



**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**ANÁLISIS A LA AMPLIACIÓN DE LA PLANTA DE  
ALQUILACIÓN EN LA REFINERÍA DE MINATITLÁN  
VERACRUZ**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE**

**INGENIERA QUÍMICA**

**PRESENTA**

**KARLA LETICIA BELTRÁN SOTO**



**MEXICO, D.F.**

**2009**



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.

## Dedicatorias

A mis padres por absolutamente todo lo que me han dado, si alguien merece una mención especial en este trabajo son ellos. Gracias a ustedes por el amor, el apoyo, la comprensión, el aliento, la educación, en fin de verdad gracias por todo desde darme la vida hasta ayudarme a ser lo que soy y en lo que me convertiré. Papas ustedes han sido la base de todo por que una buena familia comienza con un buen ejemplo de los padres.

A mi hermano por ser parte de mi vida, y estar ahí conmigo en las buenas y en las malas. Siempre apoyando y haciéndome sentir protegida, enano te adoro.

A mi familia en general, por impulsarme y confiar en mí para llegar muy alto. A mis abuelos José  
(q.e.p.d.) Carmelita y Emma gracias por estar conmigo en mi educación, Carmelita sabes que te amo mucho, gracias por tu amor, mimos y por escucharme en cualquier momento.

A mis tías Yolanda, María, Juana y Norma, por ser mas que mis tías mis amigas, confidentes, cómplices y un extra apoyo en mi vida.

A mis primos Patricia y Raúl por demostrarme que cuento con ustedes para todo y a sus pequeñines que adoro Eduardo y Axel, sabe que eres mi niño adorado y siempre estaré contigo para lo que necesites.

A las nenas dela familia Valeria, Gabriela (q.e.p.d), Mitzi, Erika y Jacqueline con su bebes Gael y Karina, con las que crecí, reí y jugué durante un infancia maravillosa; gracias nenas sin ustedes no hubiera sido igual. A mis primos Luis Ángel y Jesús con los que me divertí como loca jugando como niño.

A toda mi familia mil gracias y recuerden que la fuerza de la familia no se mide por el número de miembros, sino por la unión que hay en ellos.

A mis todos amigos. Me considero una persona muy afortunada pues los amigos son hermanos del alma y afortunadamente cuento con muchos de ellos.

A Yareni gracias por adoptarme en tu vida como tu hermana, pues sabes que también lo eres para mí, por todos los momentos juntas y por compartir la aventura de la vida conmigo. Nena hay que seguir disfrutándola.

A David por ser mí mejor amigo, aconsejarme cuando lo necesito, gracias por tu amistad incondicional.

A mis calimochas Mag, Auris, Cris y Anne; nenas mil gracias por ser las mejores amigas que pude encontrar en la universidad, por hacerme reír, y crecer conmigo, ustedes saben lo que significa esto para mí. Nenas las adoro mil gracias por todo

A Edgar gracias por permitirme se parte de tu vida y tomar parte en la mía, por ser mi cómplice y compañero.

## **Agradecimientos**

Al I.Q. Celestino Montiel Maldonado por apoyarme en la realización de este trabajo. Gracias por ser mi maestro, por la orientación y consejos, ha sido un placer trabajar con usted

Al Profesor Alejandro Villalobos por impulsarme a mejorar este proyecto así como por sus consejos de vida.

A la M. Yolanda Castells por sus enseñanzas, gracias por sus consejos, por ser una gran mujer y permitirme aprender a través de su experiencia.

A todos los maestros que ayudaron a mi formación durante mi estancia en la facultad. De los cuales aprendí no solo si no además lecciones de vida que me ayudaron a crecer como profesional y ser humano.

A mí amada Universidad por permitirme formar parte ella.

# ÍNDICE

|  |    |
|--|----|
| 1. Introducción  | 6  |
| 1.1.1. Petróleo  | 6  |
| 1.1.2. Alquilación de olefinas con HF                                | 7  |
| 1.1.3. Simulador HYSYS   | 8  |
| 1.2.    Objetivos  | 9  |
| 2. Generalidades   | 9  |
| 2.1.    Importancia del petróleo                                     | 9  |
| 2.2.    Clasificación del petróleo                                   | 11 |
| 2.3.    Composición del petróleo                                     | 13 |
| 2.4.    Proceso de refinación  | 16 |
| 2.4.1. Destilación   | 16 |
| 2.4.2. Desasfaltación  | 17 |
| 2.4.3. Refinación con disolventes                                    | 18 |
| 2.4.4. Desparafinación con disolventes                               | 18 |
| 2.4.5. Descomposición térmica (cracking-Craqueo)                     | 18 |
| 2.4.6. Descomposición térmica catalítica fluida (Craqueo Catalítico) | 20 |
| 2.4.6.1. Alquilación   | 21 |
| 2.4.7. Reformación Catalítica  | 21 |
| 2.5.    Refinación en México   | 22 |
| 2.5.1. Productos de PEMEX-Refinación                                 | 23 |
| 2.5.1.1. Exploración y Producción                                    | 23 |
| 2.5.1.2. Refinación  | 23 |
| 2.5.1.3. Gas y Petroquímicos Básicos                                 | 24 |
| 2.5.1.4. Petroquímicos   | 24 |
| 3. Refinería "General Lázaro Cárdenas del Río"                       | 25 |
| 3.1.    Antecedentes históricos                                      | 25 |

|          |   |    |
|----------|---|----|
| 3.2.     | Necesidades de una reconfiguración                        | 25 |
| 4.       | Unidad de alquilación usando HF como catalizador          | 27 |
| 4.1.     | Antecedentes Históricos                                   | 27 |
| 4.2.     | Mecanismos de las Reacciones de Alquilación               | 28 |
| 4.3.     | Variables de reacción                                     | 33 |
| 4.3.1.   | Relación isobutano olefinas                               | 33 |
| 4.3.2.   | Hidrocarburos inertes de la carga                         | 33 |
| 4.3.3.   | Relación del ácido- hidrocarburo en el reactor            | 34 |
| 4.3.4.   | Temperatura   | 34 |
| 4.3.5.   | Agitación de la mezcla                                    | 34 |
| 4.3.6.   | Pureza del HF   | 34 |
| 4.4.     | Estructura de la planta                                   | 35 |
| 4.4.1.   | Sección de preparación                                    | 35 |
| 4.4.2.   | Sección de reacción                                       | 37 |
| 4.4.3.   | Sección de fraccionamiento y tratamientos de productos    | 42 |
| 4.5.     | Unidades en el Proceso de la Planta de Alquilación con HF | 48 |
| 5.       | Simulación en Aspen HYSYS                                 | 49 |
| 5.1.     | Introducción  | 49 |
| 5.2.     | Bases históricas de los simuladores                       | 49 |
| 5.3.     | Ventajas y beneficios de la simulación                    | 51 |
| 6.       | Simulación de la Planta de Alquilación                    | 53 |
| 6.1.     | Datos básicos de la simulación                            | 53 |
| 6.2.     | Simulación de la sección de preparación                   | 53 |
| 6.2.1.   | Secador usando "User Unit Operation"                      | 57 |
| 6.2.1.1. | Declaración de Corrientes                                 | 59 |
| 6.2.1.2. | Comportamiento de equipo                                  | 60 |
| 6.2.1.3. | Restricciones del equipo                                  | 63 |
| 6.3.     | Simulación de la sección de Reacción                      | 68 |

|   |    |
|---|----|
| 6.3.1. Especificaciones de los Reactores                                    | 68 |
| 6.3.2. Módulos de cálculo utilizados  | 74 |
| 6.4. Simulación de la sección de fraccionamiento y tratamiento de productos | 75 |
| 6.4.1. Torre despropanizadora   | 75 |
| 7. Análisis de resultados   | 87 |
| 7.1. Sección de preparación   | 87 |
| 7.2. Sección de Reaccion y tratamiento                                      | 89 |
| 8. Conclusiones   | 96 |
| 9. Bibliografía   | 98 |
| 10. Anexo A Diagrama de la simulación.                                      |    |

# **ANÁLISIS A LA AMPLIACIÓN DE LA PLANTA DE ALQUILACIÓN EN LA REFINERÍA DE MINATITLÁN VERACRUZ**

## **1. Introducción**

### **1.1.1. Petróleo**

El petróleo es una mezcla de hidrocarburos, sin embargo no es una mezcla sencilla son miles de compuestos que lo constituyen es el resultado de un complejo proceso físico-químico que se dio en el interior de la tierra, debido a la presión y a las altas temperaturas se produjo la descomposición de enormes cantidades de materia orgánica, como fitoplancton marino, zooplancton marino, materia vegetal y animal junto a los cuales se depositaron mantos sucesivos de arenas, arcillas, limo y otros sedimentos.

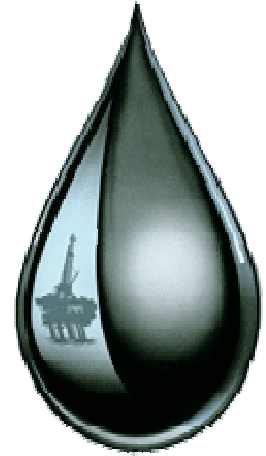


Figura 1. Gota de petróleo

Es ese proceso de sedimentación, transformación y degradación con bacterias aerobias y posteriormente anaerobias, este proceso se llevo millones de años en realizarse y es lo que dio origen al llamado oro negro. Este se encuentra ocupando espacios en rocas porosas, principalmente areniscas y calizas, de manera similar a como se encuentra el agua en una esponja empapada.

Es una sustancia aceitosa de color obscuro y dentro de su composición podemos encontrar hidrocarburos, azufre, nitrógeno, etc. Su composición elemental esta comprendida en los siguientes intervalos



Tabla 1. Composición elemental del petróleo

| Elemento  | %      |
|-----------|--------|
| Carbón    | 84 -87 |
| Hidrógeno | 11 -14 |
| Azufre    | 0-2    |
| Nitrógeno | <0.2   |

### 1.1.2. Alquilación de Olefinas con HF

El proceso de alquilación nos permite obtener gasolinas de alto octanaje por medio de un conjunto de reacciones en presencia de un catalizador, dando como resultado un mejor aprovechamiento de crudo.

El tipo de catalizador que necesitan las reacciones es un ácido fuerte, se utilizan  $H_2SO_4$  o HF, sin embargo el que presenta un mayor rendimiento es el ácido fluorhídrico, sin embargo tiene la desventaja de ser muy corrosivo y toxico por lo que el manejo de este necesita altas medidas de seguridad.

Una de las plantas mexicanas que utiliza esta tecnología para producir gasolinas es la refinería "General Lázaro Cárdenas del Río" ubicada en Minatitlán Veracruz, actualmente esta se encuentra en proceso de reconfiguración debido a la alta demanda nacional de gasolinas. Los detalles de esta unidad de alquilación se profundizan en el capítulo cuatro.





### **1.1.3. Simulador Aspen HYSYS**

En este caso se utilizó el simulador Aspen HYSYS de Aspen tech, es un simulador que nos permite la utilización de modelos rigurosos para estados dinámicos y en estado estacionario para el diseño de plantas, así como su monitoreo, su resolución, planeación, manipulación y administración entre otras.

El diseño de Aspen HYSYS se encuentra orientado en objetos (ecuaciones) junto con un ambiente gráfico de eventos dirigidos, lo que permite una total interacción donde los cálculos se realizan automáticamente cada vez que se suministra nueva información y el acceso a esta no está restringido.

Aspen HYSYS ofrece un elevado grado de flexibilidad debido a que existen múltiples caminos para cumplir tareas específicas, esto junto con un acercamiento lógico y consistente de cómo se llevan a cabo estas tareas lo convierten en una herramienta de simulación de procesos versátil.

La utilidad de Aspen HYSYS se atribuye a cuatro aspectos clave en su diseño:

-  Operación de acontecimientos dirigidos
-  Operaciones modulares
-  Arquitectura de diagramas de flujo múltiples
-  Diseño orientado a objetos

## **1.2. Objetivo**

☞ La metodología de este trabajo se basa en entender y analizar, el comportamiento de la ampliación actualmente realizada en la planta de alquilación de la Refinería "Gral. Lázaro Cárdenas del Río" en Minatitlán, Veracruz, contemplada en el Proyecto de Reconfiguración.

## **GENERALIDADES**

### **2.1. Importancia del Petróleo**

Al hablar de petróleo nos referimos al energético más importante en la historia de la humanidad, es un recurso natural no renovable utilizado en todo el mundo. Prácticamente lo utilizamos todos los días, ya sea directa o indirectamente. Esta sustancia ha contribuido a que el mundo actual sea como lo conocemos ahora y hasta el momento no se ha desarrollado una fuente alternativa que realmente lo sustituya, aunque se han dado grandes avances en este sentido.

Se considera como el inicio de la industria petrolera el hecho de que en 1859 Edwin L. Drake perforo el primer pozo con el propósito específico de producir petróleo, con el fin de producir cantidades industriales de queroseno para iluminación.

En 1880 casi la totalidad de la producción mundial era de Estados Unidos, sin embargo solo se utilizaba el queroseno, debido al tipo de procesos de refinación utilizados.

A principios de la década de los setenta, el abastecimiento de petróleo no era un problema debido a que la demanda crecía prácticamente a la paralela de nuevos descubrimientos de pozos, sin embargo en la actualidad la preocupación no solo por las reservas mundiales si no por los precios que este pueda alcanzar es cada vez mayor.

Las tres zonas con mayor producción mundial son Oriente Medio, la antigua URSS y Estados Unidos, entre ellos producen aproximadamente el 70% de la producción mundial,

☞ Oriente Medio: Es el primer productor mundial de petróleo con aproximadamente el 30%, dentro de esta zona Arabia Saudita es el mayor productor. Antigua URSS: Actualmente estos países producen

lo suficiente para cubrir sus necesidades y exportar un poco. Los yacimientos principales se encuentran en Asia central, entre el Volga y los Urales, Siberia y Sajalín.

☞ Estados Unidos: Tiene una alta producción sin embargo es también uno de los grandes consumidores por lo que a pesar de su producción se ve obligado a importar petróleo. Sus explotaciones se centran en la zonas de California, Kansas, Oklahoma, Texas, Luisiana y la costa del Golfo de México así como la zona central de las Rocosas

El mercado petrolero se ha visto en la necesidad de incrementar su producción debido al aumento en la demanda del mismo, las cifras de producción en la última década permiten observar que nos encontramos en la frontera entre una capacidad de producción que no podrá abastecer el creciente consumo que se estima actualmente en 2 millones de barriles por día (MMbpd).

Dentro de la producción mundial existen países que han incrementado su producción sin embargo algunos otros la han disminuido, desafortunadamente entre estos se encuentra México.

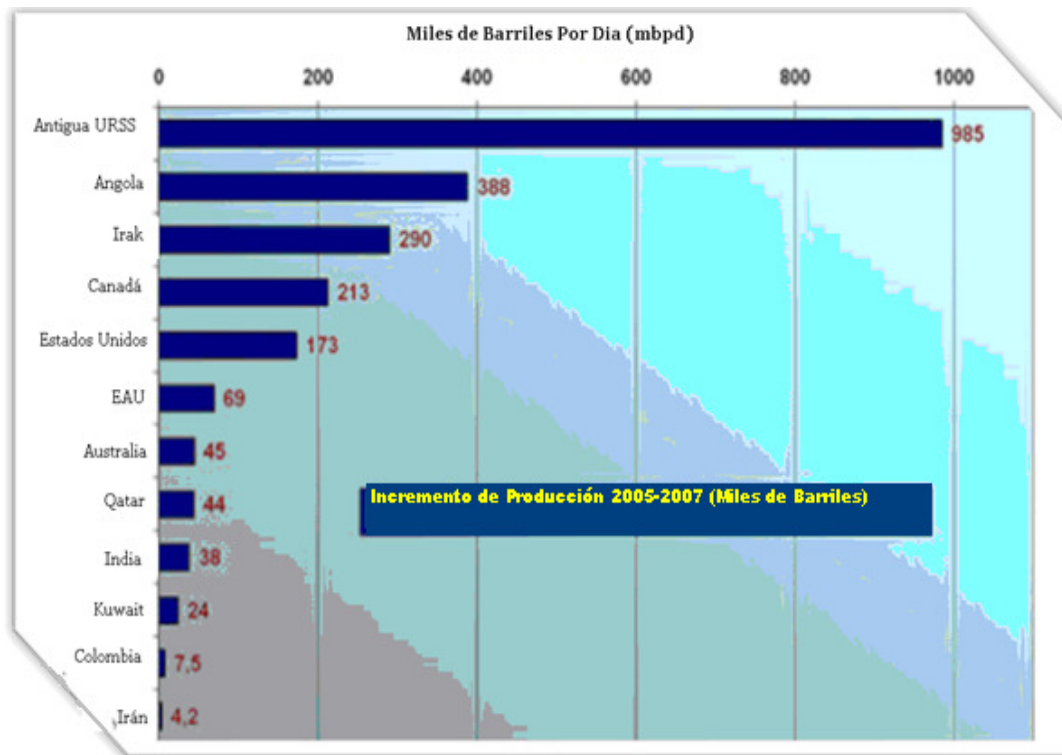


Figura 2. Incremento en la producción generado por 12 países para el periodo 2005-2007, en miles de barriles.

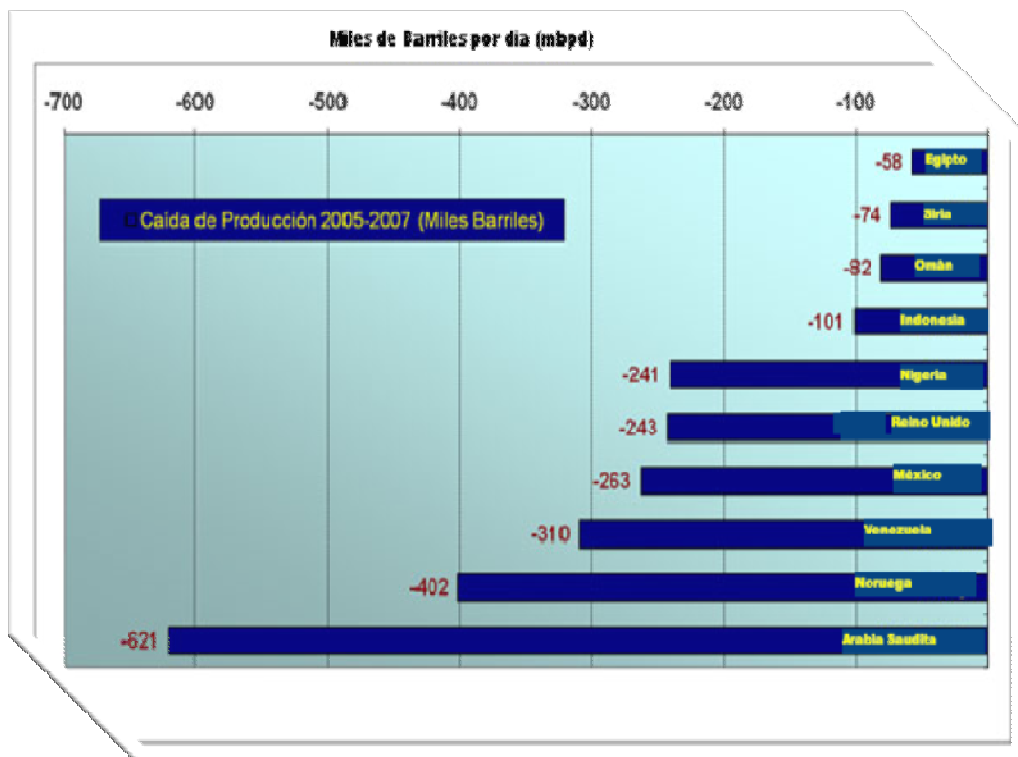


Figura 3. Reducción de producción de 11 países para el periodo de 2005-2007, en miles de barriles

La suma del incremento de producción de los 12 países, es de 2.282MBPD, sin embargo el total del decremento de producción de los 11 países es de 2.395MBPD, haciendo un balance en la producción mundial de petróleo esta tiene una disminución de 141MBPD.

## 2.2. Clasificación del Petróleo

Existen diferentes tipos de petróleo, estos pueden ser distinguidos por su curva de destilación TBP (True Boiling Point), esta información nos dice que tipo de petróleo es y define los rendimientos que se pueden obtener de los productos de separación directa. Por ejemplo el crudo Istmo tiene un rendimiento directo de 26% volumétrico de gasolina, el Maya solo tiene el 15.7%. Sin embargo en la industria mundial de los hidrocarburos líquidos estos se clasifican al petróleo en base a la densidad API, siglas de API es la abreviatura de American Petroleum Institute, denota la relación correspondiente de peso específico y de fluidez de los crudos con respecto al agua.

$$^{\circ}\text{API} = 141.5 / \text{gravedad específica} - 131.5$$

La clasificación de los crudos por rango de gravedad  $^{\circ}\text{API}$  utilizada en hidrocarburos es la siguiente:

Tabla 2. Clasificación de Petróleo en base a  $^{\circ}\text{API}$

| <b>Aceite crudo</b> | <b>Densidad (g/cm<sup>3</sup>)</b> | <b>Densidad grados API</b> |
|---------------------|------------------------------------|----------------------------|
| <b>Extra pesado</b> | >1.0                               | 10.0                       |
| <b>Pesado</b>       | 1.0-0.92                           | 10.0-22.3                  |
| <b>Mediano</b>      | 0.92-0.87                          | 22.3-31.1                  |

|                     |           |         |
|---------------------|-----------|---------|
| <b>Ligero</b>       | 0.87-0.83 | 31.1-39 |
| <b>Súper Ligero</b> | <0.83     | >39     |

En México tenemos tres tipos de crudos:

☞ El Maya: Con 22 °API considerado un pesado que constituye casi la mitad del total de la producción

☞ El Istmo: Con 34° API entra en la categoría de ligero, bajo en azufre, que representa casi un tercio del total de la producción del país

☞ El Olmeca: Que tiene 39°API, ya es un extra ligero y es aproximadamente la quinta parte del total de la producción

Sin embargo los crudos mexicanos tienen un alto contenido de azufre, lo cual incrementa los costos de refinación y disminuye el precio de los mismos. A continuación se muestra la caracterización de los crudos mexicanos

Tabla 3. Propiedades de los crudos mexicanos.

| <b>Propiedades</b>          | <b>Olmeca</b> | <b>Istmo</b> | <b>Maya</b> |
|-----------------------------|---------------|--------------|-------------|
| Peso específico a 20/4 °C   | 0.8261        | 0.8535       | 0.9199      |
| Grado API                   | 39.16         | 33.74        | 21.85       |
| 15.6 °C                     | 43.3          | 65.6         | 2156.0      |
| 21.1                        | 40.3          | 57.8         | 1054.0      |
| 25.0                        | 39.0          | 54.5         | 696.0       |
| Factor de caracterización K | 12.00         | 11.85        | 11.63       |
| Azufre total, % peso        | 0.81          | 1.45         | 3.70        |
| Carbón Ramsbottom, % peso   | 1.62          | 3.92         | 10.57       |



|                              |       |       |       |
|------------------------------|-------|-------|-------|
| Cenizas, % peso              | 0.006 | 0.007 | 0.074 |
| Insolubles en nC5, % peso    | /1.0  | 3.0   | 15.3  |
| Insolubles en nC7, % peso    | /1.0  | 2.09  | 11.2  |
| Aceites, % peso              | 89.2  | 89.2  | 72.0  |
| Parafinas, % peso            | 13.4  | 8.1   | 3.6   |
| Aceite desparafinado, % peso | 75.8  | 81.1  | 68.4  |
| Resinas, % peso              | 10.8  | 7.8   | 12.7  |

### 2.3. Composición del petróleo

Debido a la cantidad de compuestos que el petróleo contiene difícilmente encontraremos 2 con la misma composición, sin embargo sabemos que son cadenas de carbonos, entre los compuestos que podemos encontrar se encuentran los siguientes tipos:

➤ Parafinas: Son cadenas lineales de hidrocarburo que pertenecen al grupo de los alcanos de fórmula general  $C_nH_{2n+2}$ , donde n es el número de átomos de carbono. La molécula simple de la parafina proviene del metano,  $CH_4$ , un gas a temperatura ambiente; en cambio, los miembros más pesados de la serie, como el octano  $C_8H_{18}$ , se presentan como líquidos. Las formas sólidas de parafina, llamadas cera de parafina, provienen de las moléculas más pesadas  $C_{20}$  a  $C_{40}$ . El crudo puede contener moléculas de hasta 70 átomos de carbono, por lo que el número de hidrocarburos parafínicos posibles es muy alto.

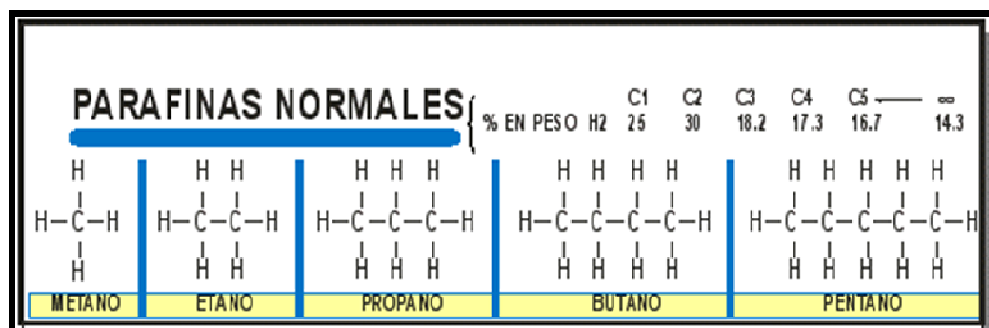


Figura 4. Estructuras de parafinas

➤ Isoparafinas: Cadenas ramificadas de hidrocarburos. Son parafinas donde en vez de tener un hidrógeno, este es sustituido ya sea por otro carbono o por una cadena de estos, con sus respectivos hidrógenos.

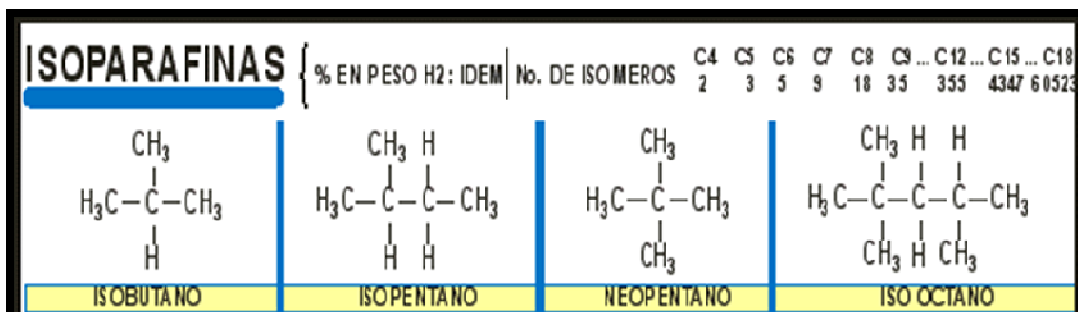


Figura 5. Estructuras de Isoparafinas.

