273.765	273.764	0.104	0.104	0.104	325.256	325.256	325.256	30.944
AGUA	0.723	0.723	0.395	0.395	0.395	0.360	0.360	0.360	0.333

Corriente	30	31	AWW
Equipo	02-E-103	D4	D1
	M5	02-E-103	DMT
Temperatura °C	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Pressure KG/CM2	38.000	38.000	38.000000
Vapor Frac.	11.200	13.700	7.300000
Mole Flow KMOL/HR	0.000	0.000	0.000000
Mass Flow KG/HR	91.768	81.876	373.461000
Volume Flow CUM/HR	1860.891	1527.000	6728.000000
Enthalpy MMBTU/HR	2.032	2.086	9.021000
Mass Flow KG/HR	-24.043	-21.947	-100.856000
PROPANO	1.238	0.000	0.000000
IBUTANO	6.075	0.000	0.000000
IBUTILEN	0.082	0.000	0.000000
1BUTENE	13.038	0.000	0.000000
NBUTANO	3.717	0.000	0.000000
2BUTENE	9.926	0.000	0.000000
2CBUTENE	5.477	0.000	0.000000
PENTANOS	0.000	0.000	0.000000
MTBE	0.001	0.000	0.000000
METANOL	413.052	118.740	0.000000
AGUA	1408.286	1408.260	6728.000000

Balance de Materia y Energia de la Planta de TAME de la Refineria de Salina Cruz, Oaxaca.

Corriente	T1	T2	T3	T4	T7	T8	T9	T10
Equipo	02-J-208 LIQUID	02-J-208 VT1 LIQUID	02-C-214 LIQUID	02-C-214 LIQUID	02-E-205 LIQUID	02-J-209 LIQUID	02-C-214 LIQUID	02-C-215 LIQUID
Temperatura °C	38 000	38 300	38 400	117 200	159 000	159 300	66 300	55 000
Pressure KG/CM2	2 500	8 600	6 600	5 900	4 800	7 500	6 500	6 000
Vapor Frac	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
Mole Flow KMOL/HR	2580 681	2580 681	2580 681	2580 681	1808 160	1808 160	1808 160	1808 160
Mass Flow KG/HR	244309 00	244309 00	244309 00	244309 00	193276 00	193276 00	193276 00	193276 00
Volume Flow CUM/HR	401 106	400 634	400 880	454 143	378 048	377 234	322 922	318 625
Enthalpy MMBTU/HR	-421 987	-421 706	-421 706	-379 503	-316 128	-316 010	-358 213	-362 808
Mass Flow KG/HR	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PROPANO	1344 000	1344 000	1344 000	1344 000	0 000	0 000	0 000	0 000
IBUTANO	1625 000	1625 000	1625 000	1625 000	0 000	0 000	0 000	0 000
IBUTILEN	1625 000	1625 000	1625 000	1625 000	0 000	0 000	0 000	0 000
1BUTENE	2370 000	2370 000	2370 000	2370 000	0 000	0 000	0 000	0 000
NBUTANO	3201 000	3201 000	3201 000	3201 000	0 000	0 000	0 000	0 000
2TBUTENE	3153 000	3153 000	3153 000	3153 000	0 000	0 000	0 000	0 000
2CBUTENE	2077 000	2077 000	2077 000	2077 000	0 211	0 211	0 211	0 211
PENTANOS	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
MTBE	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
METANOL	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
AGUA	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
DMETER	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
IPENTANO	11706 000	11706 000	11706 000	11706 000	0 000	0 000	0 000	0 000
MIBETER	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
MSBETER	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
1PENTANO	2248 000	2248 000	2248 000	2248 000	0 001	0 001	0 001	0 001
PENTANZC	3055 000	3055 000	3055 000	3055 000	0 414	0 414	0 414	0 414
2TPENTAN	5547 000	5547 000	5547 000	5547 000	0 384	0 384	0 384	0 384
2MB1	4032 000	4032 000	4032 000	4032 000	0 003	0 003	0 003	0 003
2MB2	7551 000	7551 000	7551 000	7551 000	2 107	2 107	2 107	2 107
2MB3	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000