➤ Olefinas: Cadenas de hidrocarburos que cuentan con enlaces dobles, mejor conocidos como alquenos, estas cadenas pueden contener uno o mas enlaces dobles entre carbonos. Su fórmula general es C<sub>n</sub>H<sub>2n</sub>. Estas no se encuentran en forma natural en el petróleo sin embargo se forman durante el proceso de refinación.

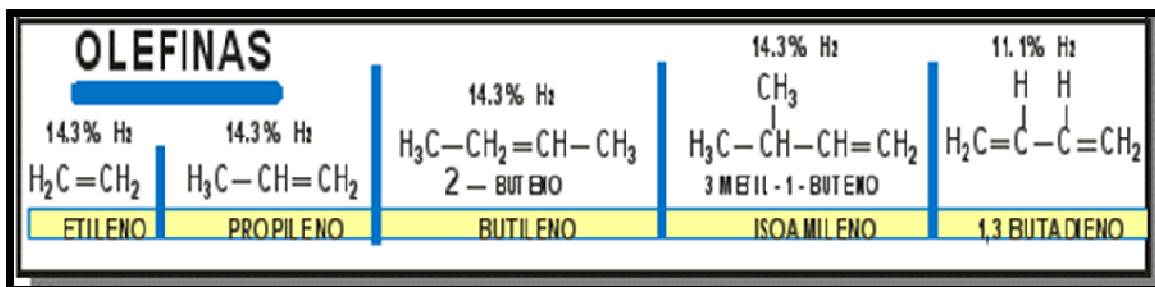


Figura 6. Estructuras de olefinas.

➤ Naftenos: Hidrocarburos cíclicos. El número de carbonos del anillo formado puede variar, en el crudo los anillos más frecuentes son los de cinco y seis carbonos.

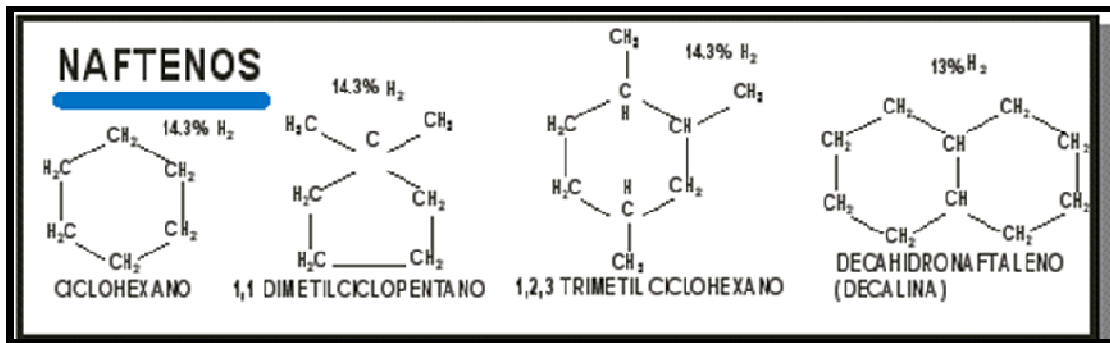


Figura 7. Estructuras de Naftenos.

➤ Aromáticos: Hidrocarburos cíclicos con enlaces dobles. Componentes de alto índice de octano que poseen un anillo de benceno en su estructura molecular.

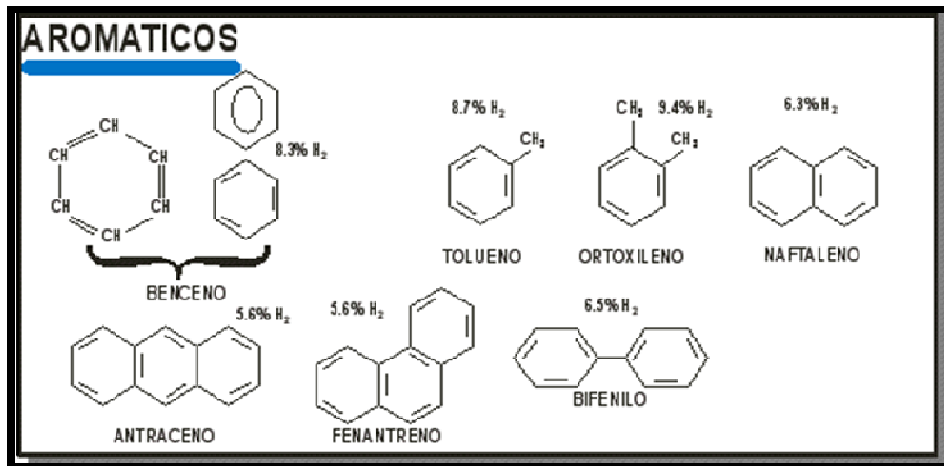


Fig. 8 Estructuras de Compuestos aromáticos

El grupo al que se le da tratamiento en la alquilación es al grupo de las olefinas, como parte de un proceso de refinación.

## 2.4. Proceso de Refinación

El petróleo llega a las refinerías en estado natural, lo que significa que se le tiene que procesar para tener un aprovechamiento de sus componentes, es decir se tiene que "cocinarlo", tal vez por esta razón lo llamamos crudo.

Dentro de la refinería, que no es otra cosa si no un gran complejo de plantas, se somete al crudo a distintos procesos de los cuales se obtienen los productos con mayor valor comercial, ya sean combustibles o petroquímicos. Entre los procesos, ya sean químicos o físicos por los que pasa el petróleo dentro de una refinería se pueden encontrar los siguientes.

#### 2.4.1. Destilación

Básicamente este proceso de destilación, ya sea atmosférica o al vacío son clásicos en la refinación. La diferencia entre ellos es que la destilación al vacío permite obtener más altas temperaturas a muy bajas presiones por lo que se logran fracciones más pesadas. La carga que entra a la torre de destilación atmosférica se somete previamente a [temperatura](#) de unos 350 °C en un horno especial.

Cuando la temperatura de ebullición de ciertos hidrocarburos es superior a 375°C se recurre a la destilación al vacío o a una combinación de vacío y vapor. La carga con que se alimenta el proceso al vacío proviene del fondo de la torre de destilación atmosférica.

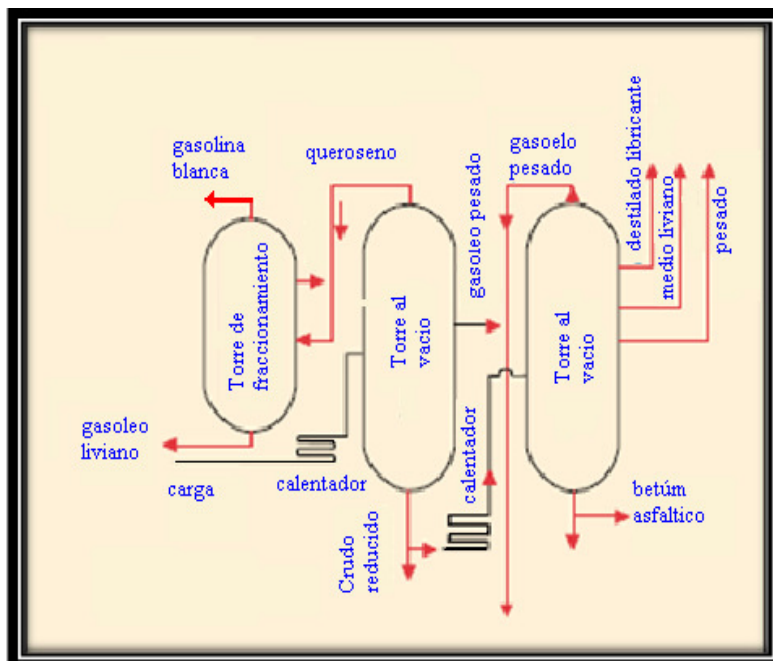


Fig. 9 Diagrama de destilación al vacío.

#### 2.4.2. Desasfaltación

Algunos de los productos que se obtienen contienen impurezas que tienen que ser removidas, en estos casos se emplean solventes. Un ejemplo de ello es la desasfaltación con propano se utiliza para extraer aceites pesados del asfalto para utilizarlos como lubricantes, esto se lleva a cabo en una torre de extracción líquido- líquido

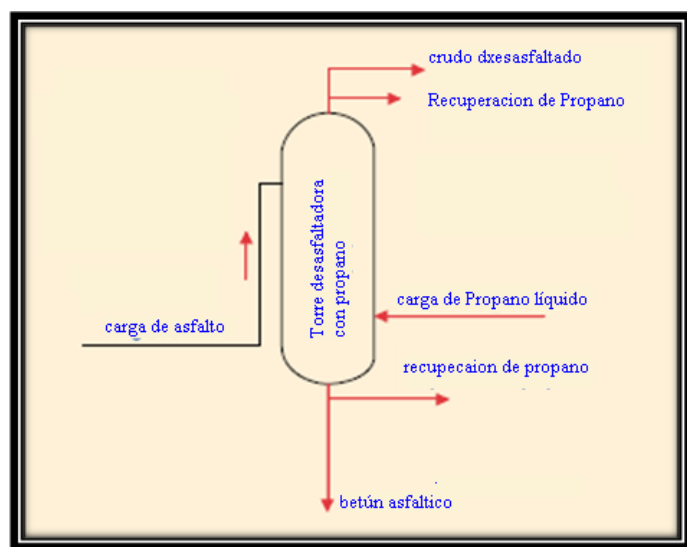


Fig. 10 Diagrama de desasfaltación con propano.

#### 2.4.3. Refinación con Disolvente

Los productos que salen de la torre de vacío (destilados, lubricantes livianos, [medios](#) y pesados) y de la torre desasfaltadora (residuo desasfaltado) pueden ser [tratados](#) con disolvente.

#### 2.4.4. Desparafinación con Disolvente

Esto se puede lograr por medio de métodos mecánicos, tales como prensas, exudación, asentamiento o centrifugación. Actualmente existen equipos que utilizan disolventes que mezclados con los destilados de petróleo, posteriormente se enfrían y la cera se cristaliza facilitando su filtración.

#### 2.4.5. Descomposición térmica ( Cracking – Craqueo )

Se le llama cracking Al proceso de descomposición o desintegración molecular o crepitación térmica. Fundamentalmente, la carga para este proceso la constituyen gasóleo pesado y/o crudo reducido. Las temperaturas para la descomposición térmica están en el rango de 200-480 °C y [presión](#) de hasta 20 atmósferas. La descomposición térmica se aplica también para la obtención de etileno, a partir de las siguientes [fuentes](#): etano, propano, propileno, butano, querosén o combustóleo. Las temperaturas requeridas están en el rango de 730-760 °C y presiones bajas de hasta 1.4 atmósferas.

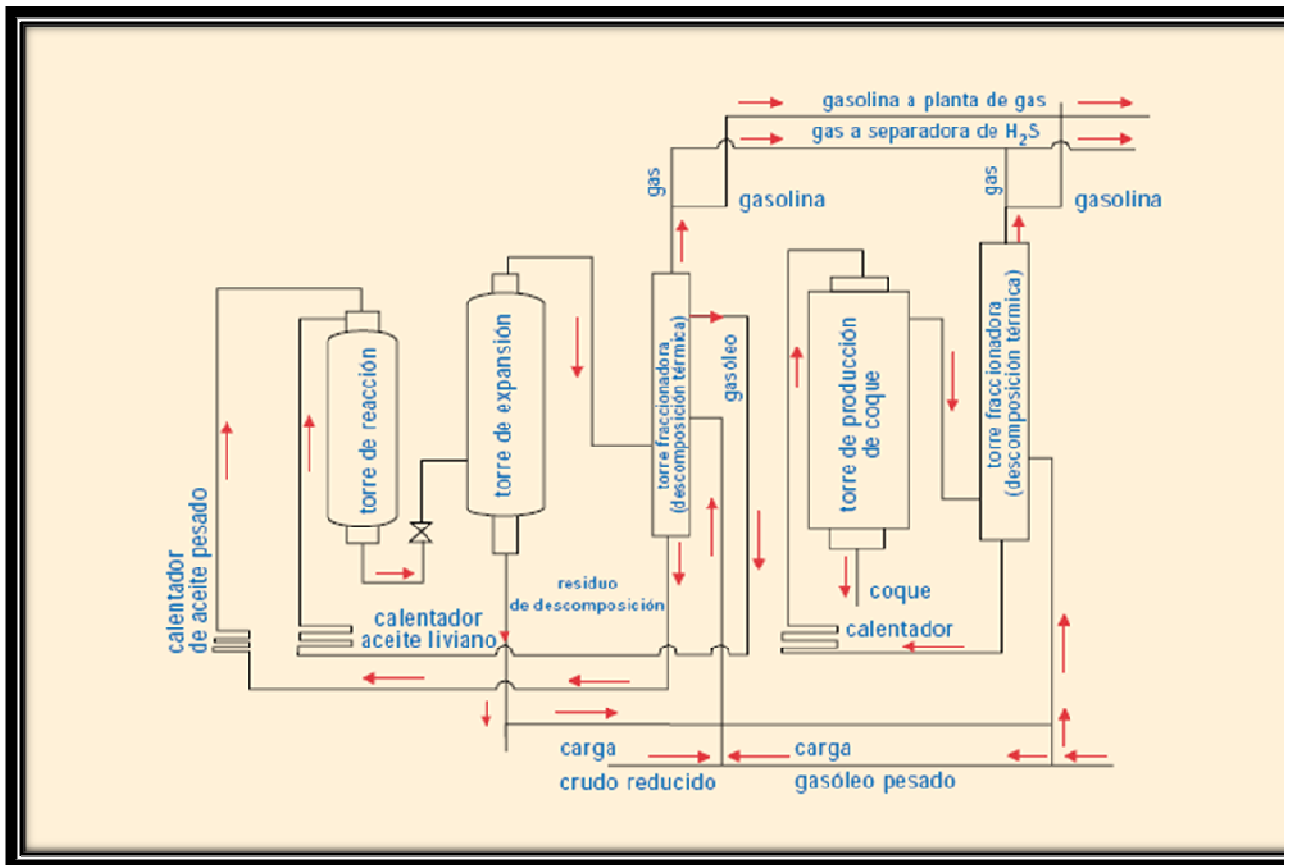


Fig. 11 Diagrama del proceso de descomposición térmica.

#### 2.4.6. Descomposición térmica catalítica fluida ( Craqueo Catalítico )

Es una mejora al cracking térmico, en este proceso se utiliza aire comprimido y vapor a temperaturas entre 120-535°C y presiones de 3.5-7.0 atm. La función del catalizador es actuar como absorbente para depurar la carga de material indeseable, este puede ser hecho de arcillas, metales o material sintético en forma granular, etc. El diseño y elaboración de catalizadores es una importante rama de las operaciones de refinación catalítica. Las características tales como tamaño de partículas, grado o calidad del material, propiedades absorbentes, capacidad de absorción y regeneración son, además del costo, importantes en la [selección](#) de catalizadores. El catalizador puede permanecer fijo, en forma de filtro en el recipiente o puede incluirse a través de la carga o emplearse un polvillo que se hace mover como un fluido utilizando un chorro de aire o hidrocarburos vaporizados.

#### **2.4.6.1. Alquilación**

La alquilación es un proceso catalítico que requiere un catalizador de naturaleza ácida fuerte, como el fluoruro de hidrógeno (HF) o el ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>). Es un proceso de síntesis química que consiste en la reacción de olefinas ligeras (tales como etileno, propileno, y semejantes) con hidrocarburos saturados dando lugar a hidrocarburos saturados de cadena ramificada para obtener un producto de alto peso molecular y un número grande de carbonos. El producto tiene un alto índice de octano y es usado para mejorar la calidad de combustibles de rango gasolinas. La planta de alquilación a analizar se explicará a fondo en el capítulo cuatro.

#### **2.4.7. Reformación Catalítica**

La carga puede provenir del procesamiento de crudos nafténicos y parafínicos que rinden fracciones ricas en sustancias aromáticas. Por la reformación catalítica se logra la deshidrogenación y

deshidroisomerización de naftenos, y la isomerización, el hidrocrqueo y la ciclo deshidrogenación de las parafinas, como también la hidrogenación de olefinas y la hidrosulfuración. El resultado es un hidrocarburo muy rico en aromáticos y por lo tanto de alto octanaje.



## 2.5. Refinación en México

En México el organismo encargado de la refinación es PEMEX-Refinación, dentro de sus funciones se encuentra la distribución y comercialización de petroquímicos, así como la refinación del crudo. Actualmente cuenta con 6 refinерías: Tula en Hidalgo, Salamanca en Guanajuato, Cadereyta en Nuevo León, Ciudad Madero en Tamaulipas, Salina Cruz en Oaxaca, Minatitlán en Veracruz.



Figura 12. Instalaciones de PEMEX- Refinación

## 2.5.1. Productos de PEMEX-Refinación

### 2.5.1.1. Exploración y Producción

- ✓ Petróleo crudo (Maya, Istmo y Olmeca) y gas natural

### 2.5.1.2. Refinación

- ✓ *PEMEX Premium UBA*: Gasolina de bajo contenido de azufre y mayor octanaje, formulada para automóviles con convertidor catalítico y motores de alta relación de compresión
- ✓ *PEMEX Magna*: Gasolina sin plomo formulada para automóviles con convertidor catalítico y en general motores de combustión interna a gasolina con requerimientos, por lo menos, de 87 octanos
- ✓ *PEMEX Diesel*: Combustible utilizado en motores de combustión interna para vehículos de carga y transportes de pasajeros



Figura 13. Productos de PEMEX- Refinación

- ✓ *Diesel Marino Especial*: Combustible para embarcaciones con motores a Diesel
- ✓ *Diesel Industrial Bajo Azufre*: Combustible de uso industrial con bajas emisiones de contaminantes

- ✓ *Combustóleo:* Combustible utilizado en procesos industriales en quemadores, calentadores, calderas, generadores de energía eléctrica y embarcaciones mayores
- ✓ *Gas avión:* Combustible utilizado para aeronaves equipados con motores del ciclo Otto
- ✓ *Turbosina:* Combustible utilizado en los aviones con motores de turbina o a reacción
- ✓ *Parafinas:* Materias primas utilizadas en la fabricación de aceites lubricantes y otros insumos de uso industrial
- ✓ *Otros:* Gasnafta, Gasolvente, Coque de Petróleo, Citrolina, Asfaltos y Lubricantes Básicos

#### 2.5.1.3. **Gas y Petroquímicos Básicos**

- ✓ *Gas natural:* Combustible para generación de calor, de uso industrial y doméstico. El metano se utiliza también como materia prima en los procesos petroquímicos
- ✓ *Gas licuado:* Mezcla compuesta principalmente de propano y butano, para uso doméstico
- ✓ *Petroquímicos básicos:* Etano, propano, butano, pentanos, hexano, heptano, materia prima para negro de humo, naftas, metano. Se utilizan principalmente como insumos industriales y combustibles
- ✓ *Azufre:* Subproducto resultante del endulza miento del gas amargo, utilizado para la obtención de ácido sulfúrico

#### 2.5.1.4. **Petroquímicos**

- *Derivados del Metano:* Amoniaco y Metanol
- *Derivados del Etano:* Materias primas para la industria del plásticos

- *Aromáticos:* Cadena petroquímicos para la producción de insumos para la industria de pinturas, solventes e impermeabilizantes; entre otras
- *Propileno y derivados*
- *Otros:* Glicoles, reformado pesado, oxígeno, hidrógeno, nitrógeno, ácido clorhídrico, ácido muriático, hexano y heptano.



Figura 14. PEMEX- Petroquímica

### **3. Refinería "General Lázaro Cárdenas del Río"**

#### **3.1. Antecedentes históricos**

La historia de refinería en Minatitlán data de poco más de 100 años, donde el 18 de marzo de 1908 se inicio la refinación del petróleo para usos comerciales con una producción de 2,000 barriles diarios, fundada en un principio por Person & Son LTD y vendida un año mas tarde a la compañía mexicana El Águila. Cuenta con una historia interesante que nos hace notar las necesidades de la misma, pues resulta obvia la urgente necesidad de una modernización de las instalaciones con el fin de ofrecer mayor eficiencia en la obtención de productos de uso común.

Ubicada en el istmo del estado de Veracruz abastece de energéticos a Puebla, el sur de Veracruz, Tabasco, Yucatán, Quintana Roo, y parte del Distrito Federal.

Basados en la necesidad de expansión de la refinería se tiene previsto establecer una nueva planta de alquilación que produzca 13440 barriles por día (bpd). Así como la modernización de la actual para aumentar su producción de 11700 bpd a 13440 bpd.

Con la reestructuración de la planta se lograra aumentar el procesamiento de crudo Maya de 169 mbpd a 245 mbpd, modernizando el proceso de alquilación se obtienen destilados de mayor calidad así como gasolinas de alto octanaje.

#### **3.2. Necesidad de una reconfiguración**

Las necesidades energéticas del país se han visto modificadas, por una parte debido a la urgente disminución de emisiones para contrarrestar la contaminación ambiental, así mismo por la falta de abastecimiento de gasolina.

La capacidad de producción de gasolinas de nuestro país es insuficiente ante el aumento del parque vehicular, lo que obliga al país a importar parte de la gasolina que consumimos. El costo de esta se encuentra en continuo aumento, tan solo en el periodo de Enero a Abril del 2008, la importación de gasolinas le costo al país alrededor de siete mil 70 millones de dólares, esto representa un 74% mas que el mismo periodo de un año atrás que fue de cuatro mil 58 millones de dólares, durante este periodo del presente año se han comprado un promedio de 317 mbpd para abastecer un parque vehicular de más de 20 millones de autos, en la actualidad nuestro país demanda aproximadamente 779 mbpd, cantidad que no se produce entre las seis refinerías del país.

Los beneficios principales que nos ofrece una reconfiguración de la planta se encuentran en el aumento de la producción de gasolinas, tomando en cuenta que el proceso de alquilación de olefinas ha tomado importancia debido a los productos de alto octanaje, además permiten usar las relaciones altas de compresión en los motores de combustión interna lo que incrementa su rendimiento, es decir se producirá más gasolina y de mejor rendimiento.

Gracias a la alquilación el aprovechamiento del crudo es mayor, debido a la cantidad de productos como gasolina, en 1920 de 159L de crudo se producían 41.5 L de gasolina hoy en día la cantidad es de 79.5L, lo cual implica un aumento en el rendimiento de poco mas de 160%.

## **4. Unidad de Alquilación usando HF como catalizador**

### **4.1. Antecedentes Históricos**

La Alquilación tiene sus inicios entre 1930 y principios de los 40's, desarrollado por Universal Oil Products (UOP) este proceso nace bajo las necesidades de obtener un combustible de alto octanaje para consumo de aviones durante la segunda guerra mundial; lo que se reflejaría en una mayor velocidad. A mediados de los años cincuenta el desarrollo y la aceptación por parte de los consumidores a los motores de auto con alto desempeño fueron el detonante que orilló a las refinerías a incrementar la producción y la calidad de gasolinas de alto octanaje. Las ventajas brindadas por las nuevas tecnologías de reformación catalítica, tal como la desarrollada por UOP, hizo posible que las refinerías contara con una herramienta para la producción de combustibles de alta calidad.

Debido a que el desempeño de los autos se encuentra íntimamente ligado al alto octanaje manejado en el combustible de los mismos, la expansión para la alquilación no se hizo esperar.

A principios de los años sesenta la alquilación con HF había virtualmente desplazado a las unidades de polimerización de combustible, mismas que gradualmente dejaron de operar.

La importancia del proceso de alquilación con HF no ha disminuido por el contrario aumentó con el paso de los años debido a su contribución en la producción de combustibles bajos en plomo. Este proceso le brinda a las refinerías una herramienta eficiente y económicamente viable.

Sin embargo el proceso de alquilación se puede llevar a cabo sin catalizador, este proceso se lleva a cabo a altas presiones y temperaturas por lo cual los costos de operación son elevados. Los

catalizadores que se pueden utilizar son el HF o el  $H_2SO_4$ . Sin embargo el proceso que utiliza el  $H_2SO_4$  muy sensible a la temperatura, necesita temperaturas de operación entre 50 y 70°F o menos; la temperatura es necesaria para minimizar las reacciones de oxido-reducción que forman asfaltos y dióxido de azufre. En cambio las temperaturas de operación con el HF son de 100°F o menos, debido las condiciones climáticas de la planta de Minatitlán este es el proceso utilizado, utilizar  $H_2SO_4$  elevaría considerablemente los costos de operación. Por que a fin de cuentas el elegir un proceso de alquilación para la producción de gasolinas se encuentra determinado por la economía, por ejemplo, si se dispone de diseños de reactores más pequeños y sencillos, costo de Refrigerantes, flexibilidad de la temperatura de operación, costo del ácido que se utilizara, etc.

La opción de los procesos de alquilación se encontraba limitada a estos dos ácidos, sin embargo el tratar con ácidos tampoco es sencillo se necesitan altas medidas de seguridad, equipo de material especial para transportarlo, etc.

Cuál será el futuro de los procesos de alquilación, actualmente se están desarrollando nuevos catalizadores que evitaren el uso de ácidos en el proceso, se han desarrollado catalizadores sólidos (principalmente zeolitas), con los cuales se logra realizar la alquilación sin la utilización de ácidos.

#### **4.2. Mecanismo de las Reacciones de alquilación**

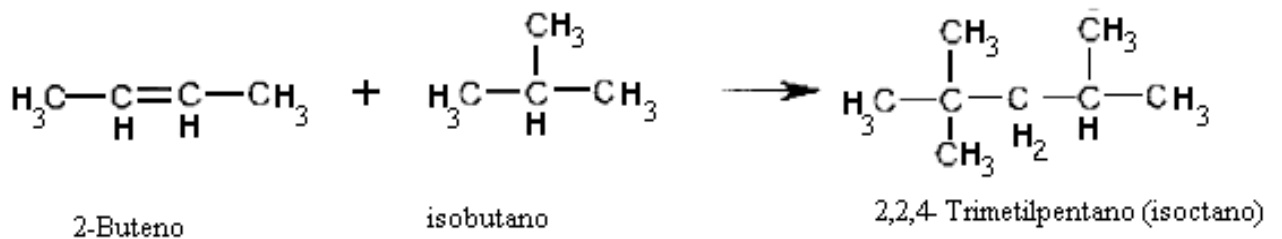
Para poder producir la alquilación, se unen una corriente con las olefinas, el catalizador que es el ácido fluorhídrico y una corriente con alto contenido de isobutano. Lo que resulta de la mezcla de estos es una emulsión. El ácido forma parte de la reacción, al completarse se libera por lo que se puede utilizar de nuevo, sin embargo el HF se diluye con agua y los aceites solubles en agua. A lo anterior se les



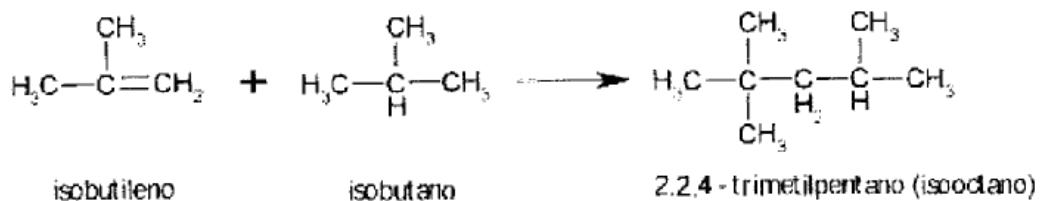
consideran contaminantes los cuales son removidos por fraccionamiento para aumentar la pureza del ácido; el ácido también se pierde en lo anterior así como en la formación de fluoruros orgánicos. La alquilación se caracteriza por ser un proceso simultáneo de reacciones consecutivas y transferencia de masa, las reacciones de alquilación se llevan a cabo en la fase ácida.

El ácido se debe presentar en forma excesiva, es necesaria antes de que la olefina y el isobutano se combinen para formar el alquilado. Las reacciones principales que tienen lugar en la alquilación y que son de interés para la industria se enumeran a continuación:

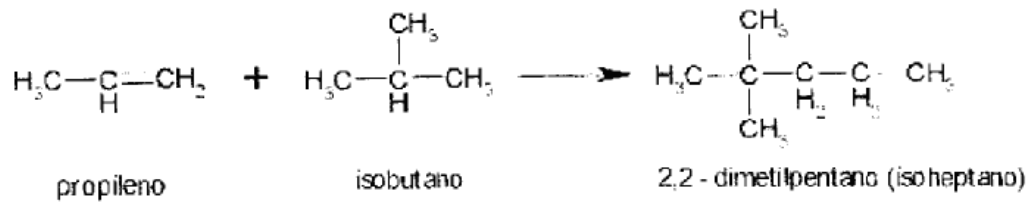
#### Reacción 1



#### Reacción 2



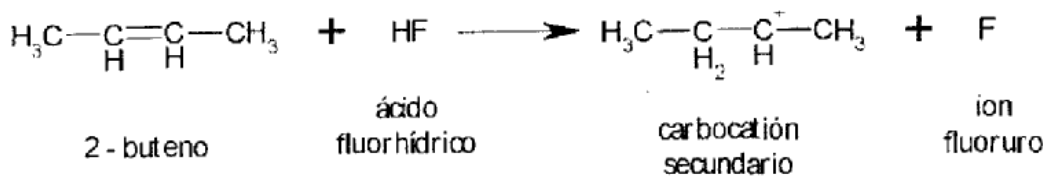
#### Reacción 3



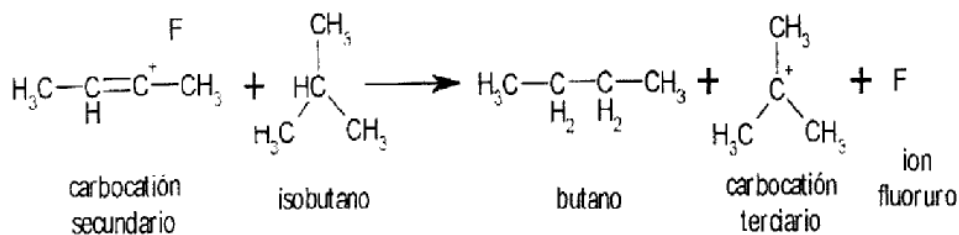
Para explicar la reacción de alquilación por medio de catalizadores ácidos se han desarrollado varias teorías dando lugar como la más acertada la que propone una formación de iones carbonio por transferencia de protones desde el catalizador a las moléculas de olefinas, seguida de la combinación con isobutano para producir cationes terbutilo estos iones reaccionan con otras moléculas de 2-buteno para formar iones C<sub>8</sub> capaces de reaccionar con isobutano para formar las parafinas. Para que esta reacción se lleve a cabo es necesario formar un carbocatión terciario, el cual se puede obtener por 2 caminos.

Mecanismo uno: Cuando reacciona un 2-buteno con HF para obtener un carbocatión secundario, mostrado en la reacción 4, este a su vez reacciona con el isobutano produciendo butano y el carbocatión terciario,

**REACCIÓN 4:**



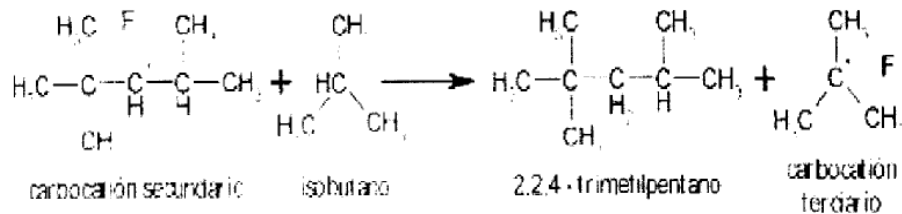
**REACCIÓN 5:**





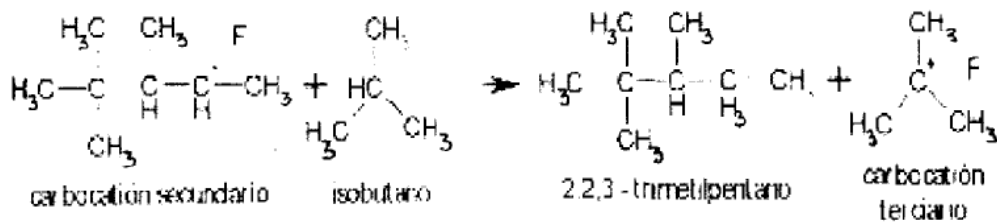
El carbocatión obtenido reacciona con isobutano produciendo así el alquilado y nuevamente el carbocatión terciario, esto presenta la cadena de reacción.

### REACCIÓN 9

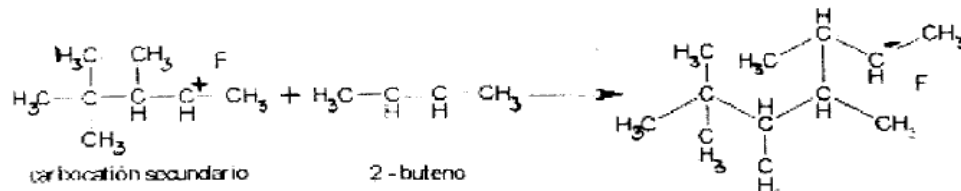


Sin embargo también se tienen reacciones secundarias útiles, tales como la reacción 10; así como la formación de compuestos de mayor peso molecular, reacciones 11 y 12; se pueden obtener compuestos de doce carbonos como se especifica en las reacciones 13 y 14.

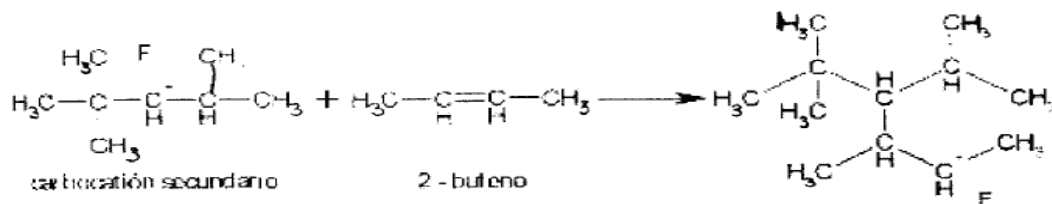
### REACCIÓN 10



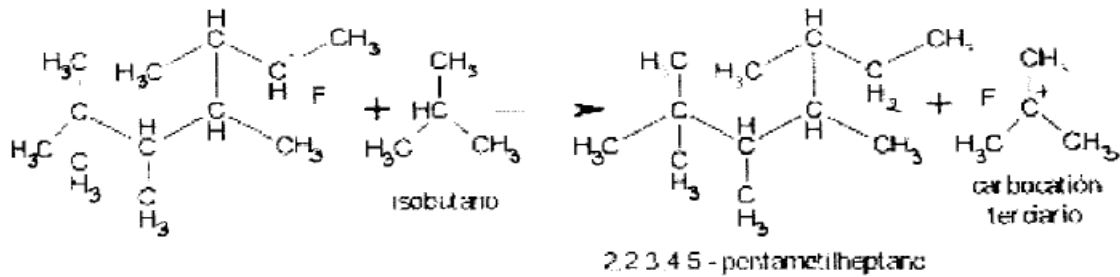
### REACCIÓN 11



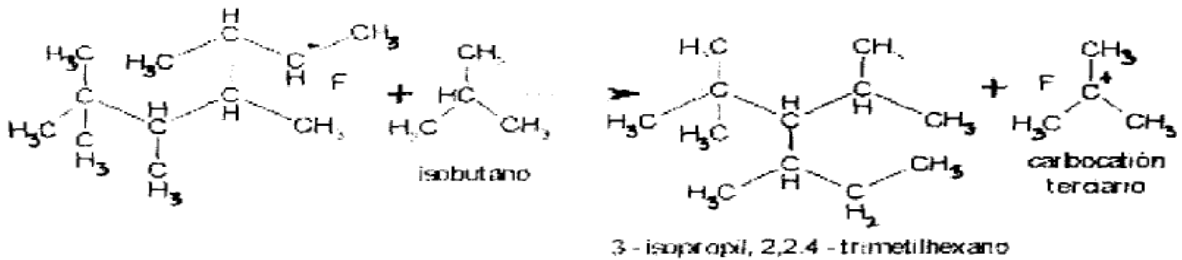
### REACCIÓN 12



### REACCIÓN 13



### REACCIÓN 14



## 4.3. Variables de las reacciones

Debido al amplio conjunto de reacciones que se tienen dentro de un proceso de alquilación, ninguna de ellas se lleva a cabo al 100%. Las condiciones deben ser tales que favorezcan las reacciones deseadas, las que producen octanos, con el fin de evitar las reacciones no deseadas tal como la reacción de polimerización. Las variables que se tienen para fijar las condiciones del reactor son las siguientes

4.3.1. Relación de isobutano-olefinas: Relación molar de estos en la alimentación al reactor, se sabe que el octanaje del alquilado es más alto entre mayor sea esta relación; sin embargo los costos del fraccionamiento y del bombeo también incrementan, si la cantidad de olefinas es alta estas tienden a formar polímeros por si misma. Cuando la concentración de olefinas es baja la polimerización es lenta y la reacción se desfavorece. Esta relación es de 8.884 en los reactores de la unidad de alquilación.

4.3.2.Hidrocarburos inertes en la carga: Si en la corriente se encuentran impurezas tales como mercaptanos, butadieno y azufre, estos aumentan la formación de polímeros. En este caso nuestras corrientes de alimentación al reactor no cuentan con este tipo de compuestos.

4.3.3.Relación del ácido hidrocarburo en el reactor: La cantidad de alquilado producido puede ser incrementada con un aumento en la cantidad del ácido en el reactor, si la emulsión es pobre en ácido se tendrá una reacción incompleta.

4.3.4.Temperatura: La reacción de alquilación es exotérmica produciendo 300 BTU/lb de alquilado, este calor debe ser removido para tener control sobre la temperatura del reactor, la calidad del alquilado varía con la temperatura del reactor teniendo estudios de 15 a 66 °C. Al incrementar la temperatura de reacción el consumo de HF es mayor dado que aumenta la producción de polimerización. La temperatura para estos reactores es de 38°C.

4.3.5.Agitación de la mezcla: La mezcla entre los reactivos se efectúa íntimamente a la entrada del reactor, esto se lleva a cabo por medio de líneas individuales a la llegada que están sujetas a un cambio de presión, por lo que hay una agitación que produce el contacto entre los compuestos.

4.3.6.Pureza de HF: Debido a que el ácido fluorhídrico se va contaminando gradualmente con impurezas orgánicas, la pureza de este se ve afectada, sin embargo este también influye en el octanaje del producto. Un contenido máximo de agua entre 1.5- 2 % en peso es el más recomendado para lograr un alquilado de calidad así como bajos niveles de corrosión en los equipos.

#### **4.4. Estructura de la planta**

Actualmente existen las reacciones de alquilación se pueden llevar a cabo utilizando como catalizador  $H_2SO_4$  o HF. Para esta planta como se menciona anteriormente se utiliza HF, para el este caso solo existen dos tipos de reactor cuyo diseño pertenece a: Phillips Petroleum Company y Universal Oil Petroleum, en la planta se tiene este último. Sin embargo una planta de alquilación se compone de las siguientes etapas principales, cada una con su detallada descripción:

##### **4.4.1. Sección de preparación:**

Se encarga de adecuar la corriente de alimentación a la reactor de alquilación para que esta cumpla con los requerimientos del proceso lo que se vera reflejado en una mayor eficiencia. Esta es la parte que se dedica a separar los contaminantes e inertes de la alimentación al reactor.

La corriente principal de alimentación a la planta de alquilación proviene de la unidad de hidrogenación de la refinería, esta es la corriente 1, a esta corriente se le unen dos corrientes mas, la corriente 2 con un alto contenido de isobutano y la segunda la

recirculación de un la fase orgánica 11 proveniente del segundo decantador A-2. Esta mezcla de las tres corrientes se alimenta al primer decantador A-2 con el fin de retirar del proceso la fase acuosa 5 la anterior es una corriente líquida a 30°C, la fase orgánica que sale de este equipo es la corriente 4 , la cual con ayuda de la bomba F-1 se convierte en ña corriente 6 que tiene una presión de 2038kPa, la cual se divide en dos corrientes de flujos iguales 6-A y 6-B, las corrientes anteriores son las alimentaciones que de los secadores G-1 y G-2, estas son corrientes en fase líquida a 38°C.

Cada secador tiene dos corrientes de alimentación, así como dos corrientes de salida en el caso del secador G-1 son las corrientes 7-A y 14-A, esto será equivalente al secador G-2. El fluyente de los secadores son dos corrientes que se unen a la de igual composición para dar origen a las corrientes 7 esta se encuentra en fase vapor a 204.4°C se hace pasar por un enfriador E-1 de donde obtenemos la corriente 8 la cual se encuentra en fase líquida a 55°C, esta a su vez pasa por un enfriador E-2 de donde sale la corriente 9 a 38°C, la anterior corriente se lleva al decantador A-2 para separar la

fase acuosa, corriente 12, que sale del proceso junto con la corriente 13 , la fase orgánica 11 que se recircula. La otra corriente proveniente de los secadores 14 que se encuentra libre de agua y se divide en las corrientes 15 y 17, la proporción es de 13% para la 15 esta pasa por un calentador D-1 donde el efluente 16 a 232.2°C es dividida en 16-A y 16-B para ser recirculadas a los secadores. Mientas que la corriente 17 será enfriada a 38°C que es la corriente 18 y esta es dividida en 18-A y 18-B que son las corrientes directas de alimentación a los reactores de alquilación.



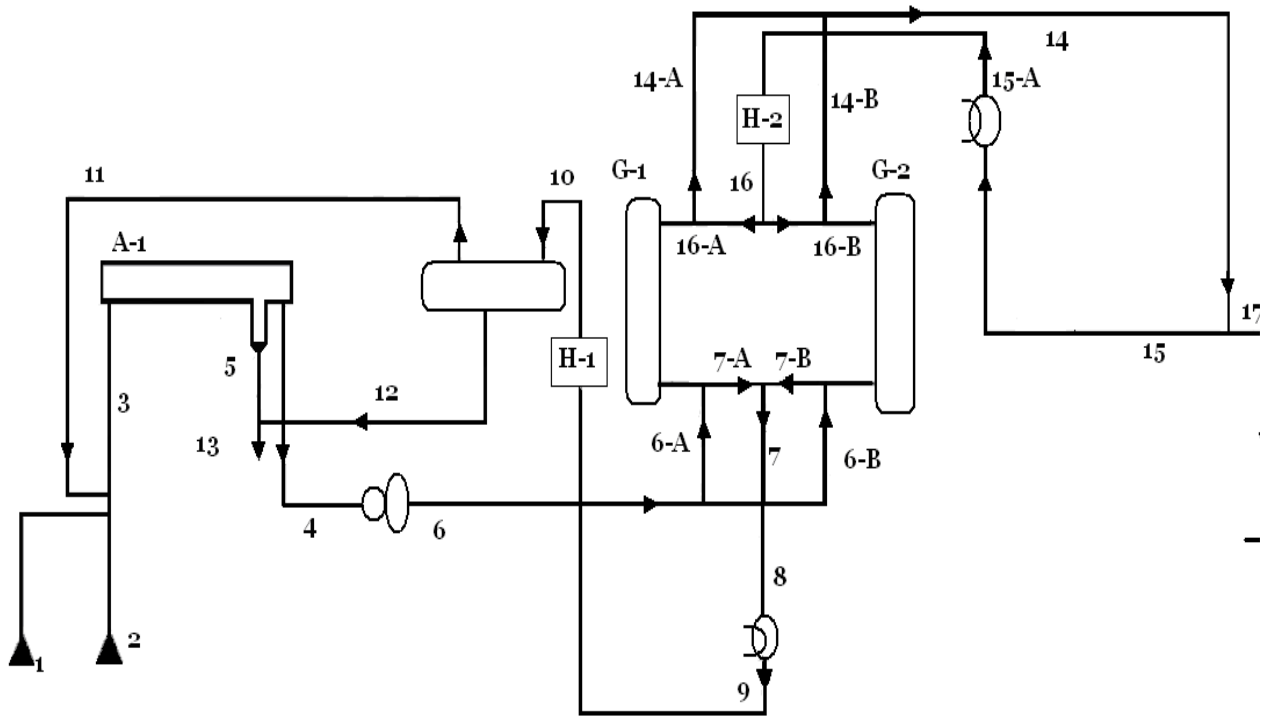


Fig. 15 Diagrama de la sección de preparación

4.4.2. Sección de reacción:

Regeneración de HF y tratamiento: La corriente de alimentación se divide en 2 para entrar a los reactores de alquilación donde se pone en contacto con el HF. En esta planta la alquilación se lleva a cabo en un reactor diseñado por la compañía UOP, Universal Oil Petroleum, que es similar al que se muestra en la siguiente figura

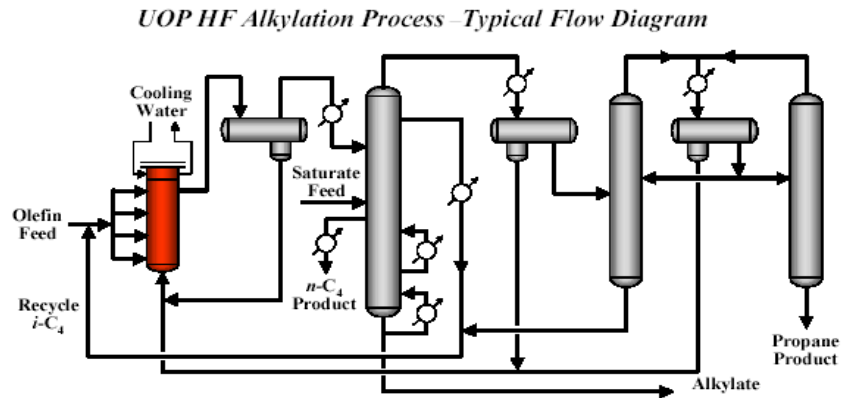


Fig. 16 Diagrama general de un reactor UOP para alquilación.

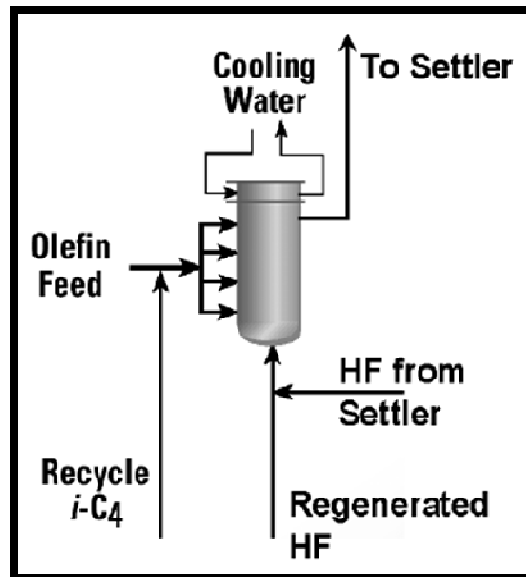


Fig. 17 Estructura general del reactor diseñado por UOP

En esta planta se tienen dos reactores de este tipo estos se llaman J-1 y J-2. La alimentación a los reactores consta de tres corrientes: la primera proveniente de la etapa de preparación de olefinas la 18, la corriente que contiene el catalizador 19, y la corriente 20 que contiene principalmente la recirculación de isobutano, las tres corrientes anteriores se encuentran a 38°C se dividen en 2 corrientes cada una (A y B) en iguales proporciones de 50% cada una. La mezcla de las corrientes anteriores serán alimentadas como 21-A y 21-B.

Dentro de estos reactores se realizan múltiples reacciones, todas tienen como reactivo el isobutano, a la mezcla de productos de estas reacciones se le llama alquilado. Las reacciones finales simplificadas se muestran en la tabla 4. Donde los coeficientes negativos nos indican cuanto se consume de un reactivo, y los coeficientes positivos nos indican cuanto genera de productos.

Tabla 4. Lista de reacciones

| Reactivo 1          | Reactivo 2       | Productos             |
|---------------------|------------------|-----------------------|
| <b>-1 Propano</b>   | -1.073 i- Butano | 0.05 i-Pentano        |
|                     |                  | 0.045 23-M Butano     |
|                     |                  | 0.39 23-M Pentano     |
|                     |                  | 0.31 24- M Pentano    |
|                     |                  | 0.04 224-M Pentano    |
|                     |                  | 0.03 225-M Hexano     |
|                     |                  | 0.03 335-M Heptano    |
|                     |                  | 0.02 nC <sub>11</sub> |
|                     |                  | 0.02 nC <sub>12</sub> |
|                     |                  | 0.01 NC <sub>13</sub> |
| 0.131 Propano       |                  |                       |
| <b>-1 i- Buteno</b> | -1.062 i- Butano | 0.054 i-Pentano       |
|                     |                  | 0.040 23-M Butano     |
|                     |                  | 0.030 23-M Pentano    |
|                     |                  | 0.040 24- M Pentano   |
| 0.049 224-M Pentano |                  |                       |

|                    |        |           |                        |
|--------------------|--------|-----------|------------------------|
|                    |        | 0.105     | 233-M Pentano          |
|                    |        | 0.105     | 234-M Pentano          |
|                    |        | 0.018     | 23-M Pentano           |
|                    |        | 0.069     | 24- M Hexano           |
|                    |        | 0.020     | 225-M Hexano           |
|                    |        | 0.030     | 335- M Heptano         |
|                    |        | 0.010     | n C <sub>11</sub>      |
|                    |        | 0.020     | nC <sub>12</sub>       |
|                    |        | 0.010     | nC <sub>13</sub>       |
| <b>-1 1-Buteno</b> | -1.058 | i- Butano | 0.050 i-Pentano        |
|                    |        |           | 0.020 23-M Butano      |
|                    |        |           | 0.030 23-M Pentano     |
|                    |        |           | 0.030 24-M Pentano     |
|                    |        |           | 0.313 224- M Pentano   |
|                    |        |           | 0.126 233-M Pentano    |
|                    |        |           | 0.108 234-M Pentano    |
|                    |        |           | 0.160 23-M Hexano      |
|                    |        |           | 0.107 24-M Hexano      |
|                    |        |           | 0.008 225M- Hexano     |
|                    |        |           | 0.050 225-M Heptano    |
|                    |        |           | 0.005 nC <sub>11</sub> |
|                    |        |           | 0.019 nC <sub>12</sub> |
|                    |        |           | 0.006 nC <sub>13</sub> |

|                        |                  |                        |
|------------------------|------------------|------------------------|
| <b>-1 cis2- Buteno</b> | -1.042 i- Butano | 0.045 i -Pentano       |
|                        |                  | 0.010 53-M Butano      |
|                        |                  | 0.030 23-M Pentano     |
|                        |                  | 0.030 24-M Pentano     |
|                        |                  | 0.475 224-M Pentano    |
|                        |                  | 0.140 233-M Pentano    |
|                        |                  | 0.214 234-M Pentano    |
|                        |                  | 0.023 23-M Hexano      |
|                        |                  | 0.050 24-M Hexano      |
|                        |                  | 0.007 225-M Hexano     |
|                        |                  | 0.003 335- M Heptano   |
|                        |                  | 0.003 nC <sub>11</sub> |
|                        |                  | 0.010 nC <sub>12</sub> |
| <b>-1 tr2-Buteno</b>   | -1.042 i-Butano  | 0.045 i- Pentano       |
|                        |                  | 0.010 23-M Butano      |
|                        |                  | 0.030 23-M Pentano     |
|                        |                  | 0.030 24-M Pentano     |
|                        |                  | 0.475 224-M Pentano    |
|                        |                  | 0.140 233-M Pentano    |
|                        |                  | 0.214 234-M Pentano    |
|                        |                  | 0.023 23-M Hexano      |
|                        |                  | 0.050 24-M Hexano      |
|                        |                  | 0.007 225-M Hexano     |

0.003 335-M Heptano

0.003 n C<sub>11</sub>

0.010 nC<sub>12</sub>

Debido a que los reactores se resolvieron como reactores de conversión en vez de reactores catalíticos, de los cuales obtendríamos una emulsión, primero separamos el ácido de las corrientes, con ayuda de los equipos L-1 y L-2, de lo cuales obtenemos una corriente rica en ácido (con la mayor parte del ácido a recircular) y otra corriente con las olefinas a transformar que son las corrientes 23-A y 23-B. Estas corrientes entran a los reactores J-1 y J-2. El resultado de las reacciones se encuentra en una sola corriente por cada reactor, estas unen para dar lugar a la 25 que pasa por dos intercambiadores de calor que lo preparan para la alimentación a la torre fraccionadora.