Comente	T1	T2	T3	T4	T7	T8	T9	T10
CPENTENE	1222 000	1222 000	1222 000	1222 000	71 902	71 902	71 902	71 902
CPENTANO	318 000	318 000	318 000	318 000	234 436	234 436	234 436	234 436
TAME	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
TSDIENE	171 000	171 000	171 000	171 000	0 204	0 204	0 204	0 204
CSDIENE	73 000	73 000	73 000	73 000	0 264	0 264	0 264	0 264
4MPENTEN	831 000	831 000	831 000	831 000	821 335	821 335	821 335	821 335
22DMBUTA	98 000	98 000	98 000	98 000	93 230	93 230	93 230	93 230
23DMBUTA	1051 000	1051 000	1051 000	1049 317	1049 317	1049 317	1049 317	1049 317
23DMBUT1	489 000	489 000	489 000	489 000	486 729	486 729	486 729	486 729
4MCPENT2	318 000	318 000	318 000	318 000	316 953	316 953	316 953	316 953
2MPENTA	4741 000	4741 000	4741 000	4741 000	4738 085	4738 085	4738 085	4738 085
4MTPENT2	904 000	904 000	904 000	904 000	903 027	903 027	903 027	903 027
3MPENTAN	3030 000	3030 000	3030 000	3030 000	3029 628	3029 628	3029 628	3029 628
2MPENTA1	3397 000	3397 000	3397 000	3397 000	3396 361	3396 361	3396 361	3396 361
HEXANO1	1026 000	1026 000	1026 000	1026 000	1025 893	1025 893	1025 893	1025 893
2EBUTEN1	464 000	464 000	464 000	464 000	463 974	463 974	463 974	463 974
NHEXANO	1442 000	1442 000	1442 000	1442 000	1441 988	1441 988	1441 988	1441 988
T2HEXANO	2664 000	2664 000	2664 000	2664 000	2663 972	2663 972	2663 972	2663 972
2MPENTE2	5230 000	5230 000	5230 000	5230 000	5229 924	5229 924	5229 924	5229 924
CHEXANO2	1466 000	1466 000	1466 000	1466 000	1465 986	1465 986	1465 986	1465 986
22DMPENT	2444 000	2444 000	2444 000	2444 000	2444 000	2444 000	2444 000	2444 000
MCPENTEN	68454 969	68454 969	68454 969	68454 969	2683 671	2683 671	2683 671	2683 671
PC92C	19371 643	19371 643	19371 643	19371 643	68454 969	68454 969	68454 969	68454 969
PC106C	13172 121	13172 121	13172 121	13172 121	19371 643	19371 643	19371 643	19371 643
PC120C	11963 239	11963 239	11963 239	11963 239	13172 121	13172 121	13172 121	13172 121
PC134C	10355 521	10355 521	10355 521	10355 521	11963 239	11963 239	11963 239	11963 239
PC148C	9187 974	9187 974	9187 974	9187 974	10355 521	10355 521	10355 521	10355 521
PC162C	8303 137	8303 137	8303 137	8303 137	9187 974	9187 974	9187 974	9187 974
PC176C	7636 305	7636 305	7636 305	7636 305	8303 137	8303 137	8303 137	8303 137
PC190C	7187 279	7187 279	7187 279	7187 279	7636 305	7636 305	7636 305	7636 305
PC204C	5079 817	5079 817	5079 817	5079 817	7187 279	7187 279	7187 279	7187 279
PC216C					5079 817	5079 817	5079 817	5079 817

Corriente	T11	T15	T16	T17	T17A	T18	T19	T20	T21
Equipo	02-C-215	02-J-210	02-C-216	DT1	02-E-201	DT1	DMT	02-E-201	02-J-201
Temperatura °C	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Pressure KG/CM2	38.000	19.100	38.000	38.100	38.100	38.000	38.000	38.000	39.600
Vapor Frac	3.100	10.400	9.800	8.000	8.000	6.000	5.800	3.500	21.300
Mass Flow KMOL/HR	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Volume Flow CUM/HR	1808.160	772.522	772.522	427.670	344.852	373.294	372.923	428.042	428.042
Enthalpy MMBTU/HR	193276.00	51033.00	51033.00	28252.00	22781.00	6725.00	6726.78	28250.22	28250.22
Mass Flow KG/HR	312.875	84.890	87.723	48.602	39.190	9.017	9.022	48.676	48.501
Mass Flow KG/HR	-369.535	-54.321	-52.380	-28.998	-23.382	-100.811	-100.677	-29.138	-29.010
PROPANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IBUTANO	0.000	1344.000	1344.000	744.042	599.958	0.000	0.008	744.034	744.034
IBUTILEN	0.000	1625.000	1625.000	899.604	725.396	0.000	0.013	899.591	899.591
1BUTENE	0.000	1625.000	1625.000	899.604	725.396	0.000	0.011	899.593	899.593
NBUTANO	0.000	2370.000	2370.000	1312.038	1057.962	0.000	0.014	1312.024	1312.024
2TBUTENE	0.000	3201.000	3201.000	1772.082	1428.918	0.000	0.026	1772.055	1772.055
2CBUTENE	0.000	3153.000	3153.000	1745.509	1407.491	0.000	0.024	1745.485	1745.485
PENTANOS	0.211	2076.789	2076.789	1149.716	927.073	0.000	0.004	1149.712	1149.712
MTBE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
METANOL	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
AGUA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
DMETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	6725.000	6715.359	9.641	9.641
IPENTANO	0.000	11706.000	11706.000	6480.472	5225.528	0.000	4.399	6476.072	6476.072
MIBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MSBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1PENTANO	0.001	2247.999	2247.999	1244.498	1003.501	0.000	0.554	1243.944	1243.944
PENTAN2C	0.414	3054.586	3054.586	1691.026	1363.559	0.000	0.810	1690.217	1690.217
2TPENTAN	0.384	5546.616	5546.616	3070.621	2475.995	0.000	1.467	3069.154	3069.154
2MB1	0.003	4031.997	4031.997	2232.124	1799.873	0.000	1.139	2230.984	2230.984
2MB2	2.107	7548.893	7548.893	4179.086	3369.806	0.000	2.290	4176.796	4176.796
2MB3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Comente	T11	T15	T16	T17	T17A	T18	T19	T20	T21
CPENTENE	71 902	1150 098	1150 098	636 697	513 401	0 000	0 551	636 146	636 146
CPENTANO	234 436	83 564	83 564	46 261	37 303	0 000	0 031	46 230	46 230
TAME	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
T5DIENE	0 204	170 796	170 796	94 553	76 243	0 000	0 056	94 497	94 497
C5DIENE	0 264	72 736	72 736	40 267	32 469	0 000	0 024	40 243	40 243
4MPENTEN	821 335	9 665	9 665	5 351	4 314	0 000	0 001	5 350	5 350
22DMBUTA	93 230	4 770	4 770	2 641	2 129	0 000	0 000	2 641	2 641
23DMBUTA	1049 317	1 683	1 683	0 932	0 751	0 000	0 000	0 932	0 932
23DMBUT1	486 729	2 271	2 271	1 257	1 014	0 000	0 000	1 257	1 257
4MCPENT2	316 953	1 047	1 047	0 580	0 468	0 000	0 000	0 580	0 580
2MPENTA	4738 085	2 915	2 915	1 614	1 301	0 000	0 000	1 613	1 613
4MTpent2	903 027	0 973	0 973	0 538	0 434	0 000	0 000	0 538	0 538
3MPENTAN	3029 628	0 372	0 372	0 206	0 166	0 000	0 000	0 206	0 206
2MPENTA1	3396 361	0 639	0 639	0 354	0 285	0 000	0 000	0 354	0 354
HEXANO1	1025 893	0 107	0 107	0 059	0 048	0 000	0 000	0 059	0 059
2EBUTEN1	463 974	0 026	0 026	0 015	0 012	0 000	0 000	0 015	0 015
NHEXANO	1441 988	0 012	0 012	0 006	0 005	0 000	0 000	0 006	0 006
T2HEXANO	2663 972	0 028	0 028	0 016	0 013	0 000	0 000	0 016	0 016
2MPENTE2	5229 924	0 076	0 076	0 042	0 034	0 000	0 000	0 042	0 042
CHEXANO2	1465 986	0 014	0 014	0 008	0 006	0 000	0 000	0 008	0 008
22DMPENT	2444 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
MCPENTEN	2683 671	0 329	0 329	0 182	0 147	0 000	0 000	0 182	0 182
PC92C	68454 969	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC106C	19371 643	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC120C	13172 121	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC134C	11963 239	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC148C	10355 521	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC162C	9187 974	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC176C	8303 137	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC190C	7636 305	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC204C	7187 279	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC216C	5079 817	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000