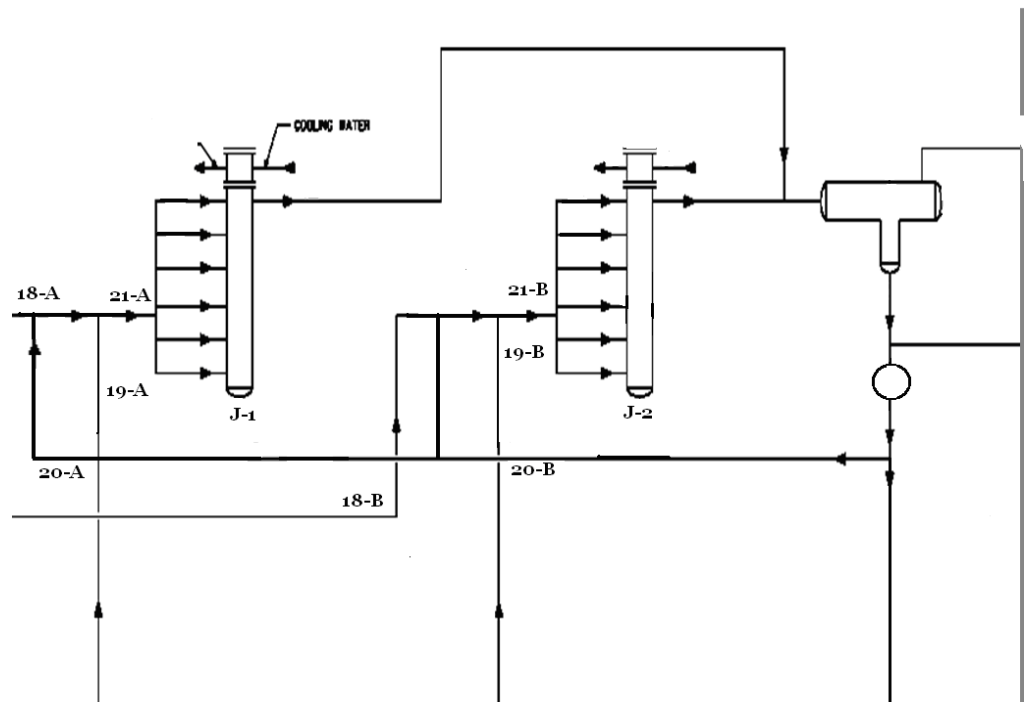


Figura 18. Diagrama de la sección de reacción

#### 4.4.3. Sección de fraccionamiento y tratamiento de Productos:

Al efluente del reactor, pasa por los intercambiadores de calor, para adecuarlo a la alimentación de la torre.

Una vez teniendo el alquilado 33 es alimentado a la torre fraccionadora, de esta se obtienen corrientes tales como 38, 43, y 41 las cuales tienen que ser retroalimentadas la torre ya que no cuentan con las características de pureza buscadas. Incluso parte de los fondos se deben de recircular 46 y la otra parte de los fondos 45 después de ser tratado por algunos filtros, para asegurarnos de que no tiene compuestos no deseados, se separa y almacena como el alquilado esta corriente aun contiene trazas de propano sin embargo en su mayoría esta compuestas por el productos de las reacciones tales como los isoctanos.

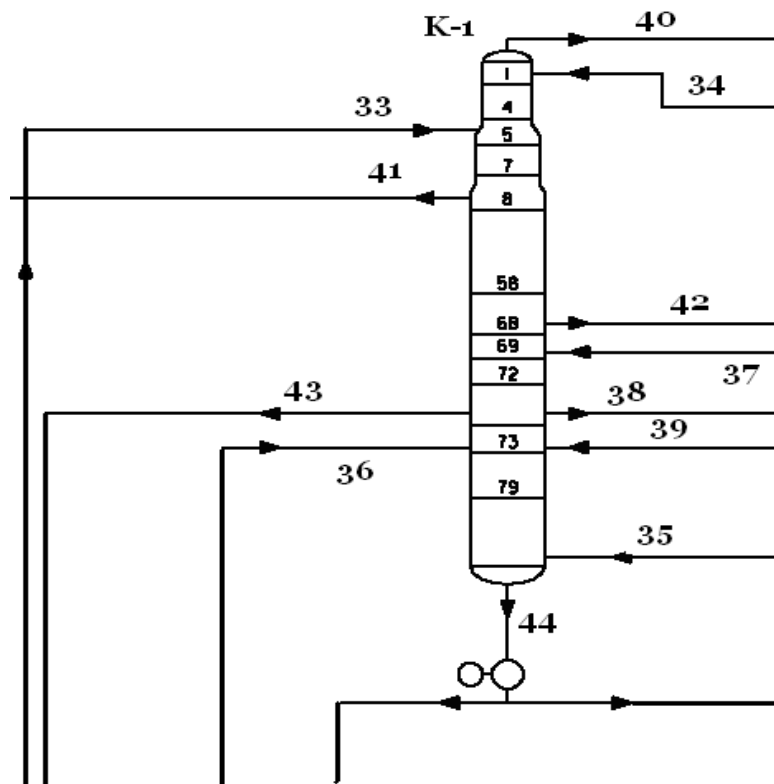


Figura 19. Diagrama de la torre despropanizadora

De la corriente 42: Se recupera el n-butano haciendo pasar a la corriente por un rectificador de donde parte se retroalimenta a la torre en la corriente 37 y la otra corriente 53 se hace pasar por condensador, cámaras de alúmina después un decantador de donde se le retira la fase acuosa, posteriormente una cámara de KOH a la corriente de salida se pasa por un filtro de arena y la corriente de salida 64 es impulsada por una bomba para ser almacenado

Como se puede observar en el diagrama algunas corrientes salen a un intercambiador de calos para ser alimentadas de nuevo, a excepción de la corriente 64 que va a un calentador y regresa en forma de la corriente 39.

La torre de fragmentación cuenta con seis salidas:

- Corriente 40: Esta corriente es la salida del domo de la torre, a esta corriente se le unen dos corrientes mas, el domo del rectificador del ácido 101 y el domo del rehervidor de la torre, 76 y se alimenta al ultimo asentador de ácido, del cual se obtienen 2 tres corrientes; la 69 que contiene el ácido con leves trazas de hidrocarburos esta se recircula a la alimentación de los reactores; la corriente 67 principal alimentación de un separador. El separador tiene la función de eliminar la mayor parte de hidrocarburos de la corriente, que sale en los fondos 75 que se divide y se recupera una parte en la corriente 80. La parte final de esta línea es el la salida de los hidrocarburos que contenía la corriente 80, con ayuda de cámaras de alúmina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), KOH y arena nos dan la salida de propano e iso butano.



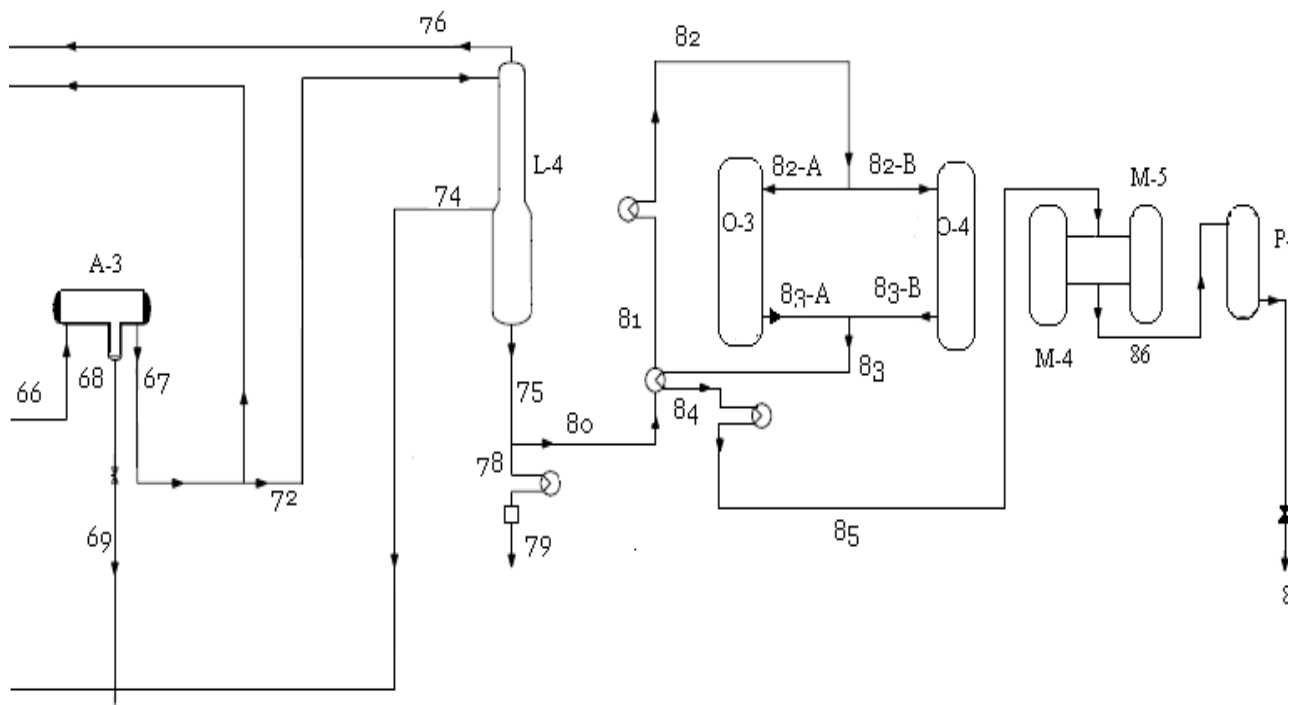


Figura 20. Diagrama del tratamiento de la corriente 40

- La corriente 41: Esta es la salida del plato número 8, se encuentra en fase vapor, es una corriente rica en isobutano, pasa por el intercambiador N1 y posteriormente con un enfriador E-5, sale en forma de 90 y se bombea con ayuda de F-2 para alimentar a los reactores en forma de 20.

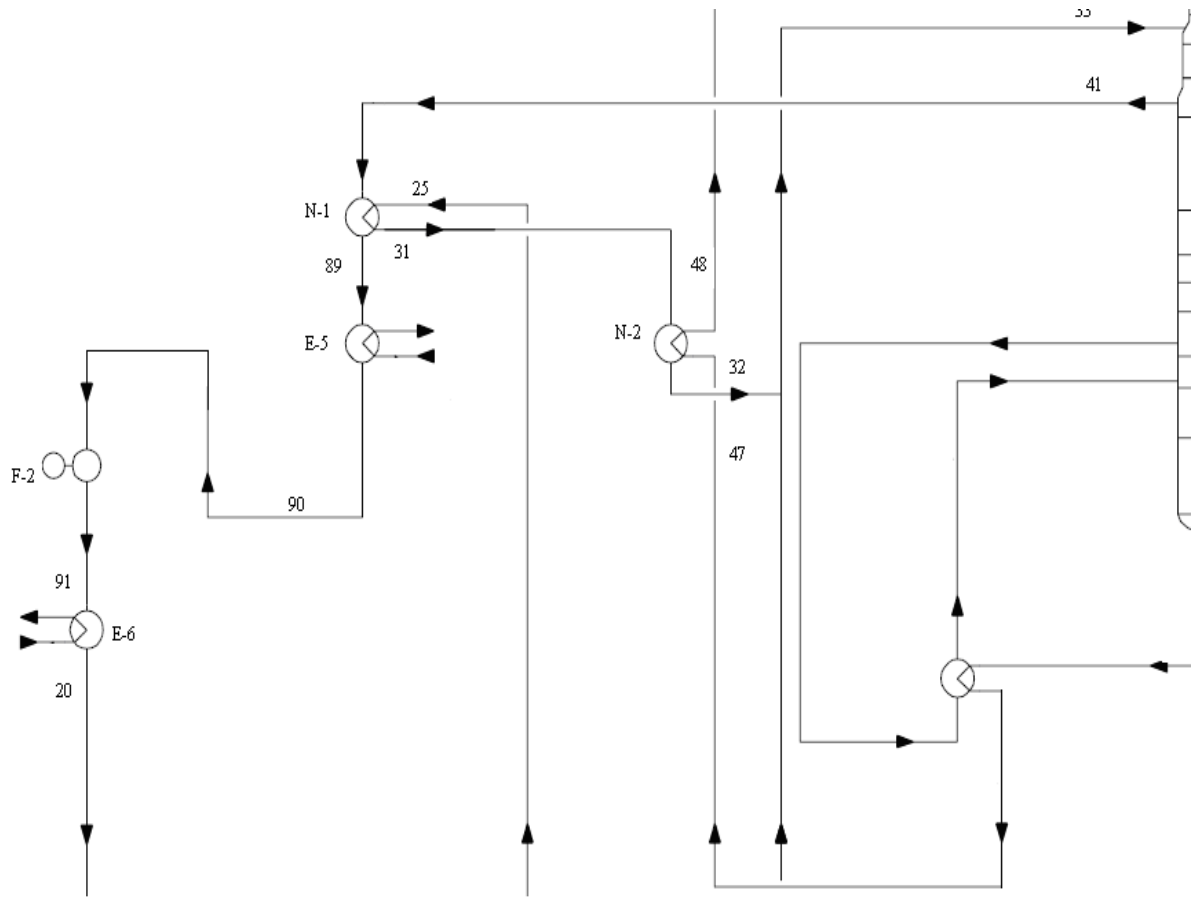


Figura 21. Diagrama de la corriente 41

- Corriente 42: Sale del plato 68 se encuentra en fase vapor, alimenta a la línea encargada de la salida del n-butano; como primer paso se tiene un rectificador, este cuenta con dos alimentaciones y dos salidas, se alimentan las corrientes 42 y 52 esta ultima es la recirculación de una parte de la corriente 53 la cual es una salida, lo mismo que la corriente 37 que se alimenta de nuevo a la torre en el plato 69; a la otra parte de la corriente 53, pasa por un calentador, cámaras de alúmina, cámaras de KOH un tanque asentador y un filtro de arena, se obtiene la corriente de n-butano que se lleva a almacenar.

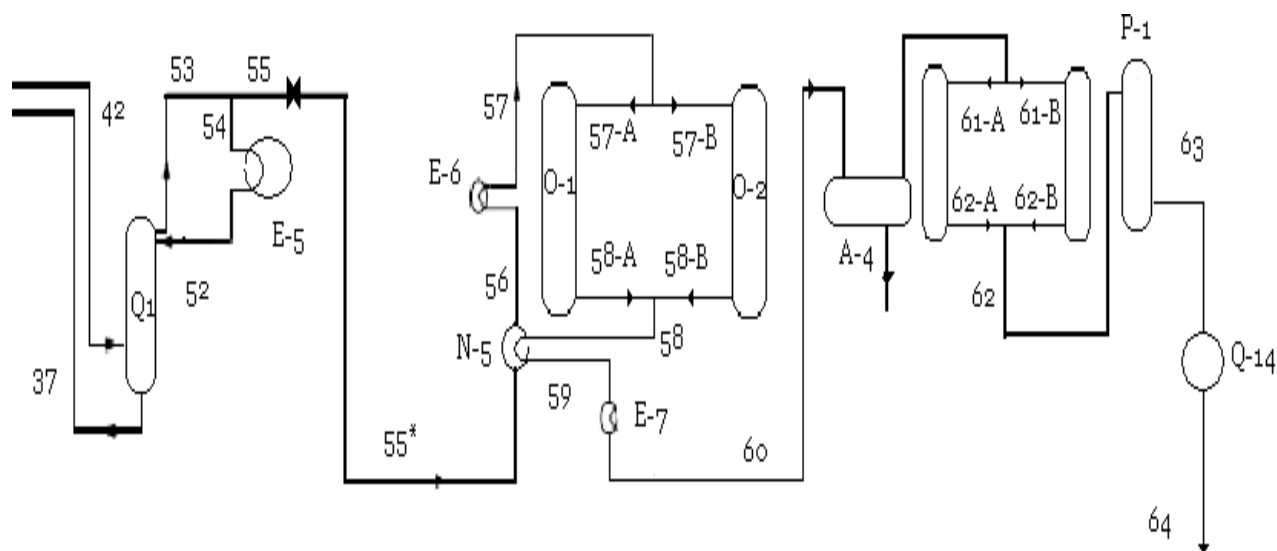


Figura 22. Diagrama de la corriente 42

- Corriente 43: Sale del plato 72, se encuentra en fase líquida, esta corriente pasa por intercambiador de calor, para aumenta su temperatura, y se recircula de nuevo a la columna como la corriente 36 un plato mas abajo 73.

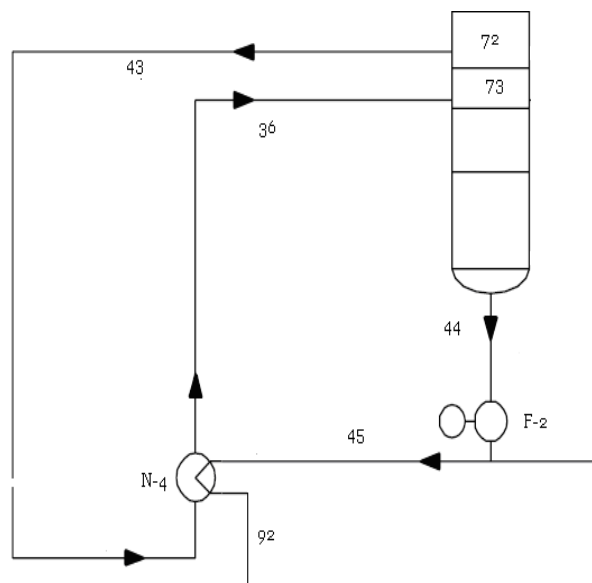


Figura 23. Diagrama de la corriente 43

- Corriente 38: Corriente en fase liquida sale del plato 72, pasa por un calentador y se alimenta de nuevo a la columna en el plato 73, es decir es un pump around

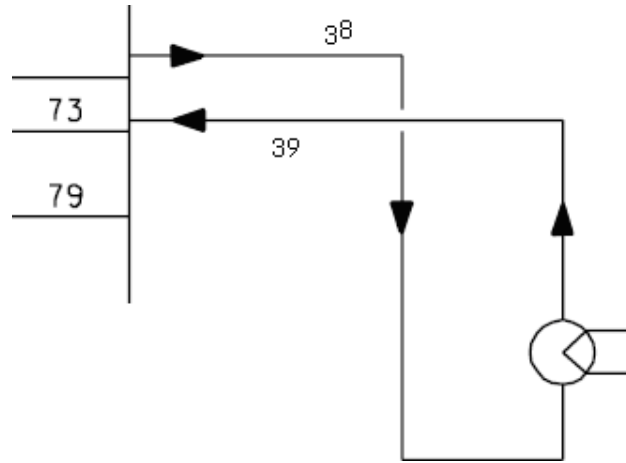


Figura 24. Diagrama de la corriente 38

- Corriente 44: Se refiere a los fondos de la torre, se divide en dos corrientes 46 y 45, la primera se recircula en el fondo de la torre, la segunda pasa por varios intercambiadores para posteriormente dividirse, donde una parte se hace pasar por una cámara de alúmina y la salida de esta al igual que la otra parte de la corriente son el Alquilerado final.

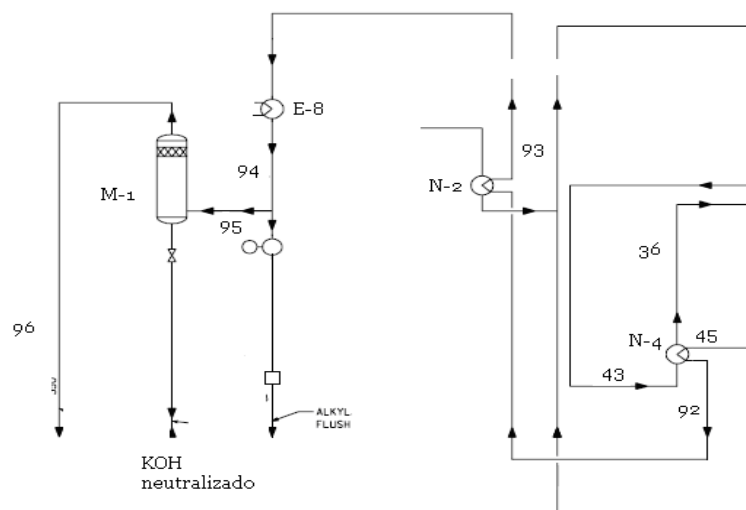


Figura.25. Diagrama de la corriente 44] fondo de la columna

#### **4.5. Unidades en el Proceso de la Planta de Alquilación con HF**

A cada equipo se le asigna una clave. La lista de los equipos se proporciona a continuación.

Tabla 5. Claves de los equipos del proceso

| <b>Clave de la unidad</b>  | <b>Tipo de Equipo</b>      |
|----------------------------|----------------------------|
| <b>A-1, A-2, A-3 y A-4</b> | <b>Asentadores</b>         |
| <b>B-1, B-2,... B-18</b>   | <b>Mezcladores</b>         |
| <b>C-1, C-2,... C-18</b>   | <b>Separadores</b>         |
| <b>D-1</b>                 | <b>Calentadores</b>        |
| <b>E-1, E-2, ... E-15</b>  | <b>Enfriador</b>           |
| <b>F-1, F-2, ... F-6</b>   | <b>Bombas</b>              |
| <b>G-1 y G-2</b>           | <b>Secadores</b>           |
| <b>H-1, H-2, ... H-14</b>  | <b>Recirculaciones</b>     |
| <b>I-1, I-2, ... I-7</b>   | <b>Válvulas</b>            |
| <b>J-1 y J-2</b>           | <b>Reactores</b>           |
| <b>K-1</b>                 | <b>Torre fraccionadora</b> |
| <b>L-1, L-2, L-3 Y L-4</b> | <b>Separadores</b>         |
| <b>M-1, M-2, ... M-5</b>   | <b>Cámara de OH</b>        |
| <b>N-1, N-2, ... N-5</b>   | <b>Intercambiadores</b>    |
| <b>O-1, O-2, O-3 y O-4</b> | <b>Cámara de Alúmina</b>   |
| <b>P-1 y P-2</b>           | <b>Filtros de arena</b>    |
| <b>Q-1</b>                 | <b>Rectificador</b>        |

## **5. Simulador Aspen HYSYS**

### **5.1. Introducción**

Este es un programa de Aspen tech; para lograr la simulación de un proceso de esta naturaleza se requiere tener un acercamiento con el simulador, así que como primer paso se tiene una familiarización con el simulador; esto por medio de pequeños procesos tales como ciclos de refrigeración así como su mejoramiento; con ayuda del programa Aspen HYSYS 2006 se logró la simulación de la planta, para lo cual se necesitaron datos de las corrientes, equipos, así como de los procesos, tales como termodinámicos, cinéticos, químicos y físicos. Para lograr una simulación fiel a la planta se tiene que comprender cada paso del proceso, así como la operación de unidades; se obtendrá la solución de su balance de materia, energía y la resolución de los reactores.

### **5.2. Bases históricas de la simulación**

La simulación en estado estacionario ha sido útil para el diseño y evaluación de equipos de proceso e incluso para plantas completas. La modelación de equipos y fenómenos ha sido de suma importancia para la ingeniería química aún desde sus principios, la modelación se constituye en una abstracción del mundo que asume la incertidumbre de algunas suposiciones y con base en ellas obtiene un resultado simplificado que representa en mayor o menor medida al objeto de estudio.

La discusión inicial en cuanto a la modelación surge cuando se crearon varias propuestas para explicar un mismo fenómeno debido a que siempre se tienen dos maneras de representarlo la rigurosa y la simple. Se optó por los modelos simples a partir del gran avance que

género de Prandtl en sus trabajos de capa límite donde uso suposiciones lineales que permitían una resolución rápida sin emplear métodos matemáticos complejos en 1904. De aquí parten los métodos de modelación donde se tienen constantes de flujo, correlaciones empíricas, tipos de flujo; lo cual nos ha permitido diseñar intercambiadores de calor, columnas de absorción y torres empacadas entre otros.

Para obtener una simulación se requiere de modelos que describan apropiadamente el comportamiento del sistema o emplear una aproximación lineal del sistema que lo describa en las cercanías de los puntos normales de operación. Para corregir las deficiencias se emplea un método de modelación local, que puede proporcionar un modelo simple del sistema y representar adecuadamente el complejo comportamiento del sistema real.

Para simular operaciones unitarias se utilizaron inicialmente modelos macroscópicos que solo relacionaban las condiciones de operación del equipo, la desventaja de estos es que no brindaban información de sus dimensiones físicas, por eso solo se utilizaban para el diseño conceptual.

La simulación que se puede realizar de un equipo o planta puede ser estática o dinámica. Sin embargo para que la simulación avanzara también se necesitaban que las herramientas de programación y computación lo hicieran. Como ejemplo de este avance esta la simulación dinámica, esta se comenzó a realizar a mediados del siglo XX para lo que se usaron computadoras análogas, y los procesos simulados eran desde destilación por lotes hasta corrientes de alimentación a los intercambiadores de calor. El programar la simulación era una tarea que demandaba horas de trabajo y los equipos necesitaban mantenimiento constante; el simular una columna de destilación se requerían centros de cómputo de gran tamaño pues se resolvían más de cien ecuaciones diferenciales ordinarias, por lo que el costo era desmedido, in embargo las

empresas petroquímicas en su mayoría invirtieron grandes sumas de dinero pues las ganancias debido a un mejor diseño y control justificaban los grandes costos de la simulación.

A partir de 1965 con la llegada de las computadoras digitales se eliminó la limitante del tamaño, se simplificó la programación, por lo que la simulación avanzó grandes pasos ya que podía resolver miles de ecuaciones de todo tipo y se desarrollaron nuevos métodos numéricos para resolver satisfactoriamente las ecuaciones algebraico-diferenciales que se planteaban los modelos. Ahora la gran limitante era la velocidad de cómputo.

Entre 1970 y 1990 comenzaron a surgir simuladores de procesos comerciales que podían describir el comportamiento estático de los procesos químicos, y a finales del siglo XX la velocidad de procesamiento de las computadoras permitió el desarrollo de los simuladores dinámicos que en la actualidad incluyen una gran cantidad de las operaciones unitarias más importantes en ingeniería química, un área que se encuentra en cambio continuo y rápido de forma que cada nueva versión de un simulador incluye mejoras y adiciones en cuanto a herramientas se refiere.

Con el avance de las herramientas de computación los simuladores se han vuelto más rápidos, seguros y confiables, esto ha permitido que el tiempo para probar un prototipo se realice en corto tiempo, es posible emplearlos en etapa de diseño y escalado para establecer la viabilidad de algún sistema y de ser posible optimizarlo.

### **5.3. Ventajas y beneficios de la simulación**

Al hablar de la simulación de procesos nos referimos a esta como la evaluación de él por medio de su representación, donde se utilizan modelos matemáticos que tratan de asemejar lo mejor posible la



realidad, esto nos permite analizar sistemas complejos, describiendo la conducta de una planta y prediciendo su futuro comportamiento.

La simulación de procesos ofrece muchas ventajas entre estas se encuentran:

- Permite el estudio de plantas existentes de una forma rápida económica y completa de la planta real.
- Si se cuenta con un modelo matemático adecuado se puede ensayar intervalos extremos de las condiciones de operario y analizar su comportamiento, cosa imposible en la planta real.
- Permite compara distintos diseños y procesos que todavía no están en operación con el fin de probar si son compatibles o ensayar las hipótesis antes de llevarlos a la práctica en una planta real.
- Podemos introducir y retirar a voluntad el error con resultados reproducibles lo cual no es posible en una planta real.
- Se puede ensayar la sensibilidad de los parámetros costosos.

Sin embargo la simulación también presenta algunas desventajas, entre ellas se encuentran las siguientes:

- La utilidad del estudio depende de la calidad del modelo y las habilidades del modelador, dado que requiere un entrenamiento en los programas a utilizar.
- Los modelos utilizados son de entrada y salida, así que los resultados de salida provienen de los datos introducidos, las soluciones nos sirven como herramienta para el análisis del comportamiento de un sistema a las condiciones especificadas.

En este caso se utilizó el simulador Aspen HYSYS de Aspen Tech, es un procesador que nos permite la utilización de modelos rigurosos para estados dinámicos y en estado estacionario para el diseño de plantas, así como su monitoreo, su resolución, planeación, manipulación y administración entre otras.

El diseño de HYSYS se encuentra orientado en objetos (ecuaciones) junto con un ambiente gráfico de eventos dirigidos, lo que permite una total interacción donde los cálculos se realizan automáticamente cada vez que se suministra nueva información y el acceso a esta no está restringido.

HYSYS ofrece un elevado grado de flexibilidad debido a que existen múltiples caminos para cumplir tareas específicas, esto junto con un acercamiento lógico y consistente de cómo se llevan a cabo estas tareas lo convierten en una herramienta de simulación de procesos versátil.

La utilidad de HYSYS se atribuye a cuatro aspectos clave en su diseño:

- Operación de acontecimientos dirigidos
- Operaciones modulares
- Arquitectura de diagramas de flujo múltiples
- Diseño orientado a objetos

## 6. Simulación y Resultados de la Planta de Alquilación

### 6.1. Datos básicos de Simulación

Al comenzar un nuevo trabajo en Aspen HYSYS se tiene que abrir un caso nuevo este da acceso a la pantalla de inicio donde tendremos que especificar aspectos necesarios para tener acceso al ambiente de simulación, dentro de este aspecto tenemos la ecuación de estado, los componentes del sistema, entre otros.

Para comenzar la simulación se necesita seleccionar todas las sustancias que se encuentran en el sistema, sin importar que estas no se encuentren en todas las corrientes, o en que cantidad. El programa nos brinda una lista en la que se incluyen la gran mayoría.

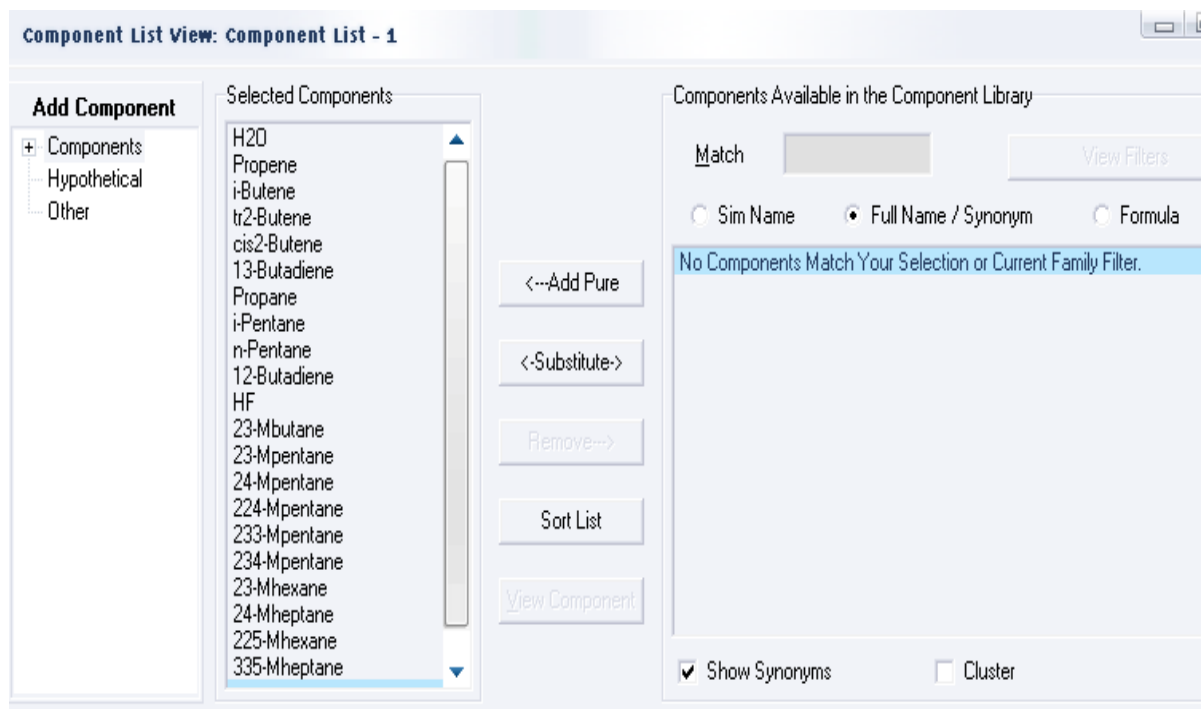


Figura 26. Ventana para especificar los elementos del sistema total

En la ventana anterior podemos ver como se encuentran todas las sustancias ya seleccionadas estos componentes son los que

utilizaremos a lo largo de la simulación, en dado caso de necesitar algún otro, se deberá incluir a partir de aquí.

Para poder simular la planta necesitamos un modelo que se ajuste a los datos, las sustancias y los equipos que se encuentran en la misma, por mencionar algunos. El simulador HYSYS se encuentra diseñado para trabajar por medio de módulos de cálculo, es decir los objetos que se agregan a la hoja de la simulación son equipos que representan un proceso como asentadores de ácido, separadores, bombas, etc.

La base de todos los cálculos son las propiedades de las corrientes y las sustancias que están en ellas, y esas propiedades son calculadas a partir de una ecuación de estado. La ecuación de estado se elige en base a las sustancias que tenemos dentro del sistema, en este caso son hidrocarburos, a excepción de los siguientes compuestos: Agua ( $H_2O$ ), Ácido Fluorhídrico ( $HF$ ), y el polímero producido ( $C_4H_9F$ ). En este caso utilizamos PRSV. Esta es la última especificación necesaria para entrar al ambiente de simulación, así que presionamos el botón inferior con la leyenda "Return to simulation environment" y la pantalla con fondo de color verde se abrirá inmediatamente.

Antes de introducir datos de corrientes se especifican las unidades de nuestras variables, con el fin de tener mayor facilidad al momento de introducir los datos. Para lograr lo anterior se nombra un paquete de variables, en este caso el nombre es "Alkylation plant", posteriormente se seleccionan las unidades en las que deseamos introducir datos tales como; presión, temperatura, etc. Posteriormente estamos listos para especificar corrientes.

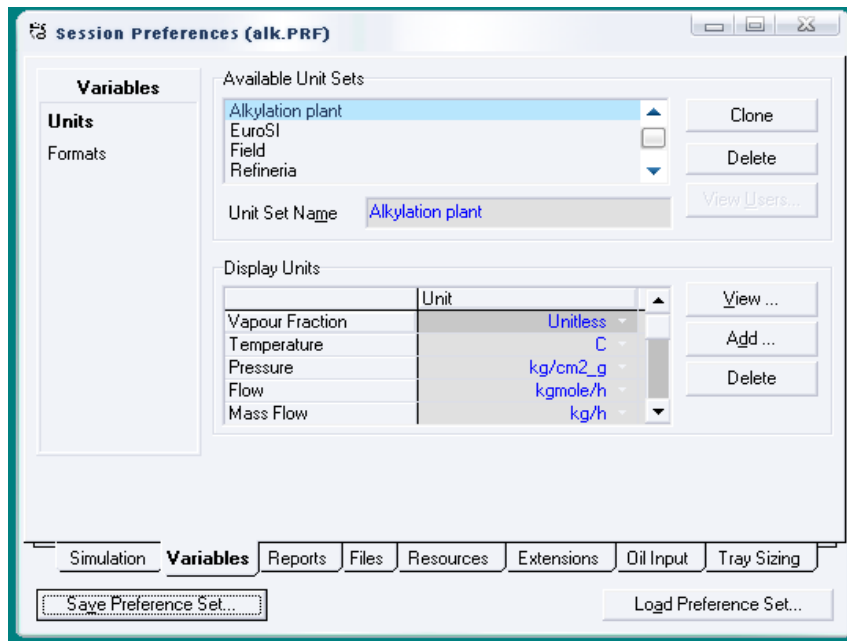


Figura 27. Especificación de variables dentro de HYSYS

## 6.2. Simulación de la sección de preparación

Teniendo estas bases procedemos a armar nuestro proceso, la planta de alquilación consta de dos corrientes de alimentación, la 1 proveniente de la unidad de deshidrogenación en la misma refinería de esta corriente se tienen los datos como temperatura, presión, y flujo en kgmol/h de cada sustancia, estos datos nos especifican la corriente, a partir de esto HYSYS nos calcula las propiedades de esta corriente. Los datos en azul son las especificaciones dadas y los datos en negros son los calculados por Aspen HYSYS a partir de los números proporcionados y en el fondo de la ventana se aprecia una barra verde donde aparece OK de color verde, esto indica que la corriente se encuentra especificada y que se realizaron los cálculos necesarios para sus corrientes.

| Property                      | Value       |
|-------------------------------|-------------|
| Stream Name                   | 1           |
| Vapour / Phase Fraction       | 0.0000      |
| Temperature [C]               | 38.00       |
| Pressure [kPa]                | 467.5       |
| Molar Flow [kgmole/h]         | 836.3       |
| Mass Flow [kg/h]              | 4.754e+004  |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 80.30       |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole]    | -7.592e+004 |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C]   | 97.88       |
| Heat Flow [kJ/h]              | -6.349e+007 |
| Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h] | 79.83       |
| Fluid Package                 | Basis-1     |

Figura 28. Ejemplo de una corriente especificada

La segunda corriente de alimentaciones la 2 de esta también se tiene datos suficientes para especificarla como se explico anteriormente. La primera parte dentro de la planta de alquilación es la preparación de las corrientes que alimentan a los reactores, en realidad se acondiciona una corriente y esta se divide en dos para alimentar a los dos reactores.

Las dos corrientes anteriormente mencionadas se unen a una tercera, esta es una recirculación del segundo asentador de ácido A-2, de esta corriente solo requerimos su presión, la mezcla de estas tres corrientes son alimentadas a un primer asentador de ácido, de este salen dos corriente, una con la mayoría de la fase acuosa y otra con mayoría de la fase orgánica. Las composiciones de estas corrientes son calculadas por Aspen HYSYS. El modulo utilizado para representar los asentadores de ácido es un separador de tres fases, la especificación que se le dio fue que la corriente gaseosa no tiene

sustancia alguna en ella, es decir la corriente Vacía 1 no tenga flujo con las especificaciones anteriores Aspen HYSYS calcula la composición y flujo de las otras dos corrientes de salida, así como las propiedades de las mismas.

### 6.2.1. Secador usando "User Unit Operation"

Para asegurarnos que eliminamos por completo el flujo de agua de estas corrientes se implementan dos secadores G-1 y G-2, cada uno de estos tiene dos alimentaciones que son las corrientes 6-A/B y 14-A/B respectivamente, es decir los dos secadores tienen la misma alimentación debido a que se alimentan con las corrientes que son resultado de dividir por partes iguales a 6 y 14. Para la salida ocurre lo mismo son dos corrientes por cada secador, que posteriormente se unen con su similar proveniente del otro secador.

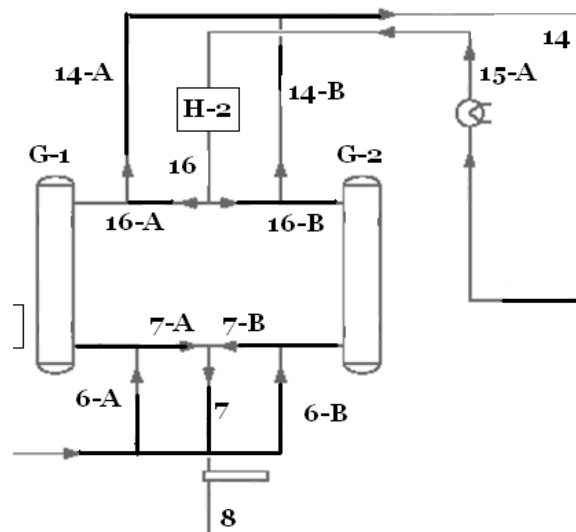


Figura 29. Diagrama de los secadores

Sin embargo Aspen HYSYS no cuenta con módulos de cálculo para secadores, es por eso que se tiene que programar por el usuario, haciendo uso de una herramienta llamada "Unit user operation".

Se agrega un módulo de "Unit User Operation", y se despliega la una ventana donde agregamos un tipo de equipo, este tipo de equipo y programación permanece en la memoria de Aspen HYSYS para

futuros usos dentro de a misma simulación, en este caso es llamado Drier. El equipo se encuentra ya en el ambiente de simulación, sin embargo el comportamiento de esta se encuentra definido por la programación del equipo.

Este tipo de equipo programable tiene opción a dos alimentaciones y dos productos, una entrada de energía y una salida de energía. Siempre debe de tener como mínimo una alimentación y una salida activas; a cada boquilla de alimentación se le pueden introducir tantas corrientes como sea necesario, sin embargo estas se deben de programar apropiadamente, lo mismo ocurre para las salidas y las corrientes de energía.

Para el caso del Drier se alimentan dos corrientes, una por cada boquilla, es por esto que tenemos activas las dos, será el mismo caso para las corrientes de salida, debido a que en nuestro sistema tenemos dos secadores la programación del equipo nos será muy útil. Al comenzar a utilizar esta equipo aparece la ventana de la figura 30, en esta ventana se especifica las alimentaciones, aunque el programa aun no sabe que hacer con ellas, posteriormente en la programación se indicara que ocurre con ellas.



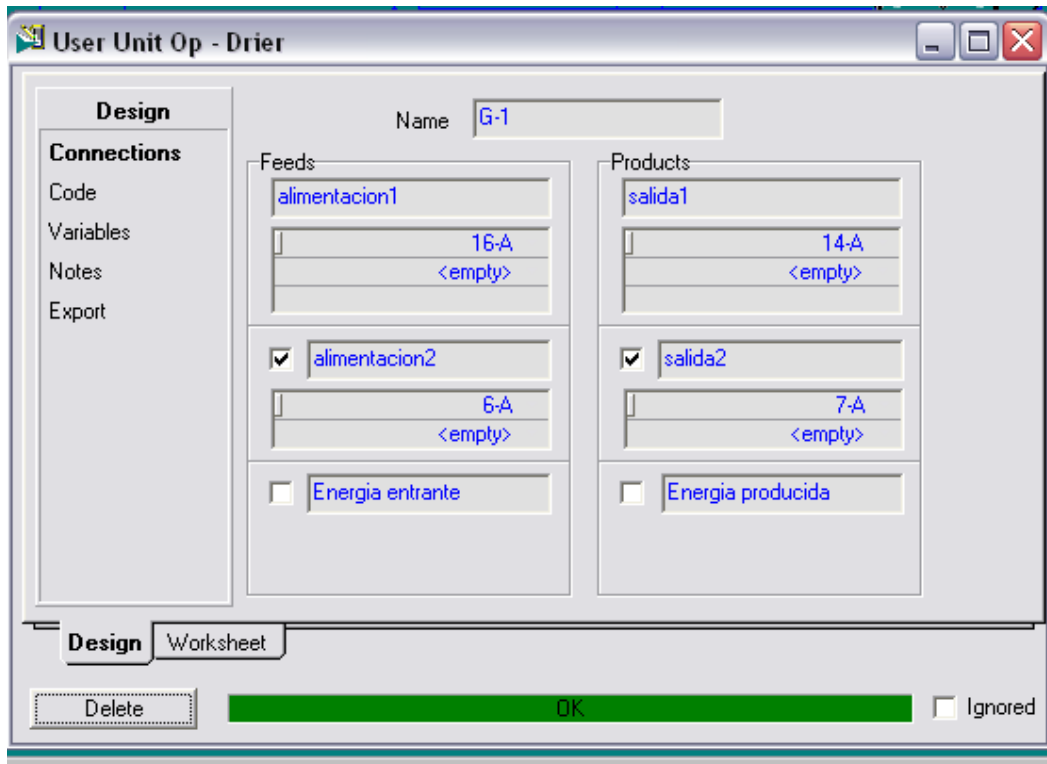


Figura 30. Ventana de conexiones para el secador

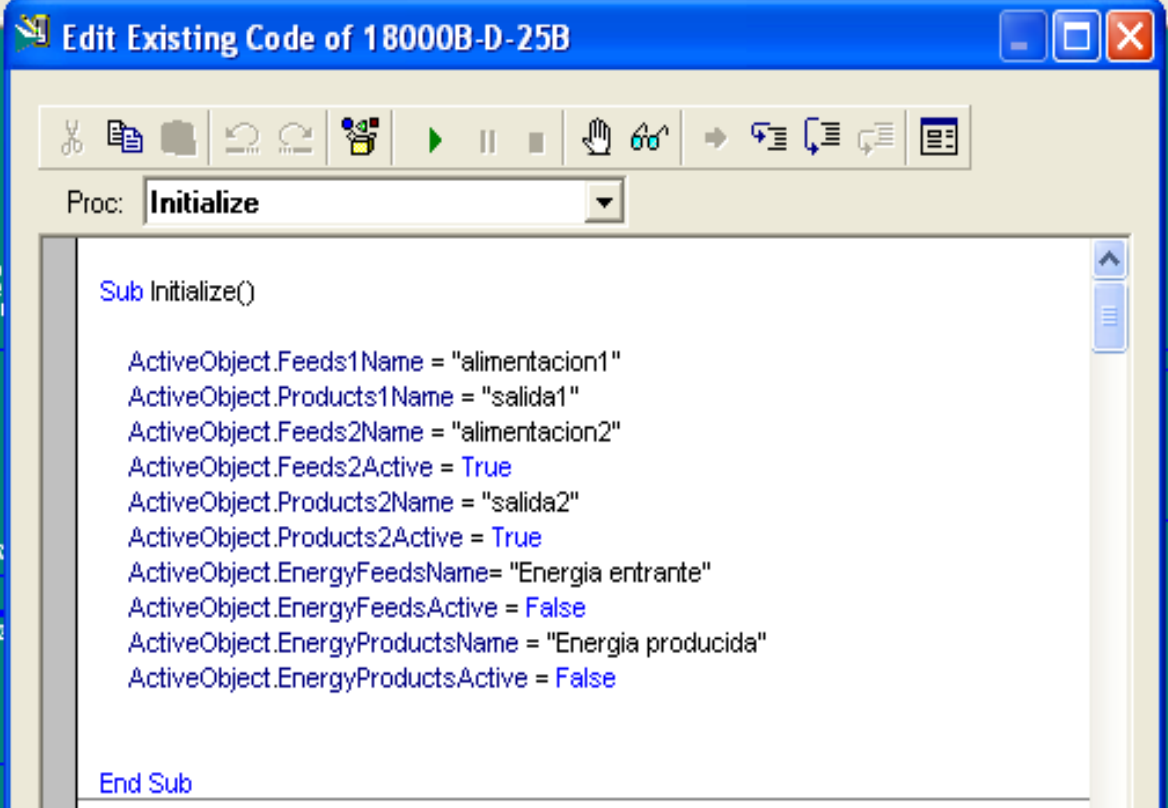
El comportamiento del Drier se encuentra descrito en la programación que se alimenta al equipo por medio de la pestaña "Code", en este caso la finalidad del equipo es eliminar el posible flujo de agua de las corrientes [ 16-A/B] y [6-A/B], el flujo de agua de estas dos corrientes saldrá por la corriente [7-A/B].

La programación del equipo se divide en tres partes

#### 6.2.1.1. Declaración de corrientes

En esta parte se especifica el nombre de las corrientes de alimentación y productos, así como el nombre de las corrientes de alimentación y producción de energía si es el caso, en esta ocasión se usan las dos entradas de alimentación, y ambas salidas de producción, sin embargo no hay corrientes referentes a la energía. Esta sección solo declara las boquillas que se encontraran activas en el equipo, las corrientes de alimentación fueron llamadas

“alimentacion1” y “alimentacion2”, y las corrientes producidas “salida1” y “salida2”.



```
Sub Initialize()  
    ActiveObject.Feeds1Name = "alimentacion1"  
    ActiveObject.Products1Name = "salida1"  
    ActiveObject.Feeds2Name = "alimentacion2"  
    ActiveObject.Feeds2Active = True  
    ActiveObject.Products2Name = "salida2"  
    ActiveObject.Products2Active = True  
    ActiveObject.EnergyFeedsName = "Energia entrante"  
    ActiveObject.EnergyFeedsActive = False  
    ActiveObject.EnergyProductsName = "Energia producida"  
    ActiveObject.EnergyProductsActive = False  
End Sub
```

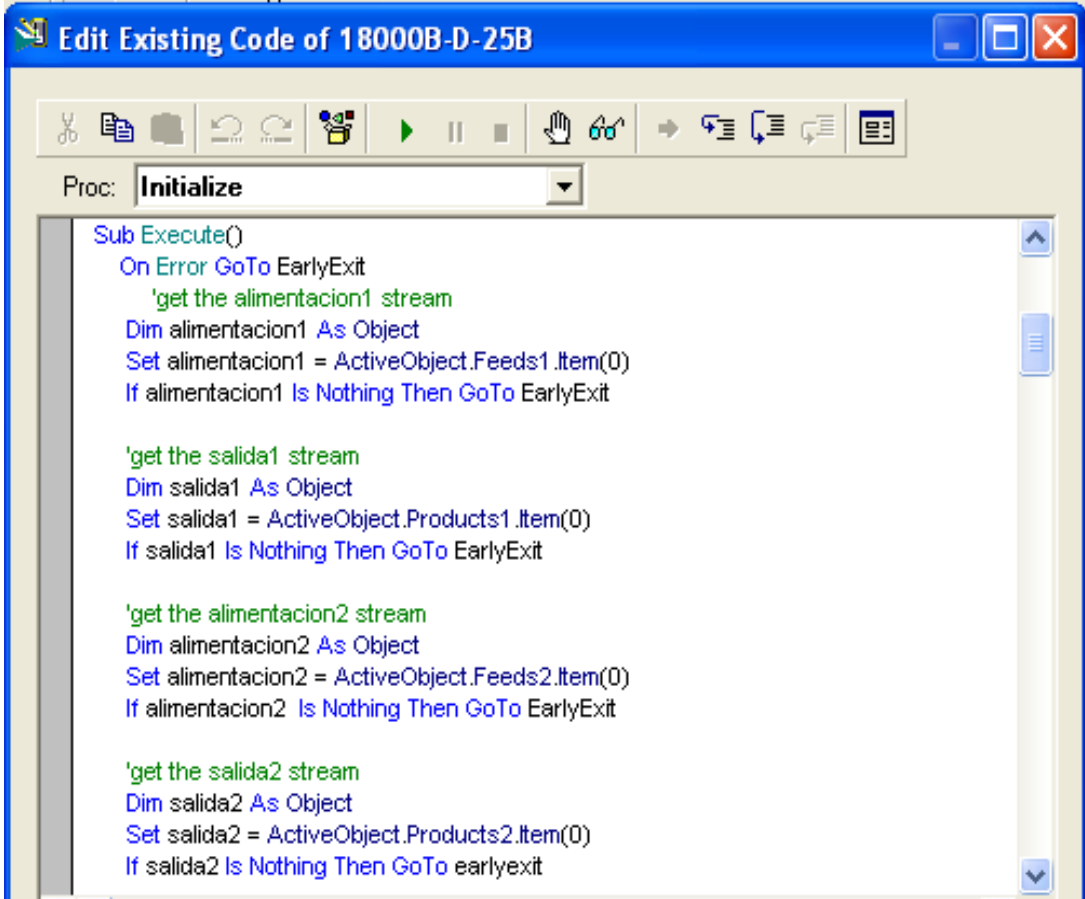
Figura 31. Ventana de programación de alimentaciones, productos y energía

En la ventana anterior se puede observar que el equipo mínimo debe de tener una entrada y una salida, en cuanto a las otras, estas se tienen que dar de alta, lo mismo para las corrientes de energía. En este caso a las alimentaciones se les llamo “alimentacion1” y “alimentacion2” y los productos se les llamo “salida1” y “salida2”.

#### 6.2.1.2. Comportamiento del equipo

La siguiente parte de la programación es la encargada del comportamiento del equipo, en esta se especifica que operaciones realizara nuestro equipo. Primero debe de asegurarse de que ninguna de las corrientes se encuentre vacía, tanto las de entrada como las

de salida. Esto se muestra en la siguiente ventana, donde podemos ver que en caso de que alguna de ellas se encuentre vacía se saldrá del equipo.