Comente	T22	T23	T24	T25	T26	T27	T28AM	T29
D5	02-X-201	02-C-201	02-D-201	02-C-202	02-D-202	02-D-202	VT3	02-C-204
Equipo	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	LIQUID	MIXED
Temperatura °C	42.900	31.600	55.000	81.000	55.000	58.300	58.400	84.500
Pressure KG/CM2	25.300	17.800	17.300	16.000	5.000	3.700	6.200	5.700
Vapor Frac	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.000	0.271
Mole Flow KMOL/HR	134.328	562.370	562.370	495.933	495.933	495.012	496.564	496.564
Mass Flow KG/HR	4317.00	32567.22	32567.22	32813.99	32813.99	32813.99	32861.99	32861.99
Volume Flow CUM/HR	7.386	55.637	58.338	483.392	56.650	3384.003	57.085	56.995
Enthalpy MMBTU/HR	-30.192	-59.202	-57.453	-49.093	-60.233	-48.348	-60.361	-55.561
Mass Flow KG/HR	0.893	0.893	0.893	0.893	0.893	0.893	0.893	0.893
PROPANO	4.371	748.405	748.405	748.405	748.405	748.405	748.405	748.405
IBUTANO	0.098	899.689	899.689	899.689	899.689	899.689	899.689	899.689
IBUTILEN	9.372	908.965	908.965	908.965	908.965	908.965	908.965	908.965
1BUTENE	2.700	1314.725	1314.725	1314.725	1314.725	1314.725	1314.725	1314.725
NBUTANO	7.187	1779.243	1779.243	1779.243	1779.243	1779.243	1779.243	1779.243
2TBUTENE	3.993	1749.478	1749.478	1749.478	1749.478	1749.478	1749.478	1749.478
2CBUTENE	0.014	1149.726	1149.726	1149.726	1149.726	1149.726	1149.726	1149.726
PENTANOS	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
MTBE	4284.964	4284.964	4284.964	2043.434	2043.434	2013.931	2059.694	2013.931
METANOL	0.985	10.626	10.626	10.626	10.626	10.626	12.854	10.626
AGUA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
DMETER	0.134	6476.206	6476.206	6476.206	6476.206	6476.206	6476.206	6476.206
IPENTANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MIBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MSBETER	0.021	1243.965	1243.965	1243.965	1243.965	1243.965	1243.965	1243.965
1PENTANO	0.027	1690.244	1690.244	1690.244	1690.244	1690.244	1690.244	1690.244
PENTAN2C	0.050	3069.204	3069.204	3069.204	3069.204	3069.204	3069.204	3069.204
2TPENTAN	2.031	2233.016	2233.016	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001
2MB1	0.017	4176.813	4176.813	1750.305	1750.305	1685.728	1685.728	1685.728
2MB2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MB3								

Comente	T22	T23	T24	T25	T26	T27	T28	T28AM	T29
CPENTENE	0.012	636.158	636.158	636.158	636.158	636.158	636.158	636.158	636.158
CPENTANO	0.045	46.275	46.275	46.275	46.275	46.275	46.275	46.275	46.275
TAME	0.081	0.081	0.081	7147.907	7147.907	7241.988	7241.988	7241.988	7241.989
T5DIENE	0.002	94.499	94.499	94.499	94.499	94.499	94.499	94.499	94.499
C5DIENE	0.001	40.243	40.243	40.243	40.243	40.243	40.243	40.243	40.243
4MPENTEN	0.001	5.351	5.351	5.351	5.351	5.351	5.351	5.351	5.351
22DMBUTA	0.000	2.641	2.641	2.641	2.641	2.641	2.641	2.641	2.641
23DMBUTA	0.000	0.932	0.932	0.932	0.932	0.932	0.932	0.932	0.932
23DMBUT1	0.000	1.257	1.257	1.257	1.257	1.257	1.257	1.257	1.257
4MCPENT2	0.000	0.580	0.580	0.580	0.580	0.580	0.580	0.580	0.580
2MPENTA	0.000	1.613	1.613	1.613	1.613	1.613	1.613	1.613	1.613
4MTPENT2	0.000	0.538	0.538	0.538	0.538	0.538	0.538	0.538	0.538
3MPENTAN	0.000	0.206	0.206	0.206	0.206	0.206	0.206	0.206	0.206
2MPENTA1	0.000	0.354	0.354	0.354	0.354	0.354	0.354	0.354	0.354
HEXANO1	0.000	0.059	0.059	0.059	0.059	0.059	0.059	0.059	0.059
2EBUTEN1	0.000	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015
NHEXANO	0.000	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
T2HEXANO	0.000	0.016	0.016	0.016	0.016	0.016	0.016	0.016	0.016
2MPENTE2	0.000	0.042	0.042	0.042	0.042	0.042	0.042	0.042	0.042
CHEXANO2	0.000	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008
22DMPENT	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MCPENTEN	0.000	0.182	0.182	0.182	0.182	0.182	0.182	0.182	0.182
PC92C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC106C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC120C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC134C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC148C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC162C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC176C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC190C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC204C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC216C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Corriente	T30	T33	T33DB	T34	T35	T39AB	T39	T40	T41
Equipo	02-E-205	02-E-203	02-J-203	02-C-205	02-C-206	02-E-202	02-C-207	02-C-207	02-D-203
Temperature °C	MIXED	LIQUID	VAPOR						
Pressure KG/CM2	91.800	139.100	139.400	115.000	38.000	50.500	51.800	65.000	71.000
Vapor Frac	0.267	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000
Mole Flow KMOL/HR	496.564	82.763	82.763	82.763	82.763	413.801	413.801	413.801	404.693
Mass Flow KG/HR	32861.99	8071.98	8071.98	8071.98	8071.98	24790.00	24790.00	24790.00	24790.00
Volume Flow CUM/HR	578.473	14.733	14.714	13.901	12.263	43.677	43.559	45.001	676.787
Enthalpy MMBTU/HR	-55.085	-21.232	-21.226	-21.702	-23.028	-38.102	-38.016	-37.268	-29.060
Mass Flow KG/HR	0.893	0.000	0.000	0.000	0.000	0.893	0.893	0.893	0.893
PROPANO	748.406	0.000	0.000	0.000	0.000	748.406	748.406	748.406	748.406
IBUTANO	899.689	0.000	0.000	0.000	0.000	899.689	899.689	899.689	899.689
IBUTILEN	908.967	0.000	0.000	0.000	0.000	908.967	908.967	908.967	908.967
1BUTENE	1314.725	0.000	0.000	0.000	0.000	1314.725	1314.725	1314.725	1314.725
NBUTANO	1779.244	0.001	0.001	0.001	0.001	1779.244	1779.244	1779.244	1779.244
2CBUTENE	1749.479	0.002	0.002	0.002	0.002	1749.477	1749.477	1749.477	1749.477
PENTANOS	1149.726	50.979	50.979	50.979	50.979	1098.746	1098.746	1098.746	1098.746
MTBE	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
METANOL	2059.694	0.000	0.000	0.000	0.000	2059.694	2059.694	2059.694	1767.859
AGUA	12.854	0.000	0.000	0.000	0.000	12.854	12.854	12.854	12.854
DMETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IPENTANO	6476.206	0.000	0.000	0.000	0.000	6476.206	6476.206	6476.206	6476.206
MIBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MSBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1PENTANO	1243.965	11.078	11.078	11.078	11.078	1232.886	1232.886	1232.886	1232.886
PENTAN2C	1690.244	128.697	128.697	128.697	128.697	1561.547	1561.547	1561.547	1561.547
2TPENTAN	3069.204	188.259	188.259	188.259	188.259	2880.945	2880.945	2880.945	2880.945
2MB1	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.000
2MB2	1685.728	176.198	176.198	176.198	176.198	1509.529	1509.529	1509.529	870.757
2MB3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Comente	T30	T33	T33DB	T34	T35	T39AB	T39	T40	T41
CPENTENE	636 158	209 465	209 465	209 465	209 465	426 694	426 694	426 694	426 694
CPENTANO	46 275	24 597	24 597	24 597	24 597	21 677	21 677	21 677	21 677
TAME	7241 989	7241 989	7241 989	7241 989	7241 989	0.000	0.000	0.000	930.609
TSDIENE	94 499	18 366	18 366	18 366	18 366	76.133	76.133	76.133	76.133
C5DIENE	40 243	10 761	10 761	10 761	10 761	29.483	29.483	29.483	29.483
4MPENTEN	5 351	4.349	4.349	4.349	4.349	1.001	1.001	1.001	1.001
22DMBUTA	2 841	1.853	1.853	1.853	1.853	0.788	0.788	0.788	0.788
23DMBUTA	0 932	0.854	0.854	0.854	0.854	0.078	0.078	0.078	0.078
23DMBUT1	1 257	1 090	1 090	1 090	1 090	0.167	0.167	0.167	0.167
4MCPENT2	0 580	0 514	0 514	0 514	0 514	0.066	0.066	0.066	0.066
2MPENTA	1.613	1.547	1.547	1.547	1.547	0.067	0.067	0.067	0.067
4MTPEM2	0.538	0.507	0.507	0.507	0.507	0.032	0.032	0.032	0.032
3MPENTAN	0.206	0.204	0.204	0.204	0.204	0.002	0.002	0.002	0.002
2MPENTA1	0.354	0.348	0.348	0.348	0.348	0.005	0.005	0.005	0.005
HEXANO1	0.059	0.059	0.059	0.059	0.059	0.000	0.000	0.000	0.000
2EBUTEN1	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015	0.000	0.000	0.000	0.000