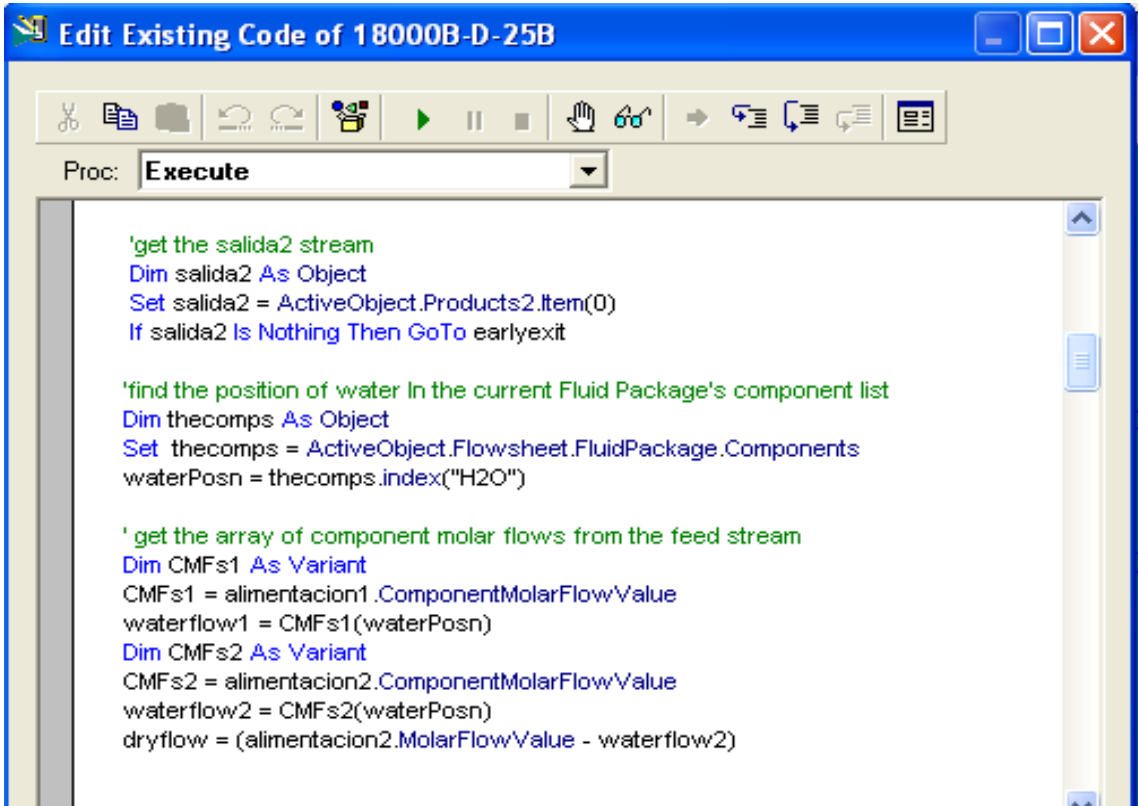
```
Sub Execute()  
    On Error GoTo EarlyExit  
    'get the alimentacion1 stream  
    Dim alimentacion1 As Object  
    Set alimentacion1 = ActiveObject.Feeds1.Item(0)  
    If alimentacion1 Is Nothing Then GoTo EarlyExit  
  
    'get the salida1 stream  
    Dim salida1 As Object  
    Set salida1 = ActiveObject.Products1.Item(0)  
    If salida1 Is Nothing Then GoTo EarlyExit  
  
    'get the alimentacion2 stream  
    Dim alimentacion2 As Object  
    Set alimentacion2 = ActiveObject.Feeds2.Item(0)  
    If alimentacion2 Is Nothing Then GoTo EarlyExit  
  
    'get the salida2 stream  
    Dim salida2 As Object  
    Set salida2 = ActiveObject.Products2.Item(0)  
    If salida2 Is Nothing Then GoTo earlyexit
```

Figura 32 Programación de las entradas y salidas

Como se puede observar en el código anterior, se tiene que hacer para cada una de las corrientes que dimos de alta, pues no se podrá calcular algo si no se alimenta datos al equipo, lo mismo para la salida pues se necesitan los datos que se calcularon.

Hacemos que identifique el agua en paquete de sustancias, así mismo declaramos cual es el flujo de agua contenido en las alimentaciones, al agua contenida en cada corriente de alimentación le llamamos "waterflow1" y "waterflow2", a la corriente que alimentaremos a los reactores le llamamos "dryflow", este se refiere

a la alimentación2 menos el flujo de agua en la misma. Esto se puede ver en la siguiente ventana.



```
Proc: Execute

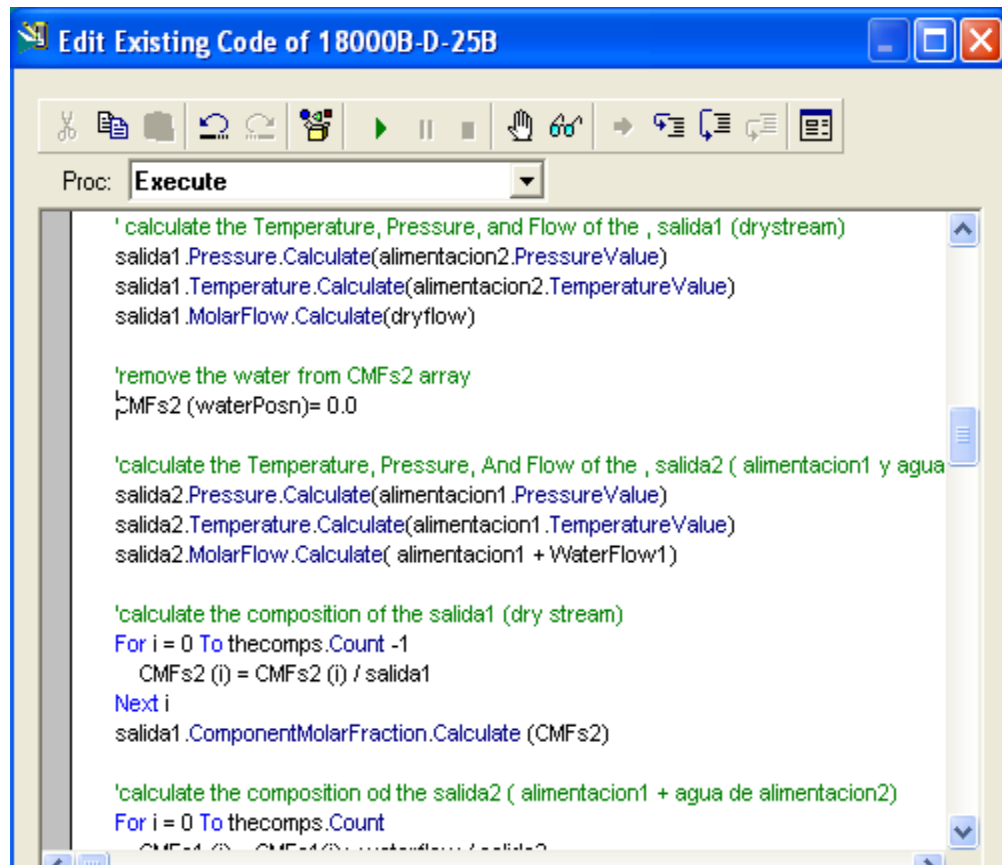
'get the salida2 stream
Dim salida2 As Object
Set salida2 = ActiveObject.Products2.Item(0)
If salida2 Is Nothing Then GoTo earlyexit

'find the position of water in the current Fluid Package's component list
Dim thecomps As Object
Set thecomps = ActiveObject.Flowsheet.FluidPackage.Components
waterPosn = thecomps.index("H2O")

' get the array of component molar flows from the feed stream
Dim CMFs1 As Variant
CMFs1 = alimentacion1.ComponentMolarFlowValue
waterflow1 = CMFs1(waterPosn)
Dim CMFs2 As Variant
CMFs2 = alimentacion2.ComponentMolarFlowValue
waterflow2 = CMFs2(waterPosn)
dryflow = (alimentacion2.MolarFlowValue - waterflow2)
```

Figura 33. Ubicación del agua en el sistema

Debemos indicar al equipo que es lo que tiene que calcular, especificamos que debe de calcular la temperatura, presión y flujo de la salida1 y salida2. En los siguientes comandos nos aseguramos que no existe agua en la corriente salida1, y se puede observar como se hace la observación de que existirá un componente menos en su composición.



```
Proc: Execute

'calculate the Temperature, Pressure, and Flow of the , salida1 (drystream)
salida1.Pressure.Calculate(alimentacion2.PressureValue)
salida1.Temperature.Calculate(alimentacion2.TemperatureValue)
salida1.MolarFlow.Calculate(dryflow)

'remove the water from CMFs2 array
CMFs2 (waterPosn)= 0.0

'calculate the Temperature, Pressure, And Flow of the , salida2 ( alimentacion1 y agua
salida2.Pressure.Calculate(alimentacion1.PressureValue)
salida2.Temperature.Calculate(alimentacion1.TemperatureValue)
salida2.MolarFlow.Calculate( alimentacion1 + WaterFlow1)

'calculate the composition of the salida1 (dry stream)
For i = 0 To thecomps.Count -1
    CMFs2 (i) = CMFs2 (i) / salida1
Next i
salida1.ComponentMolarFraction.Calculate (CMFs2)

'calculate the composition od the salida2 ( alimentacion1 + agua de alimentacion2)
For i = 0 To thecomps.Count
    CMFs2 (i) = CMFs2 (i) * molarflow / salida2
```

Figura 34. Calculo de propiedades para salida1 y salida2

Para terminar esta sección se le indica al equipo que se encuentra resuelto, para remover la etiqueta de “not solved”.

### 6.2.1.3 Restricciones del Equipo

Por ultimo, damos indicaciones en caso de que falten datos, en este caso especificamos que el equipo marque error, primero nos aseguramos que las entradas y salidas no se encuentren vacías, posteriormente que los datos de cada corriente cuenten con un valor para temperatura, presión y composición.

```

:sub StatusQuery()
  On Error GoTo thatsall
  Dim gotone As Boolean
  gotone = False
  If ActiveObject.Feeds1.Count = 0 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingRequiredInformation, 1, "alimentacion1 stream required")
  End If
  If ActiveObject.Feeds2.Count = 0 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingRequiredInformation, 2, "alimentacion2 stream required")
  End If
  If ActiveObject.Products1.Count = 0 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingRequiredInformation, 3, "salida1 stream required")
  End If
  If ActiveObject.Products.Count = 0 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingRequiredInformation, 4, "salida2 stream required")
  End If

  'If we're missing an attachment, don't bother checking for any other problems
  If gotone = True Then GoTo thatsall
  On Error GoTo nowater
  waterposn = ActiveObject.Flowsheet.FluidPackage.Components.index("H2O")
  GoTo afterwatercheck
nowater:
  gotone = True
  ActiveObject.AddStatusCondition (slError, 11, "no current water in current fluid package")
afterwatercheck:
'para alimentacion1
  On Error GoTo thatsall
  Dim alimentacion1 As Object
  Set alimentacion1 = ActiveObject.Feeds1.Item(0)
  If Not alimentacion1.Temperature.IsKnown Then
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingOptionalInformation, 12, "alimentacion1 temperature unknown")
    gotone = True
  End If
  If Not alimentacion1.Pressure.IsKnown Then

```

Figura 35 Restricciones de corrientes, para evitar que falten datos

Dado que en este caso las corrientes de energía se encuentran vacías, se asegura que continúen así; si algo está conectado en estas corrientes se desplegará una etiqueta que nos lo indique.

```

'aseguramos las fracciones conocidas, es decir k no tengan cero
'alimentacion1
  CMFs1known = alimentacion1.ComponentMolarFraction.IsKnown
  If Not CMFs1known (0) Then
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingOptionalInformation, 18, "alimentacion1 composition unknown")
    gotone = True
  End If
  If gotone = True Then GoTo thatsall
  If ActiveObject.Feeds1.Count > 1 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition (slWarning, 19, " Corriente adicional en alimentacion1 será ignorada")
  End If

'alimentacion2
  CMFs2known = alimentacion1.ComponentMolarFraction.IsKnown
  If Not CMFs2known (0) Then
    ActiveObject.AddStatusCondition (slMissingOptionalInformation, 20, "alimentacion2 composition unknown")
    gotone = True
  End If
  If gotone = True Then GoTo thatsall
  If ActiveObject.Feeds2.Count > 1 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition (slWarning, 21, " Corriente adicional en alimentacion2 será ignorada")
  End If

  If ActiveObject.Products1.Count > 1 Then
    gotone = True
    ActiveObject.AddStatusCondition(slWarning, 22, "Corriente adicional en salida1 serán ignoradas")
  End If
  If ActiveObject.Products2.Count > 1 Then
    GotOne = True
    ActiveObject.AddStatusCondition(slWarning, 23, "Corriente adicional en Salida2 serán ignoradas")
  End If

thatsall:
End Sub

```

Fig.36 Restricciones de corrientes, para evitar que falten datos

Al finalizar la programación de los secadores, se colocaron calentadores y divisores, la corriente que alimentara a los reactores se encuentra lista. El diagrama de simulación para esta seccion se muestra a continuación.

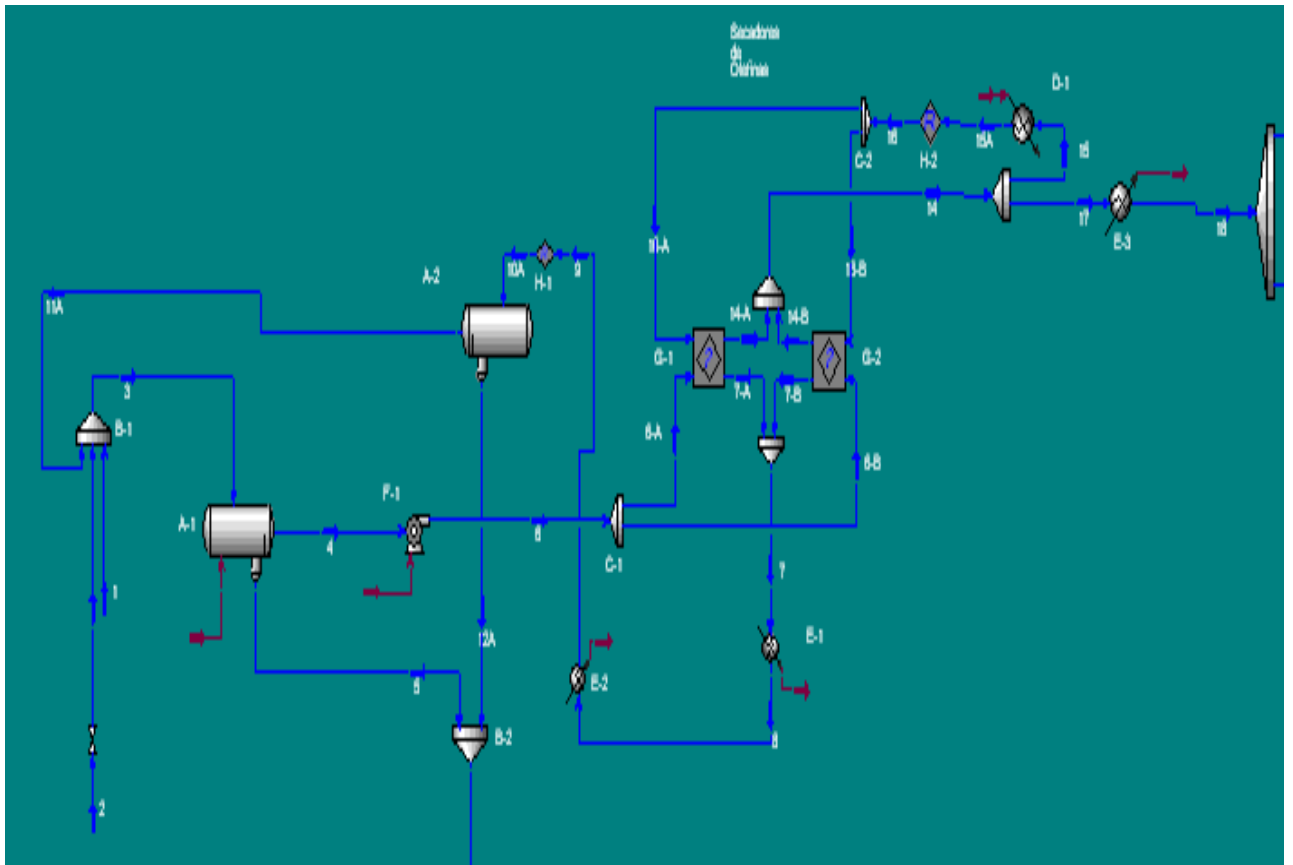
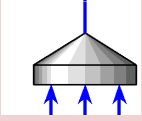
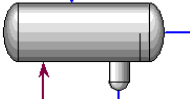
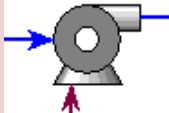
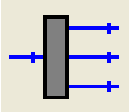
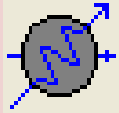
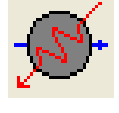



Figura 37 Esquema de simulación de la sección de preparación.

Como se puede ver en el esquema anterior, cada uno de los procesos tiene su módulo de cálculo, los módulos de cálculo utilizados en esta sección son los siguientes:



Tabla 6. Módulos de cálculo para la sección de preparación.

| Modulo en HYSYS            | Equipo que representa | Símbolo en HYSYS  |
|----------------------------|-----------------------|---|
| Mixer                      | Mezclador             |    |
| 3-Phases Separator         | Asentador             |    |
| Pump                       | Bomba                 |    |
| Tee                        | Separador             |    |
| Cooler                     | Enfriador             |   |
| Heater                     | Calentador            |  |
| User unit operation- Drier | Secador               |  |

### 6.3. Simulación y resultados de la Sección de reacción

Esta es la parte medular del proceso, aquí se lleva a cabo la transformación de los componentes, para obtener el alquilado que es

la mezcla de nuestro interés. De los reactores se tienen los datos totales de las corrientes de entrada y la corriente de salida, sabiendo que esta última es una emulsión.

### *6.3.1. Especificación de Reactores*

La planta de alquilación cuenta con dos reactores J-1 y J-2. Ambos reactores cuentan con las mismas especificaciones, desde las alimentaciones hasta las reacciones y condiciones de operación.

Las corrientes de alimentación a los reactores, son las siguientes 18-A, 18-B, 19-A, 19-B, 20-A, 20-B], de las corrientes anteriores 4 de ellas son recirculaciones; las corrientes 19-A y 19-B] contienen el catalizador (HF) con trazas de compuestos orgánicos, en cambio las corrientes 20-A, 20-B son ricas en isobutano.

Los reactores se resolvieron en forma de reactor de conversión debido a que las reacciones se tienen de esta forma, para utilizar un reactor en Aspen HYSYS se tienen que especificar primero las reacciones que se ocuparan. El calculo de los reactores se realizo mediante una sub- hoja de trabajo, donde se tiene el reactor de conversión y el asentador del ácido.

Los reactores requieren de un conjunto de reacciones, que representan lo que químicamente ocurre dentro, este conjunto de reacciones se especifico de la siguiente manera en HYSYS. Se introduce un nuevo "paquete de reacciones" en el cual se agrega una a una las 28 reacciones dentro del reactor, estas reacciones deben de ser de conversión, las reacciones deben de concordar con el tipo de reactor que se usará en la simulación.

Para especificar una reacción se necesita tener:

- Estequiometría: Dependiendo de los reactivos y productos de cada reacción

- Reactivo limitante: En este caso siempre serán las olefinas debido al exceso de isobutano.
- Fase: La fase en la que se llevan a cabo las reacciones para este caso es líquida, debido a la alimentación y salida del reactor.
- Conversión: La conversión depende de cada reacción, en este caso se hace cumplir el balance de materia.

The screenshot shows a software interface for defining reaction sets. The main window is titled 'Reaction Package' and contains a 'Reaction Set: Global Rxn Set-3' configuration panel. This panel includes fields for 'Name' (Global Rxn Set-3), 'Set Info' (Set Type, Conversion, Ready, Independent, Advanced..., Banking...), and lists for 'Active List' and 'Inactive List'. The 'Active List' contains 'propene-1', 'isobutene-1', '1-butene-1', and '1-pentene-1'. Below these lists are buttons for 'View Active...', 'View Inactive...', 'Make Inactive >', and '< Make Active'. An inset window titled 'Conversion Reaction: propene-1' displays a table of 'Stoichiometry Info' with columns for Component, Mole Weight, and Stoich Coeff. The table lists various hydrocarbons with their respective mole weights and stoichiometric coefficients. At the bottom of this inset window, there is a 'Balance' section showing 'Balance Error' as 0.00000 and 'Reaction Heat (25 C)' as -8.4e+04 kJ/kgmole.

| Component    | Mole Weight | Stoich Coeff |
|--------------|-------------|--------------|
| Propene      | 42.081      | -1.000       |
| i-Butane     | 58.124      | -1.073       |
| i-Pentane    | 72.151      | 0.050        |
| 23-Mbutane   | 86.178      | 0.045        |
| 23-Mpentane  | 100.205     | 0.390        |
| 24-Mpentane  | 100.205     | 0.310        |
| 224-Mpentane | 114.232     | 0.040        |
| 225-Mhexane  | 128.259     | 0.030        |
| 335-Mheptane | 142.285     | 0.030        |
| n-C11        | 156.313     | 0.020        |
| n-C12        | 170.339     | 0.020        |
| n-C13        | 184.367     | 0.010        |

Figura 38. Especificación de una reacción y ejemplo de un paquete de reacciones.

Si se introducen las reacciones una a una en vez de usar la simplificación propuesta, se tendrían mas de 20 reacciones en el paquete de reacciones, sin embargo, debido a esta simplificación para las reacciones, cada reacción tiene 2 reactivos y varios productos, de esta manera si un par de reactivos dan 5 productos diferentes estos se introducen al simulador en una reacción en vez de 5, esta

simplificación se puede utilizar debido a que nuestro reactor es de conversión y no cinético, en el caso de uno cinético se tendrían que introducir las 5 reacciones ya que su rapidez de reacción es diferente para cada una de ellas.

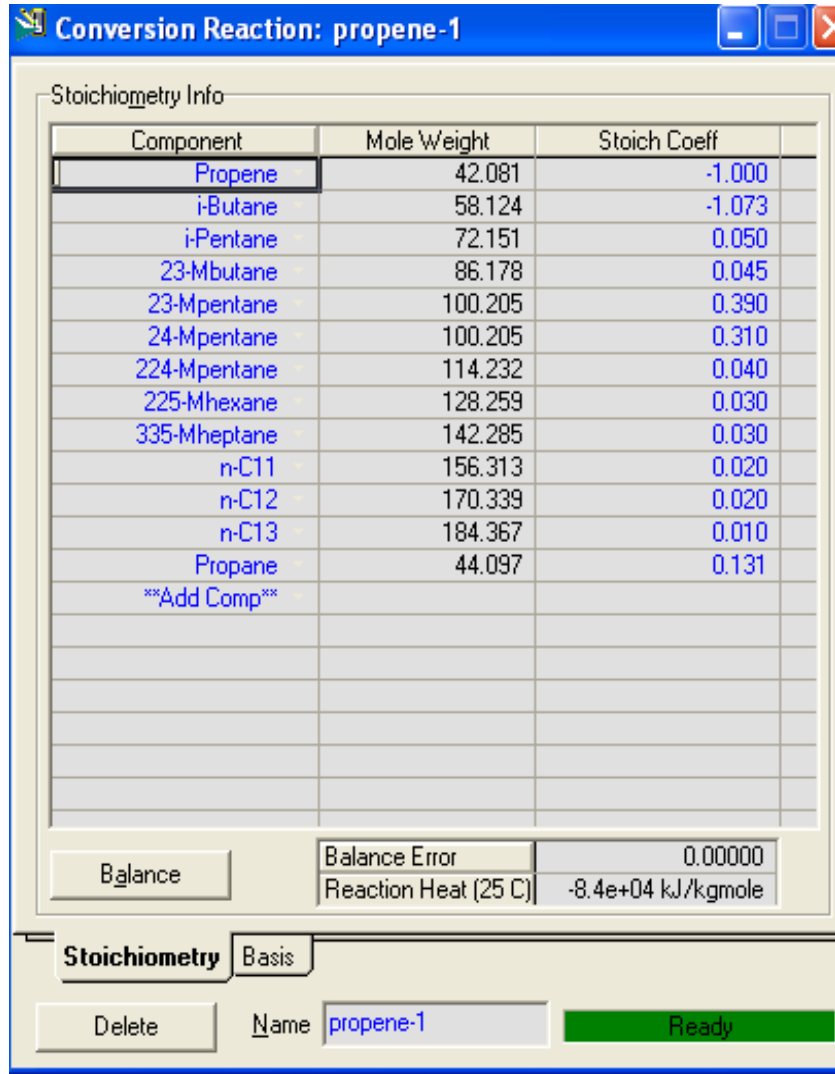


Figura 39. Ejemplo de una multi reacción

Lo que ocurre en cada uno de los reactores es exactamente lo mismo, la corriente de las olefinas 18-A /18-B se ponen en contacto con el catalizador y una corriente rica en isobutano, y ocurren las mismas reacciones con las mismas conversiones. El fin de este proceso es el de producir gasolinas de mejor calidad, es decir alto octanaje y es esta parte donde las reacciones nos dan los productos de nuestro

interés. La mezcla de alquilado esta compuesta de hidrocarburos ramificados que van desde el 23-Mbutano hasta el 335-Mheptano. y los isoctanos obtenidos son los siguientes 224-Mpentano, 233-Mpentano y 234-Mpentano.

Se tiene el separador, el cual retira el HF para evitar errores de convergencia por el reciclado de este, el reactor de conversión, donde se utilizan las reacciones anteriormente mostradas. Esta sección se observa de la siguiente manera.