NHEXANO	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000
T2HEXANO	0.016	0.016	0.016	0.016	0.016	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTE2	0.042	0.042	0.042	0.042	0.042	0.000	0.000	0.000	0.000
CHEXANO2	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000
22DMPENT	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MCPENTEN	0.182	0.180	0.180	0.180	0.180	0.002	0.002	0.002	0.002
PC92C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC106C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC120C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC134C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC148C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC162C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC176C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC190C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC204C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC216C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Corriente	T42	T43	T44	T45	47	48	51	51AB	51DB
Equipo	VT4	02-C-208	02-E-203	02-E-203	M5	02-C-209	02-E-204	MT1	02-J-204
	02-C-208	02-E-203	LIQUID	LIQUID	02-C-209	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Temperatura °C	110.200	38.000	38.000	38.000	37.800	107.000	140.300	140.300	140.800
Pressure KG/CM2	10.600	9.800	7.600	9.400	6.900	6.900	4.500	4.500	14.000
Vapor Frac	0.751	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Mole Flow KMOL/HR	404.693	404.693	349.350	413.560	505.327	505.368	456.986	457.153	457.153
Mass Flow KG/HR	24790.00	24790.00	23016.76	8227.24	10090.16	10090.97	8522.97	8525.97	8525.97
Volume Flow CUM/HR	788.663	42.164	38.850	11.614	14.260	15.221	12.838	12.842	12.844
Enthalpy MMBTU/HR	-29.060	-39.083	-26.914	-109.253	-133.324	-130.676	-119.075	-119.120	-119.095
Mass Flow KG/HR	0.893	0.893	0.884	0.008	1.247	1.247	0.000	0.000	0.000
PROPANO	748.406	748.406	748.376	0.030	6.104	6.104	0.000	0.000	0.000
IBUTANO	899.689	899.689	899.634	0.055	0.137	0.137	0.000	0.000	0.000
1BUTENE	908.967	908.967	908.916	0.051	13.089	13.089	0.000	0.000	0.000
NBUTANO	1314.725	1314.725	1314.671	0.054	3.771	3.771	0.000	0.000	0.000
2TBUTENE	1779.244	1779.244	1779.132	0.111	10.038	10.038	0.000	0.000	0.000
2CBUTENE	1749.477	1749.477	1749.376	0.101	5.577	5.577	0.000	0.000	0.000
PENTANOS	1098.746	1098.746	1098.727	0.019	0.019	0.019	0.000	0.000	0.000
MTBE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
METANOL	1767.859	1767.859	0.895	1772.963	2186.015	2186.014	662.985	662.985	662.985
AGUA	12.854	12.854	9.555	6453.299	7861.585	7861.585	7859.981	7862.981	7862.981
DMETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IPENTANO	6476.206	6476.206	6476.020	0.187	0.187	0.187	0.000	0.000	0.000
MIBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MSBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1PENTANO	1232.886	1232.886	1232.857	0.030	0.030	0.030	0.000	0.000	0.000
PENTAN2C	1561.547	1561.547	1561.508	0.038	0.038	0.038	0.000	0.000	0.000
2TPENTAN	2880.945	2880.945	2880.875	0.070	0.070	0.070	0.000	0.000	0.000
2MB1	0.000	0.000	0.000	2.837	2.837	2.837	0.000	0.000	0.000
2MB2	870.757	870.757	870.733	0.023	0.023	0.023	0.000	0.000	0.000
2MB3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Corriente	T42	T43	T44	T45	47	48	51	51AB	51DB
CPENTENE	426 694	426 694	426 677	0 017	0 017	0 017	0 000	0 000	0 000
CPENTANO	21 677	21 677	21 615	0 062	0 062	0 062	0 000	0 000	0 000
TAME	930 609	930 609	930 494	0 115	0 115	0 115	0 000	0 000	0 000
T5DIENE	76 133	76 133	76 130	0 003	0 003	0 003	0 000	0 000	0 000
C5DIENE	29 483	29 483	29 482	0 001	0 001	0 001	0 000	0 000	0 000
4MPENTEN	1 001	1 001	1 000	0 001	0 001	0 001	0 000	0 000	0 000
22DMBUTA	0 788	0 788	0 788	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
23DMBUTA	0 078	0 078	0 078	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
23DMBUT1	0 167	0 167	0 167	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
4MCPENT2	0 066	0 066	0 066	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
2MPENTA	0 067	0 067	0 067	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
4MTPENT2	0 032	0 032	0 032	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
3MPENTAN	0 002	0 002	0 002	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
2MPENTA1	0 005	0 005	0 005	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
HEXANO1	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
2EBUTEN1	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
NHEXANO	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
T2HEXANO	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
2MPENTE2	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
CHEXANO2	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
22MPENT	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
MCPENTEN	0 002	0 002	0 002	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC92C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC106C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC120C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC134C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC148C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC162C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC176C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC190C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC204C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000
PC216C	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000	0 000

	52	53	T54	56	T57	58	59	60	60AB
Corrente	02-C-209	02C210	D4	02-E-204	02-C-204	02CA202	02-C-211	M4	M4
Equipo	02C210	D4	LIQUID	02-C-204	02CA202	02-C-211	LIQUID	LIQUID	02-J-205
Temperatura °C	61.600	38.000	38.000	103.900	101.500	55.000	43.300	38.000	LIQUID
Pressure KG/CM2	14.000	13.700	13.700	4.100	3.900	3.600	3.300	4.600	3.300
Vapor Frac	0.000	0.000	0.000	1.000	0.195	0.000	0.000	0.000	0.000
Mole Flow KMOL/HR	457.153	457.153	375.277	183.117	183.117	183.117	183.117	140.738	323.856
Mass Flow KG/HR	8525.97	8525.97	6998.97	5900.00	5900.00	5900.00	5900.00	4508.00	10408.00
Volume Flow CU/M/HR	11.865	11.646	9.560	1353.736	285.779	10.274	10.119	7.677	17.797
Enthalpy MMBTU/HR	-121.753	-122.543	-100.596	-34.117	-38.917	-40.873	-41.064	-31.803	-72.867
Mass Flow KG/HR	0.000	0.000	0.000	2.152	2.152	2.152	2.152	0.000	2.152
PROPANO	0.000	0.000	0.000	10.538	10.538	10.538	10.538	0.000	10.538
IBUTANO	0.000	0.000	0.000	0.236	0.236	0.236	0.236	0.000	0.236
IBUTILEN	0.000	0.000	0.000	22.595	22.595	22.595	22.595	0.000	22.595
1BUTENE	0.000	0.000	0.000	6.511	6.511	6.511	6.511	0.000	6.511
NBUTANO	0.000	0.000	0.000	17.328	17.328	17.328	17.328	0.000	17.328
2TBUTENE	0.000	0.000	0.000	9.628	9.628	9.628	9.628	0.000	9.628
2CBUTENE	0.000	0.000	0.000	0.033	0.033	0.033	0.033	0.000	0.033
PENTANOS	0.000	0.000	0.000	0.002	0.002	0.002	0.002	0.000	0.002
MTBE	0.000	0.000	0.000	5824.762	5824.762	5824.762	5824.762	4506.000	10330.762
METANOL	662.985	662.985	544.245	6454.722	6454.722	6454.722	6454.722	2.374	2.374
AGUA	7862.981	7862.981	6454.722	0.374	0.374	0.374	0.374	0.000	0.000
DMETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IPENTANO	0.000	0.000	0.000	0.322	0.322	0.322	0.322	0.000	0.322
MIBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MSBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1PENTANO	0.000	0.000	0.000	0.051	0.051	0.051	0.051	0.000	0.051
PENTAN2C	0.000	0.000	0.000	0.066	0.066	0.066	0.066	0.000	0.066
2TPENTAN	0.000	0.000	0.000	0.122	0.122	0.122	0.122	0.000	0.122
2MB1	0.000	0.000	0.000	4.897	4.897	4.897	4.897	0.000	4.897
2MB2	0.000	0.000	0.000	0.040	0.040	0.040	0.040	0.000	0.040
2MB3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Comente	52	53	T54	56	T57	58	59	60	60AB
CPENTENE	0.000	0.000	0.000	0.029	0.029	0.029	0.029	0.000	0.029
CPENTANO	0.000	0.000	0.000	0.107	0.107	0.107	0.107	0.000	0.107
TAME	0.000	0.000	0.000	0.196	0.196	0.196	0.196	0.000	0.196
T5DIENE	0.000	0.000	0.000	0.005	0.005	0.005	0.005	0.000	0.005
C5DIENE	0.000	0.000	0.000	0.002	0.002	0.002	0.002	0.000	0.002
4MPENTEN	0.000	0.000	0.000	0.002	0.002	0.002	0.002	0.000	0.002
22DMBUTA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
23DMBUTA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
23DMBUT1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4MCPENT2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4MTPEM2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3MPENTAN	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTA1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
HEXANO1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2EBUTEN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
NHEXANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
T2HEXANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTE2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CHEXANO2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
22DMPEM1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MCPENTEN	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC92C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC106C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC120C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC134C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC148C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC162C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC176C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC190C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC204C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC216C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Corriente	60DB	61	62	T64	T65
Equipo	02-J-205	D6	D6	DMT	02-E-204
	D6	02-E-204	D5	MT1	TM1
	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Temperatura °C	42.900	42.900	38.000	107.100	
Pressure KG/CM2	26.600	26.600	6.000	4.310	
Vapor Frac	0.000	0.000	0.000	0.000	
Mole Flow KMOL/HR	323.856	136.288	187.567	0.167	1.552
Mass Flow KG/HR	10408.00	4380.00	6028.00	3.00	48.00
Volume Flow CUM/HR	17.805	7.493	10.312	0.004	0.090
Enthalpy MMBTU/HR	-72.791	-30.633	-42.158	-0.045	-0.346
Mass Flow KG/HR					
PROPANO	2.152	0.906	1.247	0.000	0.000
IBUTANO	10.538	4.435	6.103	0.000	0.001
IBUTILEN	0.236	0.099	0.137	0.000	0.000
1BUTENE	22.595	9.509	13.087	0.000	0.002
NBUTANO	6.511	2.740	3.771	0.000	0.001
2TBUTENE	17.328	7.292	10.036	0.000	0.002
2CBUTENE	9.628	4.052	5.576	0.000	0.001
PENTANOS	0.033	0.014	0.019	0.000	0.000
MTBE	0.002	0.001	0.001	0.000	0.000
METANOL	10330.762	4347.496	5983.266	0.000	45.763
AGUA	2.374	0.999	1.375	3.000	2.229
DMETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IPENTANO	0.322	0.136	0.187	0.000	0.000
MIBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MSBETER	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1PENTANO	0.051	0.022	0.030	0.000	0.000
PENTAN2C	0.066	0.028	0.038	0.000	0.000
2TPENTAN	0.122	0.051	0.070	0.000	0.000
2MB1	4.897	2.061	2.836	0.000	0.001
2MB2	0.040	0.017	0.023	0.000	0.000
2MB3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Corriente	60DB	61	62	T64	T65
CPENTENE	0.029	0.012	0.017	0.000	0.000
CPENTANO	0.107	0.045	0.062	0.000	0.000
TAME	0.196	0.083	0.114	0.000	0.001
TSDIENE	0.005	0.002	0.003	0.000	0.000
C5DIENE	0.002	0.001	0.001	0.000	0.000
4MPENTEN	0.002	0.001	0.001	0.000	0.000
22DMBUTA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
23DMBUTA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
23DMBUT1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4MCPENT2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4MTPEM2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3MPENTAN	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTA1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
HEXANO1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2EBUTEN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
NHEXANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
T2HEXANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2MPENTE2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CHEXANO2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
22DMPENT	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
MCPENTEN	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC92C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC106C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC120C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC134C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC148C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC162C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC176C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC190C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC204C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
PC216C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Ecuaciones de Estado.