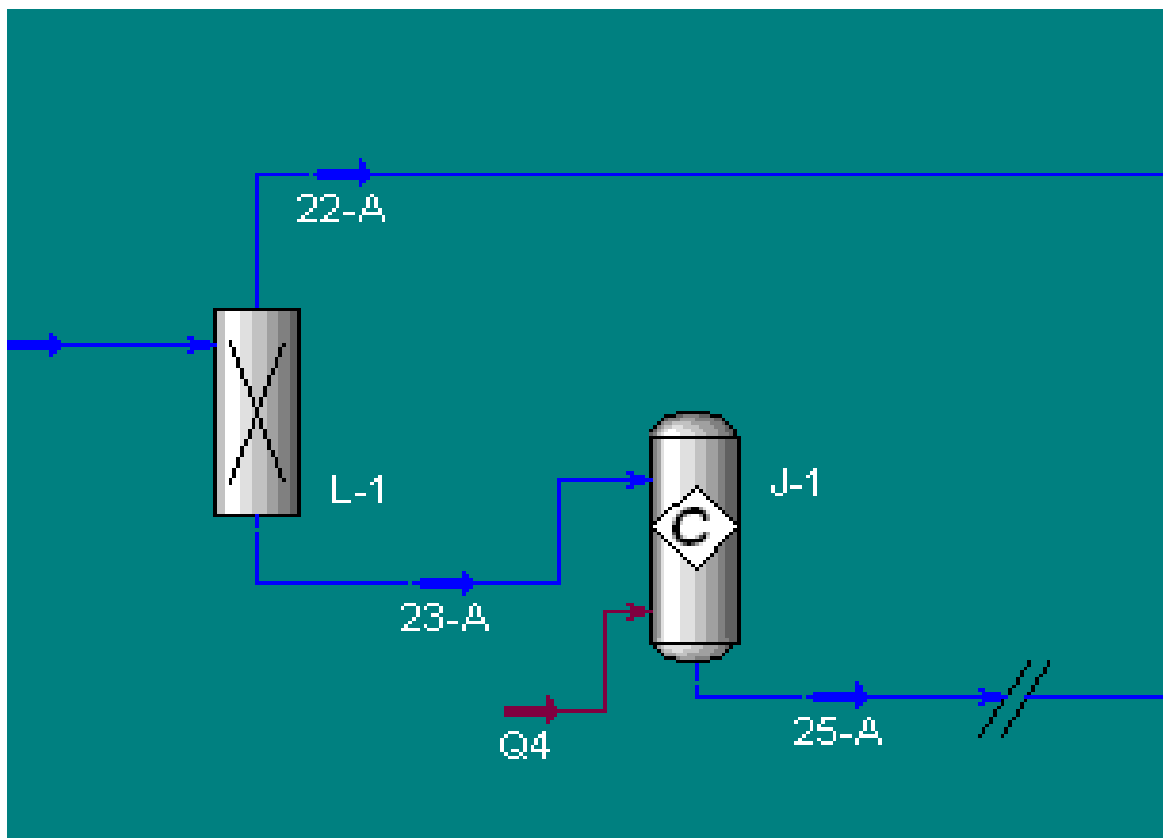


Figura 40. Reactor con su separador

Cuando un reactor se encuentra completamente especificado, es decir que cuenta con las corrientes de alimentación y salida, el paquete de reacciones, temperatura, caída de presión etc., el simulador resuelve el reactor con los datos proporcionados ofreciéndonos los resultados de la siguiente forma

| Reactor Results Summary  |              |           |               |
|--|--------------|-----------|---------------|
| <input type="radio"/> Reaction Extents <input checked="" type="radio"/> Reaction Balance |              |           |               |
|  | Total Inflow | Total Rxn | Total Outflow |
| n-Pentane  | 0.3799       | 0.0000    | 0.3799        |
| 23-Mbutane   | 0.6451       | 4.597     | 5.242         |
| 23-Mpentane  | 0.4435       | 7.853     | 8.296         |
| 24-Mpentane  | 0.6122       | 8.439     | 9.052         |
| 224-Mpentane   | 5.700        | 121.7     | 127.4         |
| 233-Mpentane   | 1.044        | 34.26     | 35.31         |
| 234-Mpentane   | 1.568        | 47.27     | 48.84         |
| 23-Mhexane   | 0.2767       | 8.723     | 9.000         |
| 24-Mhexane   | 0.0000       | 15.45     | 15.45         |
| 225-Mhexane  | 6.293e-002   | 2.617     | 2.680         |
| 335-Mheptane   | 3.227e-002   | 3.398     | 3.430         |
| n-C11  | 0.0000       | 1.240     | 1.240         |
| n-C12  | 4.236e-003   | 3.401     | 3.405         |
| n-C13  | 0.0000       | 0.7177    | 0.7177        |
| NBP[0]47*  | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]77*  | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]109*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]139*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]191*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]216*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]249*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]297*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]341*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]381*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |
| NBP[0]435*   | 0.0000       | 0.0000    | 0.0000        |

Figura 41. Despliegue de resultados del reactor en Aspen HYSYS.

En vez de obtener una emulsión de nuestro reactor obtenemos dos corrientes de esta sección la unión de las corrientes 25-A y 25-B, que son la corriente proveniente de los reactores, se unen y se llaman 25. Esta corriente se encuentra totalmente especificada, al igual que la corriente 22; que es la unión de las corrientes 22-A y 22-B

Las corrientes anteriores no necesitan datos adicionales hasta este punto; el 99.5% de la corriente 22 se recircula a los dos procesos de reacción con el nombre de 19, al separador solo se especifica las porciones en que será separada, debido a esta recirculación ambos reactores tienen que ser calculados hasta que estos equipos y corrientes converjan. Mientras que la corriente [25 se lleva a ser tratada en la siguiente sección.

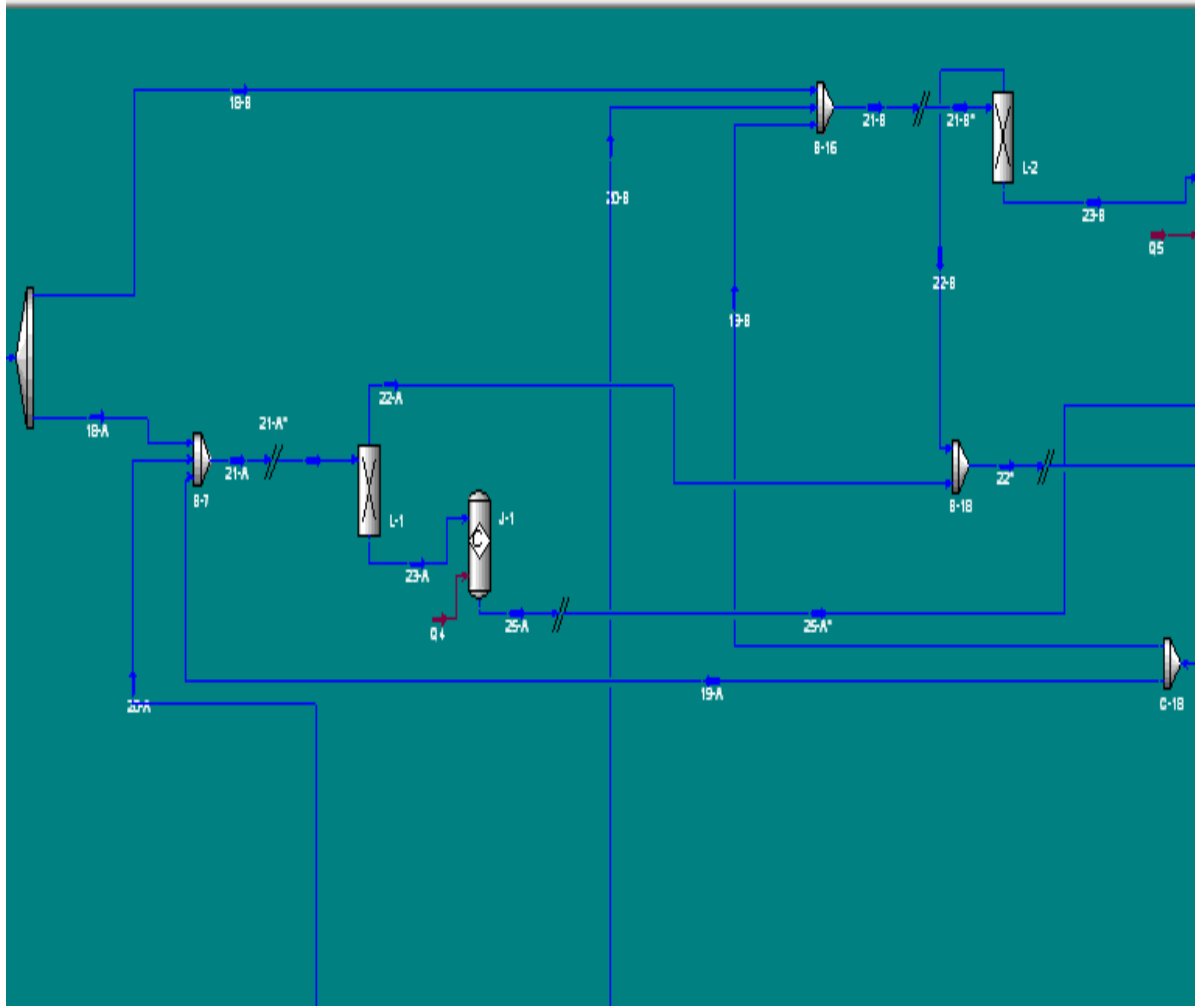
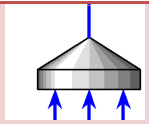
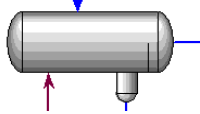
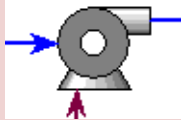
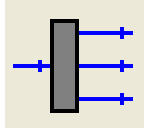
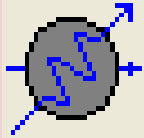
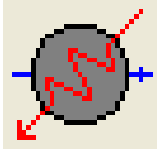
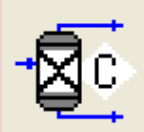
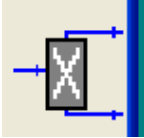


Figura 42 Esquema de simulación de la sección de reacción.

### 6.3.2. Módulos de cálculo utilizados

Tabla 7. Módulos de cálculo para sección de reacción

| Modulo en HYSYS       | Equipo que representa | Símbolo en HYSYS  |
|-----------------------|-----------------------|---|
| Mixer                 | Mezclador             |    |
| 3-Phases Separator    | Asentador             |    |
| Pump                  | Bomba                 |    |
| Tee                   | Separador             |    |
| Cooler                | Enfriador             |   |
| Heater                | Calentador            |  |
| Reactor de conversión | Reactor de conversión |  |
| Splitter              | Separador             |  |

#### 6.4. Simulación y Resultados de Sección de fraccionamiento y tratamiento de Productos



La alimentación principal a esta sección se encuentra constituida por la corriente [407], esta corriente pasa por dos intercambiadores de calor, para especificar estos equipos es necesaria su temperatura, y flujo molar por componente, su presión y la temperatura de salida de algunas de las corrientes de salida. Se utilizaron intercambiadores de tubos y coraza. Los datos anteriores se tienen para cada corriente por lo cual se puede especificar los equipos.

#### 6.4.1. Torre despropanizadora

Como ya se menciona anteriormente esta torre cuenta con 80 platos, y tiene varias corrientes de salida y entrada, como se puede observar en el siguiente esquema.

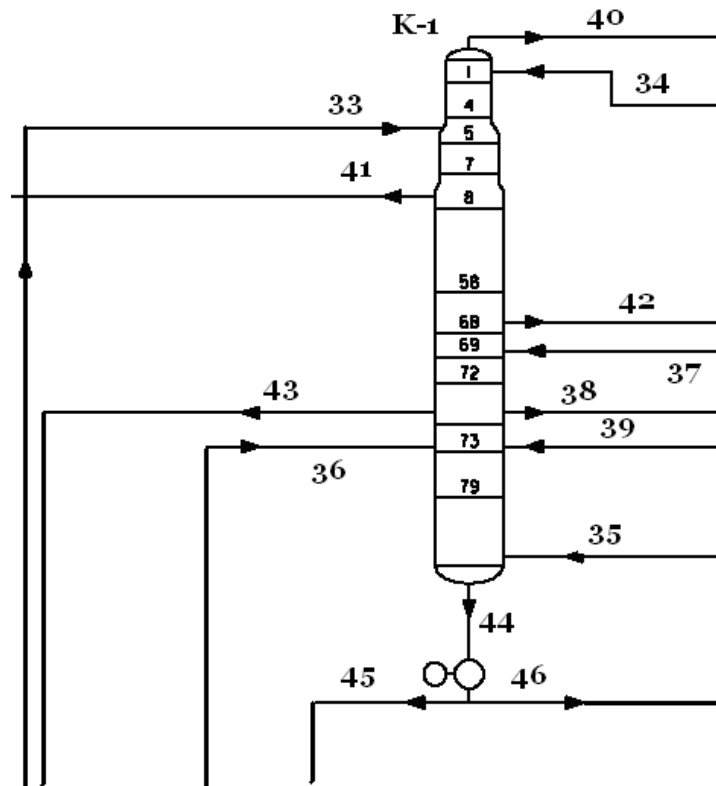


Figura 43 Diagrama de la torre K-1

Para comenzar la simulación de la torre, se agrega el objeto, este nos despliega una serie de ventanas para dar las primeras especificaciones, tales como, el número de platos, la presión en el

domo y fondo de la torre, etc. Posteriormente se especifican las conexiones de la torre, es decir en que plato entra o sale cada corriente, según sea el caso, de esta manera sabemos de qué plato proviene o a cual se dirige cada corriente, también debemos de especificar las caídas de presión en el condensador y reboiler para que Aspen HYSYS calcule las presiones de las corrientes que salen por estos.

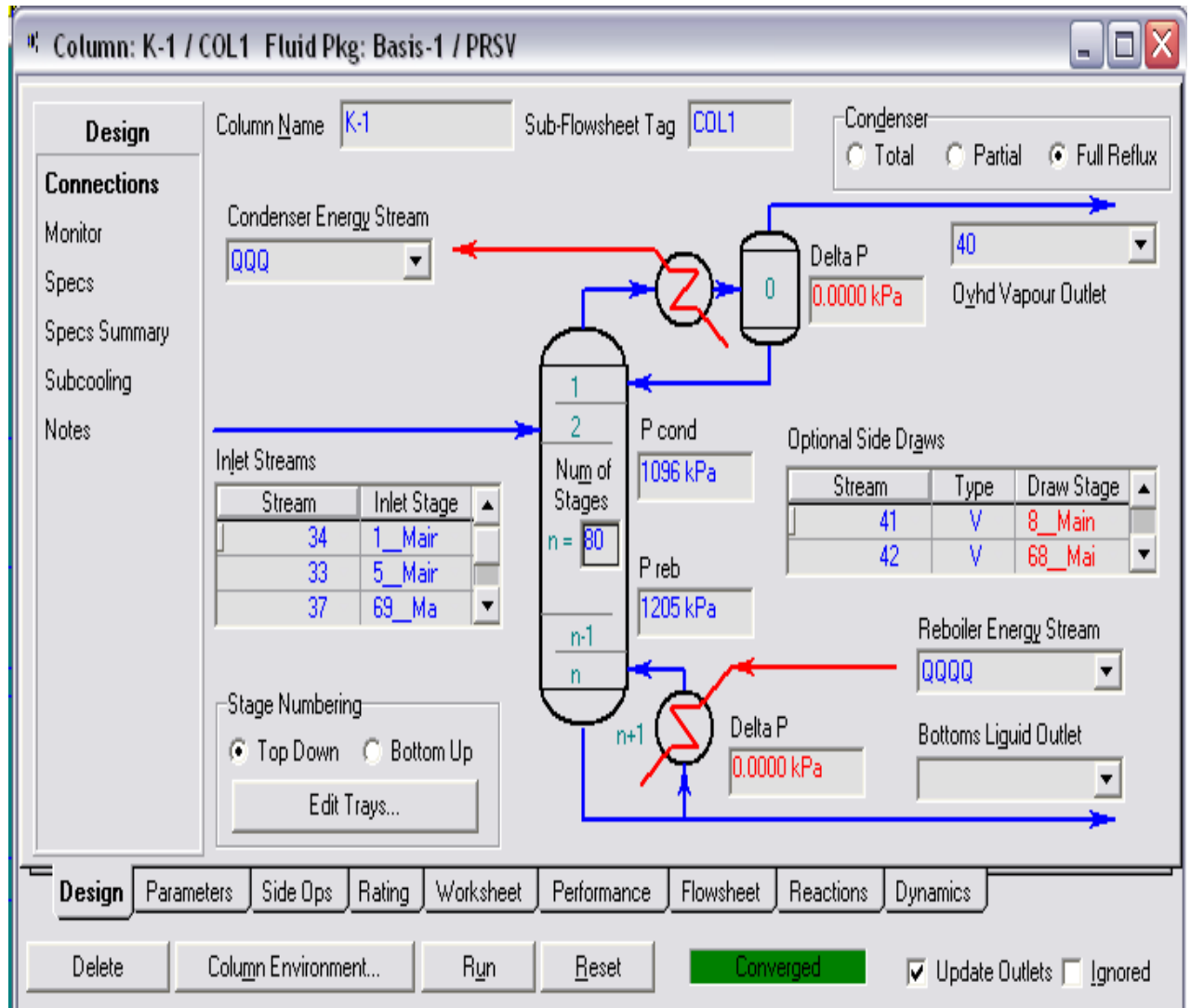


Figura 44. Ventana de especificaciones de Corrientes para la torre de K-1. Esta torre cuenta con un corriente que sale a un calentador y regresa, esta se especifica como un Pump around, la corriente se especifica su flujo y su fase regreso que es vapor, también debemos de especificar algunos de los flujos de las corrientes de salida, estos

datos son los datos que toma Aspen HYSYS para resolver y hacer converger la torre, la ventana nos permite escoger los datos debe tomar en el monitor de la torre.

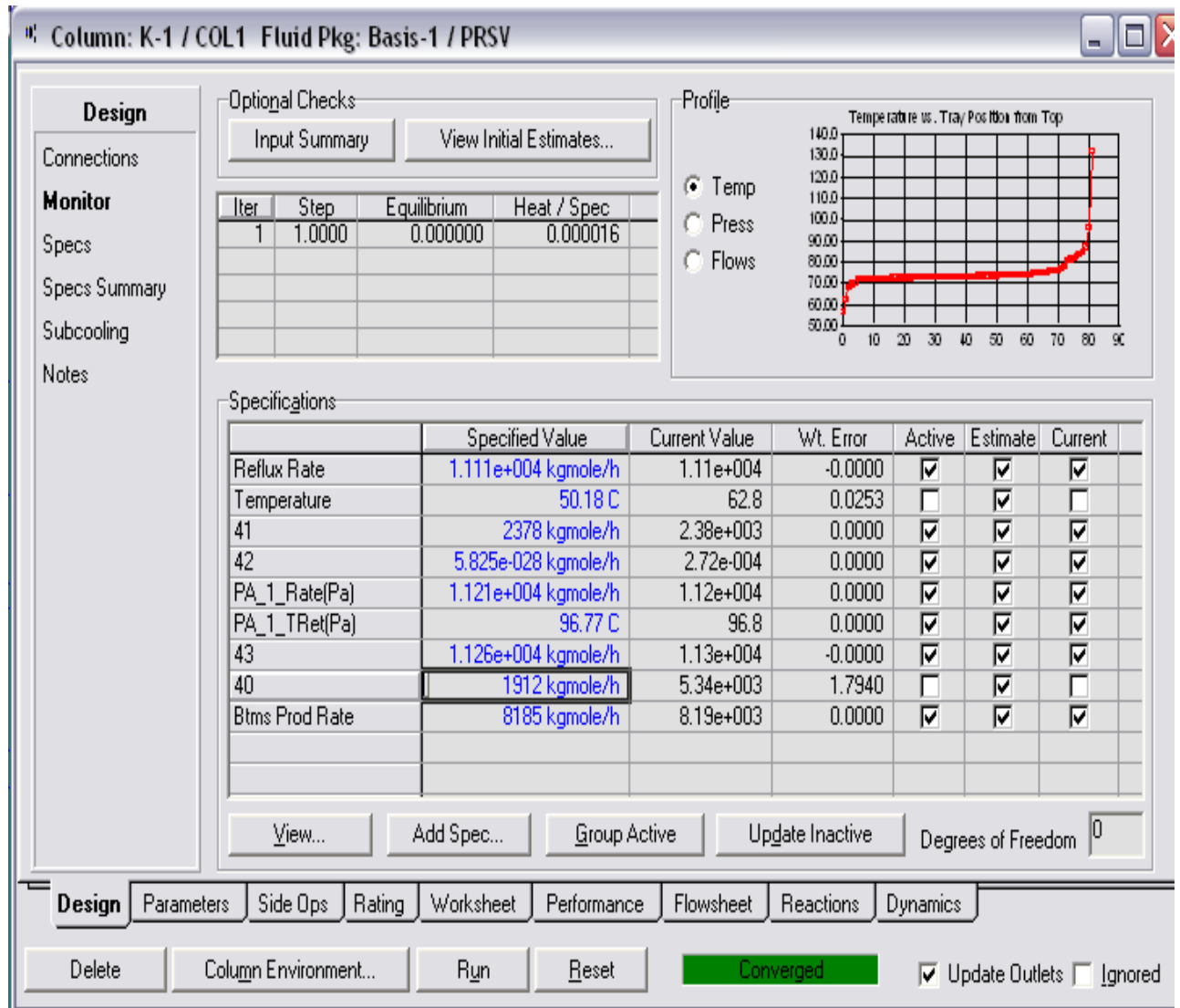


Figura 45. Monitor para la resolución de la torre K-1

Como se puede observar en la ventana anterior, el monitor nos despliega las graficas de temperatura o presión a lo largo de la torre o los flujos de entada y salida a través de los platos, cuando una torre se encuentra totalmente especificada y converge, se puede ver la barra verde de la parte inferior.

Los resultados se pueden observar en la ventana de trabajo, esta nos indica los datos calculados de cada corriente, en esta ventana podemos ver su temperatura, presión, flujo molar, entalpía, etc.

COL1 Fluid Pkg: Basis-1 / PRSV

| Name                          | 34 @COL1    | 33 @COL1    | 37 @COL1    | 36 @COL1    | 35 @COL1    |
|-------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Vapour                        | 0.0000      | 0.0000      | 0.8119      | 0.0495      | 1.0000      |
| Temperature [C]               | 38.83       | 58.43       | 87.56       | 81.07       | 204.6       |
| Pressure [kPa]                | 1096        | 1478        | 1154        | 1154        | 1205        |
| Molar Flow [kgmole/h]         | 5567        | 3019        | 76.52       | 1.126e+004  | 7244        |
| Mass Flow [kg/h]              | 2.673e+005  | 2.053e+005  | 4496        | 7.006e+005  | 6.475e+005  |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 453.7       | 342.5       | 7.692       | 1200        | 976.9       |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole]    | -1.859e+005 | -1.670e+005 | -1.261e+005 | -1.503e+005 | -1.499e+005 |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C]   | 94.42       | 114.6       | 121.1       | 115.2       | 263.7       |
| Heat Flow [kJ/h]              | -1.035e+009 | -5.041e+008 | -9.648e+006 | -1.692e+009 | -1.086e+009 |
| Name                          | 40 @COL1    | 41 @COL1    | 42 @COL1    | 43 @COL1    | 44 @COL1    |
| Vapour                        | 1.0000      | 1.0000      | 1.0000      | 0.0000      | 0.0000      |
| Temperature [C]               | 56.91       | 72.37       | 76.02       | 80.85       | 132.0       |
| Pressure [kPa]                | 1096        | 1102        | 1154        | 1154        | 1205        |
| Molar Flow [kgmole/h]         | 5343        | 2378        | 2.716e-004  | 1.126e+004  | 8185        |
| Mass Flow [kg/h]              | 2.542e+005  | 1.385e+005  | 1.582e-002  | 7.008e+005  | 7.317e+005  |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 430.7       | 246.0       | 2.800e-005  | 1201        | 1104        |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole]    | -1.700e+005 | -1.314e+005 | -1.303e+005 | -1.512e+005 | -1.865e+005 |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C]   | 148.2       | 153.3       | 152.7       | 112.9       | 180.6       |
| Heat Flow [kJ/h]              | -9.082e+008 | -3.126e+008 | -35.39      | -1.702e+009 | -1.526e+009 |
|                               |             |             |             |             |             |
|                               |             |             |             |             |             |
|                               |             |             |             |             |             |
|                               |             |             |             |             |             |

eters Side Ops Rating **Worksheet** Performance Flowsheet Reactions Dynamics

Column Environment... Run Reset **Converged**  Update

Figura 46. Datos de las corrientes de la torre

De esta torre salen seis corrientes, cada una de ellas tiene un componente de interés, por lo que seguiremos el camino de cada una de estas corrientes:

Corriente 40; esta corriente es el domo de nuestra torre K-1, a esta se une la corriente 101 proveniente del separador L-3 y parte de la recirculación que es la corriente 76, juntas se alimentan a un A-3,

del cual se obtiene la corriente 67 y la corriente 68. De este equipo solo se especifica la presión de salida.

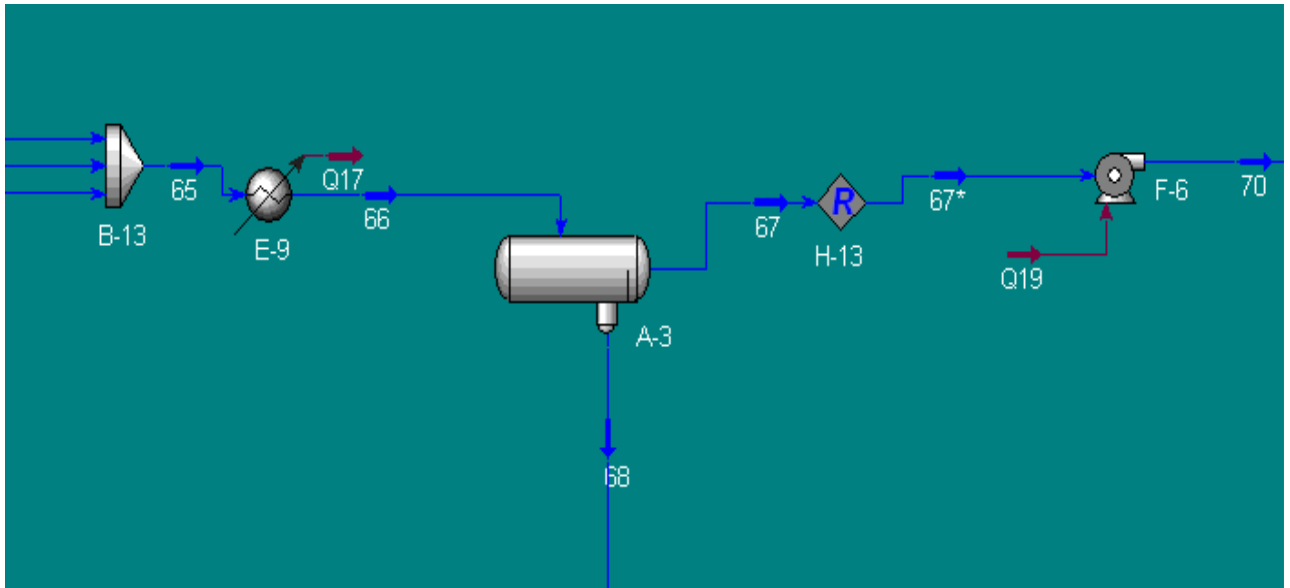


Figura 47. Separador de fases, solo se necesita como dato la presión de salida

La corriente 68 se bombea y se recircula a la sección de reacción a una presión de  $17.62 \text{ kg/cm}^2 \text{ g}$

A la corriente 67 se le aumenta la presión ( a  $19.56$ ) con ayuda de una bomba, y se divide en las corrientes 72 que corresponde al  $31.7\%$  y la corriente 71.

La corriente 71 se divide en las corrientes  $34^{**}$  que representa el  $81.6\%$  de su total y en la 97 que lleva el  $11.4\%$ . Las dos ultimas se recirculan a diferentes separadores, la 34 se baja su presión a  $10.14 \text{ kg/cm}^2 \text{ g}$  y se recircula a la torre K-1, mientras que a la 97 se le baja la presión a  $10.26 \text{ kg/cm}^2 \text{ g}$  y se recircula al separador L-3.

El separador L-3 se alimenta con la mezcla de tres corrientes 99, 77 y 28. La corriente 77 es una recirculación del separador L-4 mientras que la corriente 28 es el  $74.5\%$  de la corriente 26 que proviene del  $5\%$

que no se recircula a los reactores. De este equipo se especifica la presión de salida de las corrientes así como una de las temperaturas. De igual manera se le indica que fracción de cada componente se va por que corriente, lo cual se obtuvo de los datos del equipo pues se tiene el flujo de entrada y el flujo de salida para el equipo.