A. Redlich-Kwong (RK)

La ecuación de estado de Redlich-Kwong se emplea para calcular propiedades termodinámicas de la fase vapor. Es aplicable a sistemas que trabajan a presiones moderadamente bajas (máximo 10 atmósferas de presión), en la fase vapor no-ideal. No es recomendable para el cálculo de propiedades en fase líquida. La ecuación del modelo es

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a/T^{0.5}}{V_m(V_m + b)}$$

donde.

$$\sqrt{a} = \sum_i x_i \sqrt{a_i}$$

$$b = \sum_i x_i b_i$$

$$a_i = 0.42748023 R^2 T_{c,i}^{2.5} / p_{c,i}$$

$$b_i = 0.08664035 R T_{c,i} / p_{c,i}$$

$T_{c,i}$ en un intervalo de temperatura de 5-2000

$p_{c,i}$ en un intervalo de presión de 10^5 - 10^8

B. Redlich-Kwong-Soave (RKS).

La ecuación de estado estándar de Redlich-Kwong-Soave-Boston-Mathias es la base para la ecuación de **Redlich-Kwong-Soave**.

La ecuación de RKS se recomienda para procesos de hidrocarburos, tales como procesamiento de gas, refinación y procesos petroquímicos. La ecuación es:

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b)}$$

donde

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$$b = \sum_i x_i b_i$$

$$a_i = \text{función}(T, T_{C_i}, P_{C_i}, \omega_i)$$

$$b_i = \text{función}(T_{C_i}, P_{C_i})$$

$$k_{ij} = k_{ji}$$

Los parámetros a_i se calculan de acuerdo a la ecuación estándar de Soave.

El simulador ASPEN PLUS tiene en su banco de datos los parámetros k_{ij} de gran número de parejas de componentes.

T_{C_i} en un intervalo de temperatura de 5-2000

P_{C_i} en un intervalo de presión de 10^5 - 10^8

ω_i en un intervalo de -0.5 a 2.0

k_{ij} -5.0 a 5.0

C. Redlich-Kwong-Soave-Boston-Mathias (RKS-BM).

La ecuación de Redlich-Kwong-Soave-Boston-Mathias se recomienda para procesamiento de hidrocarburos.

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b)}$$

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$$b = \sum_i x_i b_i$$

$$a_i = \text{función}(T, T_{C_i}, P_{C_i}, \omega_i)$$

$$b_i = \text{función}(TC_i, PC_i)$$

$$k_{ij} = k_{ji}$$

Los parámetros a_i se calculan de acuerdo a la ecuación estándar de Soave a temperaturas supercríticas.

D. Peng-Robinson.

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b) + b(V_m - b)}$$

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$

$$b = \sum_i x_i b_i$$

$$a_i = \text{función}(T, TC_i, PC_i, \omega_i)$$

$$b_i = \text{función}(TC_i, PC_i)$$

$$k_{ij} = k_{ji}$$

a_i se calcula de acuerdo a la función Alfa de Peng-Robinson

$$a_i = \alpha_i * 0.45724 * \frac{R^2 TC_i^2}{PC_i}$$

$$b_i = 0.07780 * \frac{R TC_i}{PC_i}$$

$$\alpha_i(TC_i) = 10$$

El parámetro α_i es función de la temperatura:

$$\alpha_i(T) = \left[1 + m_i (1 - Tr_i^{0.5}) \right]^2$$

$$m_i = 0.37464 + 1.54226 \omega_i - 0.26992 \omega_i^2$$

E. Reglas de Mezclado de Huron y Vidal.

Huron y Vidal (1979) utiliza una simple relación termodinámica para igualar la energía de Gibbs en exceso a expresiones con coeficientes de fugacidad, para calcularla mediante la ecuación de estado:

$$G_m^E = RT \ln \phi - \sum_i x_i RT \ln \phi_i^* \quad (1)$$

La ecuación (1) es válida para cualquier presión.

Si la ecuación (1) se evalúa a presión infinita, la mezcla es un líquido pesado y extremadamente denso. Puede expresarse como:

$$\begin{aligned} V(p = \infty) &= b \\ V^E(p = \infty) &= 0 \\ \text{ó} \\ b &= \sum_i x_i b_i \end{aligned} \quad (2) \text{ y } (3)$$

Usando las ecuaciones (2) y (3) en la (1) se obtiene la expresión para a/b que contiene la Energía de Gibbs en exceso

$$a/b = \sum_i x_i a_i/b_i - \frac{1}{\Lambda} G_m^E(p = \infty)$$

donde

$$\Lambda = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left(\frac{1 - \lambda_1}{1 - \lambda_2} \right)$$

si λ_1 y λ_2 dependen de la ecuación de estado utilizada. En general la ecuación de estado cúbica puede escribirse como,

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{(V_m + \lambda_1 b)(V_m + \lambda_2 b)}$$

donde λ_1 y λ_2 son:

$$\text{Ecuación de Peng-Robinson: } \lambda_1 = 1 - \sqrt{2} \quad \lambda_2 = 1 + \sqrt{2}$$

$$\text{Ecuación de Redlich-Kwong-Soave: } \lambda_1 = 1 \quad \lambda_2 = 0$$

La regla de mezclado para b se fija mediante la ecuación 3. Esta expresión puede emplearse a cualquier presión, se utiliza para mezclas polares a altas presiones como los sistemas que contienen gases ligeros. En teoría cualquier modelo de Coeficientes de Actividad puede utilizarse.

F. MODELO UNIFAC-LL.

El modelo UNIFAC-LL se emplea para calcular el equilibrio Líquido-Líquido en las columnas de extracción de las plantas de MTBE y de TAME. En sí, es la ecuación UNIFAC pero, con valores para los grupos funcionales calculados a partir de datos de equilibrio líquido-líquido. El modelo UNIFAC calcula los coeficientes de actividad líquidos, es un modelo de contribución de grupos, de ahí su carácter predictivo.

La ecuación para el modelo original del Coeficiente de Actividad Líquido de UNIFAC se establece considerando los términos “combinatorio” y “residual”, y es el siguiente.

$$\ln \gamma = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^r$$

$$\ln \gamma_i^c = \ln \left(\frac{\Phi_i}{x_i} \right) + 1 - \frac{\Phi_i}{x_i} - \frac{z}{2} \left[\ln \frac{\Phi_i}{\theta_i} + 1 - \frac{\Phi_i}{\theta_i} \right]$$

donde el volumen molecular y la fracción superficial son

$$\Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j^{nc} x_j r_j}$$

$$\theta_i = \frac{x_i \frac{z}{2} q_i}{\sum_j^{nc} x_j \frac{z}{2} q_j}$$

donde nc es el número de componentes en la mezcla. El número de coordinación se ajusta a 10. Los parámetros r_i y q_i se calculan a partir de los parámetros volumen de grupo y área, mediante las siguientes ecuaciones.

$$r_i = \sum_k^{ng} \nu_{ki} R_k$$

y

$$q_i = \sum_k^{ng} \nu_{ki} Q_k$$

El término residual es:

$$\ln \gamma_i^r = \sum_k^{ng} \nu_{ki} \left[\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^t \right]$$

Los parámetros Γ_k y Γ'_k se definen por:

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \sum_m^{ng} \theta_m \tau_{mk} - \sum \left(\frac{\theta_m \tau_{km}}{\sum_n^{ng} \theta_n \tau_{nm}} \right) \right]$$

con

$$\theta_k = \frac{X_k \frac{x}{2} Q_k}{\sum_m^{ng} X_m \frac{z}{2} Q_m}$$

y

$$\tau_{mn} = e^{-b_{mn}/T}$$

El parámetro X_k es el grupo de fracciones mol del grupo k en el líquido.

$$X_k = \frac{\sum_j^{nc} v_{kj} x_j}{\sum_j^{nc} \sum_m^{ng} v_{mj} x_j}$$

Los parámetros v_{kj} y v_{mj} están almacenados en el banco de datos de componentes puros del simulador ASPEN PLUS

G. MODELO UNIQUAC.

El modelo UNIQUAC puede utilizarse para encontrar soluciones de líquidos altamente no-ideales y para el equilibrio líquido-líquido. El modelo requiere parámetros binarios para evaluar los equilibrios líquido-vapor y líquido-líquido.

El modelo se aplica a la mezcla de compuestos polares con no-polares, la cual es altamente no ideal. La ecuación para el modelo UNIQUAC es:

$$\ln \gamma_i = \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} - q_i \ln t_i - q_i \sum_j \theta_j \tau_{ij} / t_j + l_i + q_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j$$

donde:

$$\theta_i = q_i x_i / q_T \quad , \quad q_T = \sum_k q_k x_k$$

$$\theta'_i = q'_i x_i / q'_T \quad , \quad q'_T = \sum_k q'_k x_k$$

$$\Phi_i = r_i x_i / r_T \quad , \quad r_T = \sum_k r_k x_k$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) + 1 - r_i$$

$$t'_i = \sum_k \theta'_k \tau_{ki}$$

$$\tau_{ij} = \exp (a_{ij} + b_{ij} / T + c_{ij} \ln T + d_{ij} T)$$

$$z = 10$$

$$a_{ij} \neq a_{ji}$$

$$b_{ij} \neq b_{ji}$$

$$c_{ij} \neq c_{ji}$$

$$d_{ij} \neq d_{ji}$$

Los parámetros binarios a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} y d_{ij} para determinar el equilibrio de mezclas líquido-vapor y líquido-líquido se evalúan a partir de regresiones de datos experimentales.