El separador L-4, cuenta con la corriente 72 como alimentación y tiene como productos a 3 corrientes: 73, 74 y 75, a este equipo es necesario especificarle la temperatura de salida y como calcule la presión, en este caso la presión igual para los productos. De igual manera que el anterior se indica la fracción. La corriente 73 que se recircula a la mezcla de alimentación al asentador A-3. La corriente 74 se lleva a un enfriador para después ser recirculada al separador L-2, lo cual implica que este equipo se tiene que recalcular por Aspen HYSYS, lo mismo para la torre K-1 el separador L-4 que tienen corrientes dependientes entre si.

La parte final de esta línea se refiere a la corriente 75, proveniente del separador L-4 esta se divide en dos corrientes la 78 que contiene el isobutano que se recupera del proceso y representa el 79.4%, la mayor parte del isobutano del proceso se encuentra en recirculación para mantener la relación de isobutano olefinas. Por otro lado la corriente 80 que es el 20.6% se lleva a una serie de filtros para asegurarnos de que esta corriente no contenga HF.

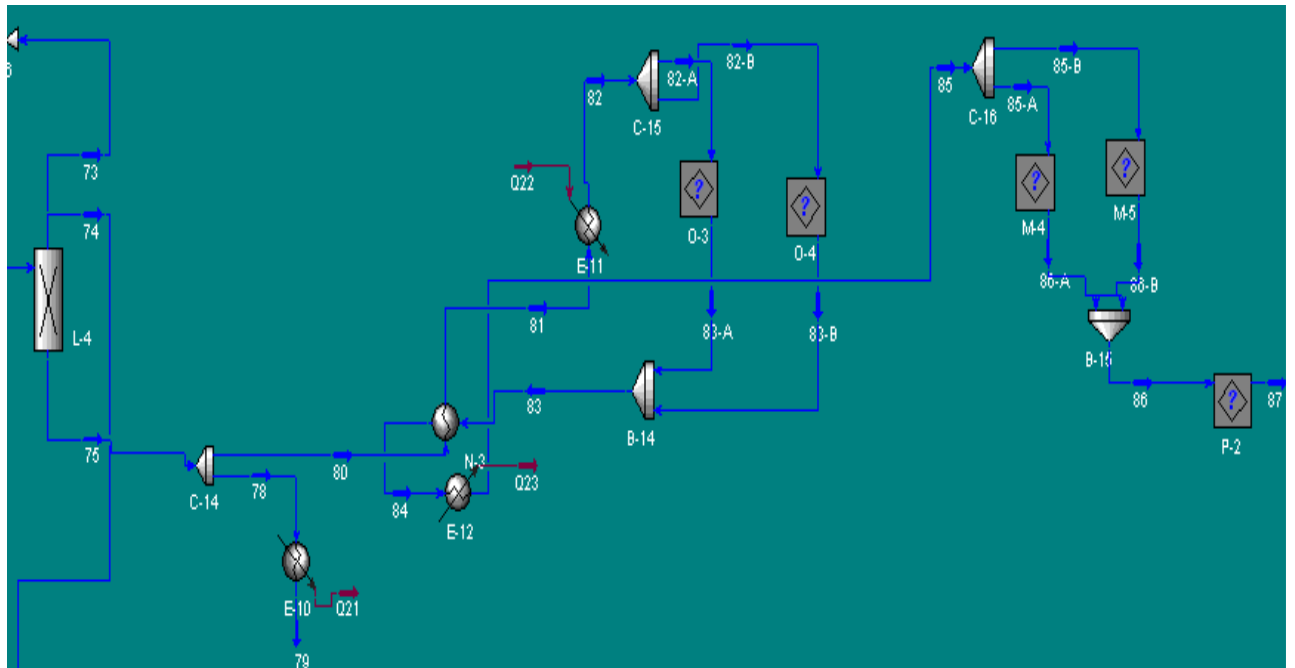


Figura 48. Parte final de la salida del isobutano

Los filtros que se necesitan no se encuentran programados como módulos de calculo en Aspen HYSYS, es por esto que se tienen que programar, con la ayuda de la operación user unit operation; semejante a lo que se realizo en los secadores, se programan los filtros utilizando un if, es decir que pasara en caso de que nuestra concentración de HF sea diferente de cero.

Se tienen cinco filtros, de los cuales O-3 y O-4 son filtros de Alúmina, M-4 M-5 son de KOH , y el último P-2 es un filtro de arena.

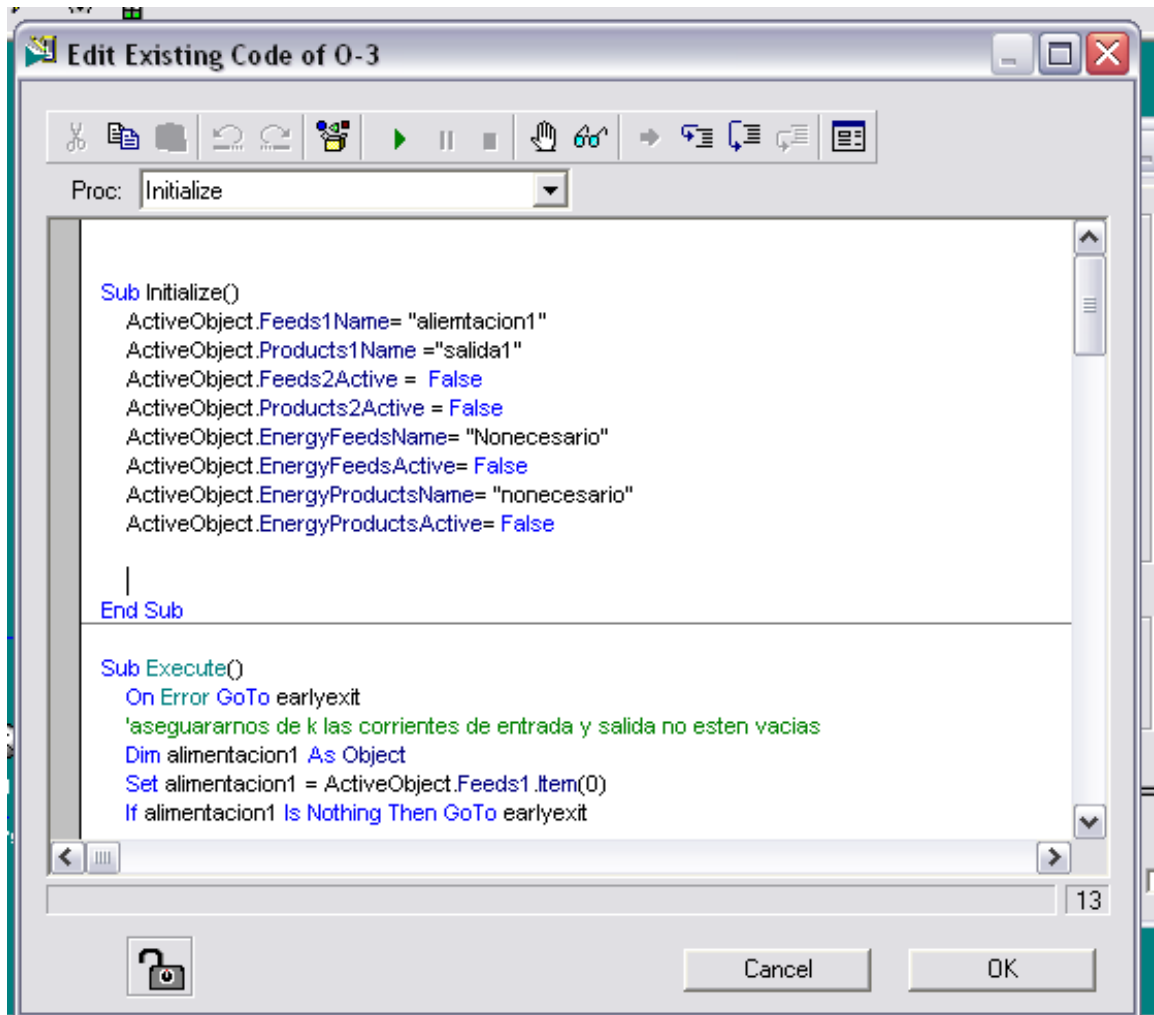


Figura 49. Ejemplo de la programación de uno de los filtros.

- La corriente 42, sale de la torre por el plato 68, y se lleva a un rectificador Q-1, que se programa también, al rectificado se alimenta también una corriente del resto de la línea 52, y salen la corriente 37 que se recircula a la torre en el plato 69, y la corriente 53 a esta ultima la pasamos por un divisor , donde solo necesitamos especificar en que proporciones se divide, en este caso la proporción es de 19.0% para 54 y 81% para 55, la primera se pasa por un enfriador del cual sale en forma de la corriente 52 cuya temperatura es de 80.16°C. La segunda se baja su presión hasta 8.775 kg/cm<sup>2</sup> g, y se alimenta a un intercambiador de calor, en este intercambiador de calor debemos de especificar la temperatura de



una de las corrientes de salida, en este caso la corriente 59, el intercambiador se conecta como se muestra a continuación.

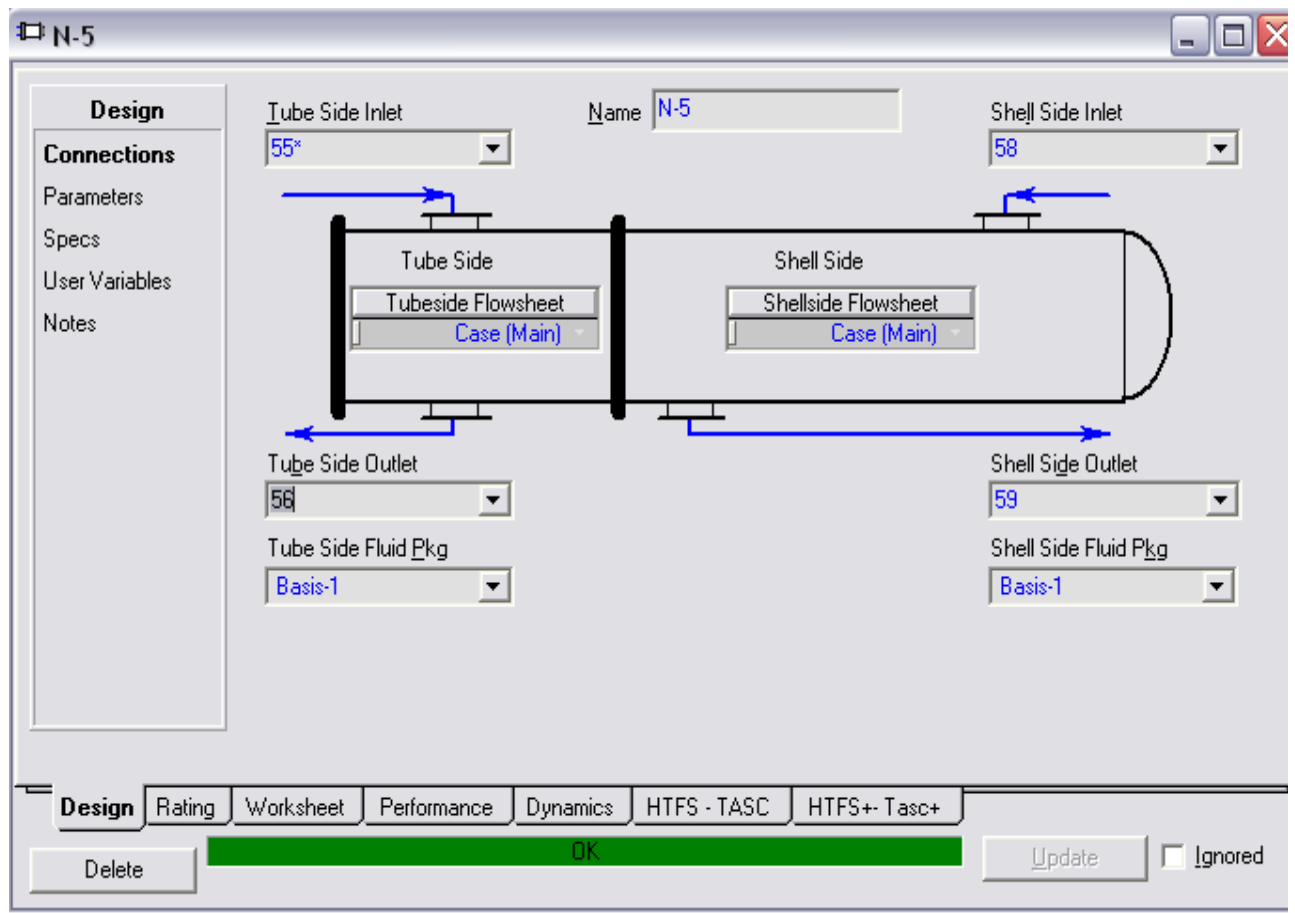


Figura 50. Especificación del intercambiador de calor

Los siguientes pasos son cinco filtros en dos partes iguales O-1 y O-2 son cámaras de alúmina, saliendo de estos equipos, pasan al intercambiador N-5, para dividirse de nuevo en partes iguales y pasar por lo filtros de KOH M-1 y M-2, de nuevo se une y pasa por el filtro de arena P-1, si la corriente no tiene nada de HF, su flujo permanecerá constante durante todo este proceso.

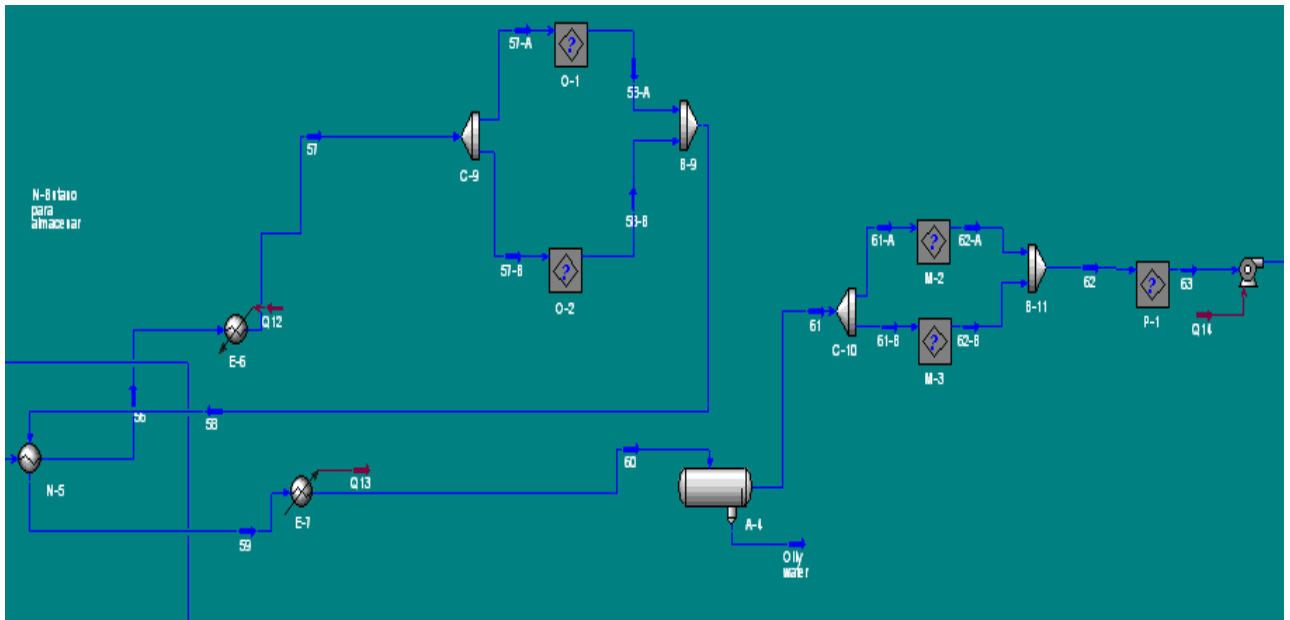


Figura 51. Sección de filtros

- La corriente 41 SE recircula al intercambiador de calor 18000B-E-03, que tiene como alimentación a la corriente 25. Sale como la corriente 41\*, que se enfría y se bombea para convertirse en la corriente 20 que como ya se menciono anteriormente se alimenta a los reactores. El hecho de incluir una recirculación implica el hecho de tener iteraciones, y recirculando esta corriente Aspen HYSYS resuelve de nuevo los reactores y la torre hasta que los equipos converjan.
- La corriente 43 sale del plato 72 de la torre y se alimenta a un intercambiador de calor N-4, del que sale con el nombre de la corriente 36, la otra corriente alimentada a este intercambiador es parte de los fondos de la torre la corriente 45 que sale como la corriente 92 de este equipo se necesita especificar la caída de presión y la temperatura de alguna de las corrientes de salida del equipo. Después de salir del equipo la corriente 36 se recircula a la torre entrando en el plato 73, debido a que los datos de alimentación de la

torre se modifican Aspen HYSYS la recalcula hasta que converjan los datos tomando en cuenta esta nueva recirculación

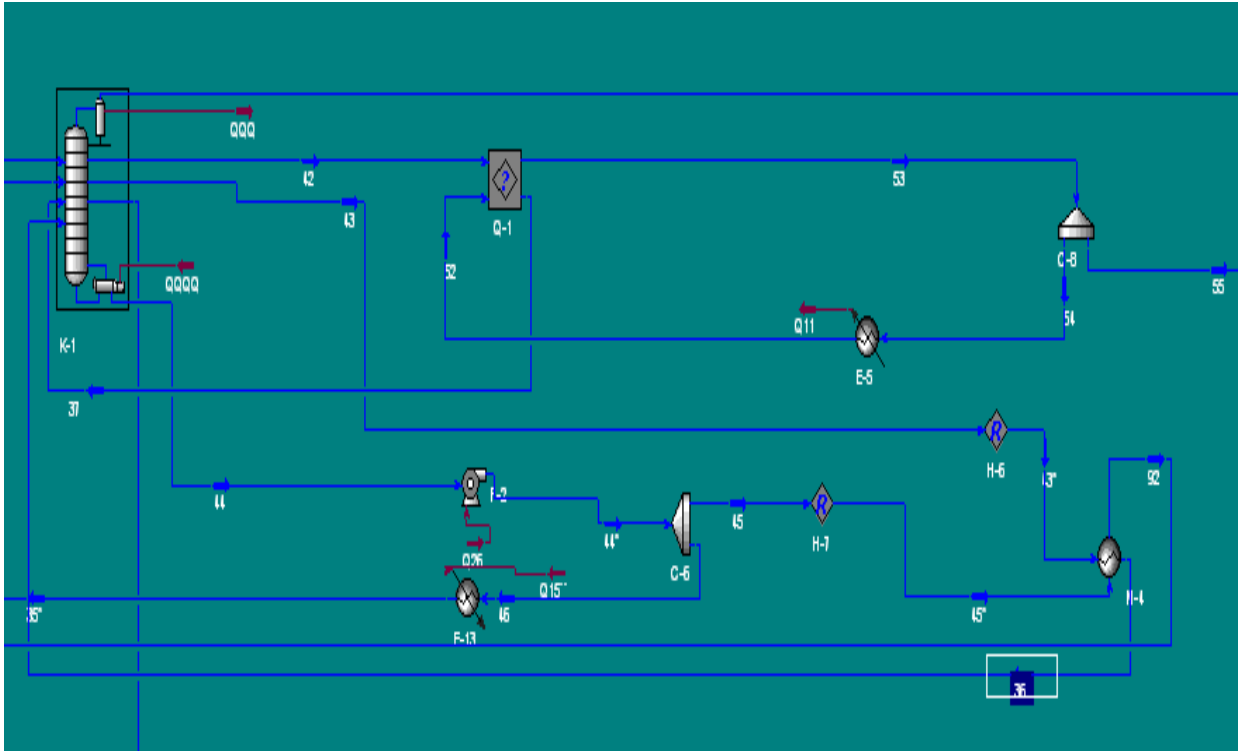


Figura 52. Recirculación de la corriente 36\*

- En el diagrama original se observa la corriente 38, que va a un calentador y regresa como la 39, esta corriente se especifico dentro de la columna como el pump around, de esta corriente especificamos el flujo de salida y su fase de regreso a la torre, así como el plato de salida que es el 72, por lo que los datos de esta corriente se modifican cada vez que la torre se recalcula.
- Por ultimo la corriente de los fondos 44 pasan por una bomba que aumenta su presión hasta  $16.24 \text{ kg/cm}^2$ , para ser divididos en dos corrientes la 46 y 44; la primera representa el 88.5% de la corriente 44, se aumenta su temperatura a  $204.6^\circ\text{C}$  para ser recirculada al rehervidor de la torre K-1 en forma de la corriente 35 ,

la recirculación implica que Aspen HYSYS tiene que recalcular la K-1 y todo lo que deriva de esto hasta converger los resultados. Por otro lado la corriente 45 que representa el 11.5% , primero pasa por un intercambiador de calor N-4, en el cual su temperatura baja a 92°C, para pasar por el intercambiador de calor N-2 del que sale con el nombre de 92 y con una temperatura de 71.12°C, pasa por un enfriador E-8 del cual sale a 37.78°C, y se divide en dos corrientes la 95 que representa el 75% del total de esta corriente y la corriente de Alquilado que se lleva el 25%. La corriente 95 pasa por un filtro M-1, para asegurarnos de que nuestra corriente no contenga HF. La unión de estas dos últimas corrientes representa el alquilado que sacamos de este proceso.



## 7. Análisis de Resultados

### 7.1. Sección de preparación.

Esta sección es para adecuar las condiciones de la corriente que se alimenta al reactor. Si hacemos un análisis solo a esta sección del proceso tenemos la siguiente tabla donde podemos ver las composiciones generales, es decir algunas de estas corrientes tienen dos fases, en la siguiente tabla tenemos las cantidades en kgmol/h de cada sustancia en las corrientes de entrada y salida para esta sección.

Tabla 8. Entradas y salidas de la sección de preparación

|                       | Alimentaciones |            | Productos  |           |
|-----------------------|----------------|------------|------------|-----------|
| <b>Compuestos</b>     | 2              | 1          | 13         | 18        |
| <b>H<sub>2</sub>O</b> | 0.4300         | 1.08000000 | 1.5112     | 0.0000    |
| <b>Propeno</b>        | 0.0000         | 0.00430000 | 8.8812e-16 | 4.3277e-3 |
| <b>i-Buteno</b>       | 0.0000         | 117.370000 | 3.6056e-14 | 117.36    |
| <b>1-Buteno</b>       | 0.0000         | 43.7500000 | 1.3738e-14 | 43.75     |
| <b>Tr2-Buteno</b>     | 0.0000         | 217.280000 | 7.3770e-14 | 217.28    |
| <b>Cis2-Buteno</b>    | 0.0000         | 145.070000 | 6.7168e-14 | 145.04    |
| <b>Propano</b>        | 0.0000         | 0.00920000 | 5.8145e-14 | .0095     |
| <b>i-Butano</b>       | 2.1900         | 0.05900000 | 1.8278e-14 | 2.2476    |
| <b>n-Butano</b>       | 319.25         | 238.680000 | 3.1371e-15 | 557.94    |
| <b>i-Pentano</b>      | 11.640         | 70.6700000 | 6.1510e-20 | 82.2989   |
| <b>n-Pentano</b>      | 0.0000         | 1.71000000 | 3.8248e-20 | 1.6906    |
| <b>13Butadieno</b>    | 0.0000         | .0092      | 1.7577e-17 | 9.0829e-3 |
| <b>HF</b>             | 0.0000         | 0.00000000 | 0.0000     | 0.0000    |
| <b>23-Mbutano</b>     | 0.0000         | 0.05900000 | 7.5915e-24 | 0.0595    |
| <b>23-Mpentano</b>    | 0.0000         | 0.00041000 | 8.5123e-29 | 0.0004    |
| <b>24-Mpentano</b>    | 0.0000         | 0.00026000 | 9.2819e-30 | 0.0002    |
| <b>224-Mpentano</b>   | 0.0000         | 0.00026000 | 2.7998e-30 | 0.0003    |

|                                    |        |                     |            |        |
|------------------------------------|--------|---------------------|------------|--------|
| <b>233-Mpentano</b>                | 0.0000 | 0.00019000          | 3.1463e-31 | 0.0002 |
| <b>234-Mpentano</b>                | 0.0000 | 0.00037000          | 1.9618e-31 | 0.0004 |
| <b>23-Mhexano</b>                  | 0.0000 | 0.00007500          | 5.7151e-33 | 0.0001 |
| <b>24-Mheptano</b>                 | 0.0000 | 0.000030000         | 3.5892e-37 | 0.0000 |
| <b>225-Mhexano</b>                 | 0.0000 | 0.000000520         | 9.7775e-39 | 0.0000 |
| <b>335-Mheptano</b>                | 0.0000 | 0.000000048         | 9.9235e-42 | 0.0000 |
| <b>C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>F</b> | 0.0000 | 4*10 <sup>-16</sup> | 2.607e-029 | 0.0000 |

La importancia de la sección de preparación se debe a que es en esta parte donde establecemos y controlamos las condiciones de la corriente que alimentamos a los reactores.

Como podemos ver la corriente 400 no contiene agua, esto se logra colocando dos secadores, y dos asentadores. Esto es importante debido a que la conversión de las reacciones buscadas depende de la composición de la corriente de entrada, si la corriente [400] contiene agua afectaría a nuestro alquilado final debido a que las reacciones no tendrían el mismo porcentaje de reacción.

El agua que entra al sistema se desecha por la corriente [547], debido al equilibrio entre los compuestos esta corriente contiene trazas de compuestos orgánicos. Esta corriente es el producto de unir las corrientes acuosas de los dos asentadores, dada la naturaleza del proceso la importancia de la fase orgánica es mayor. El flujo que se desecha por la corriente [417] es de 1.511 Kg/hora, las trazas de la fase orgánica que lleva con él no son significativas pues las concentraciones son de orden muy pequeño, la mayor concentración registrada es la del isobutano que es de 3.605e-14.

## 7.2. Sección de Reacción. y Tratamiento

Tomando en cuenta que el fin de nuestro proceso es el obtener la mayor cantidad de alquilado posible, el HF es solo un catalizador, en la forma en que especificamos nuestras reacciones no toma parte en ninguna de ellas

debido a que las reacciones con las que se especificaron son de conversión, no cinéticas.

Los resultados de los reactores en cuanto a las reacciones se refiere se pueden desplegar directo de Aspen HYSYS en forma de tabla, en estas nos muestra el componente, su flujo de entrada y salida, así como cuanto reacciono dentro usando la convención de negativos para reactivos y positivos para productos, los resultados para ambos reactores se muestran a continuación.

Reactor J-1



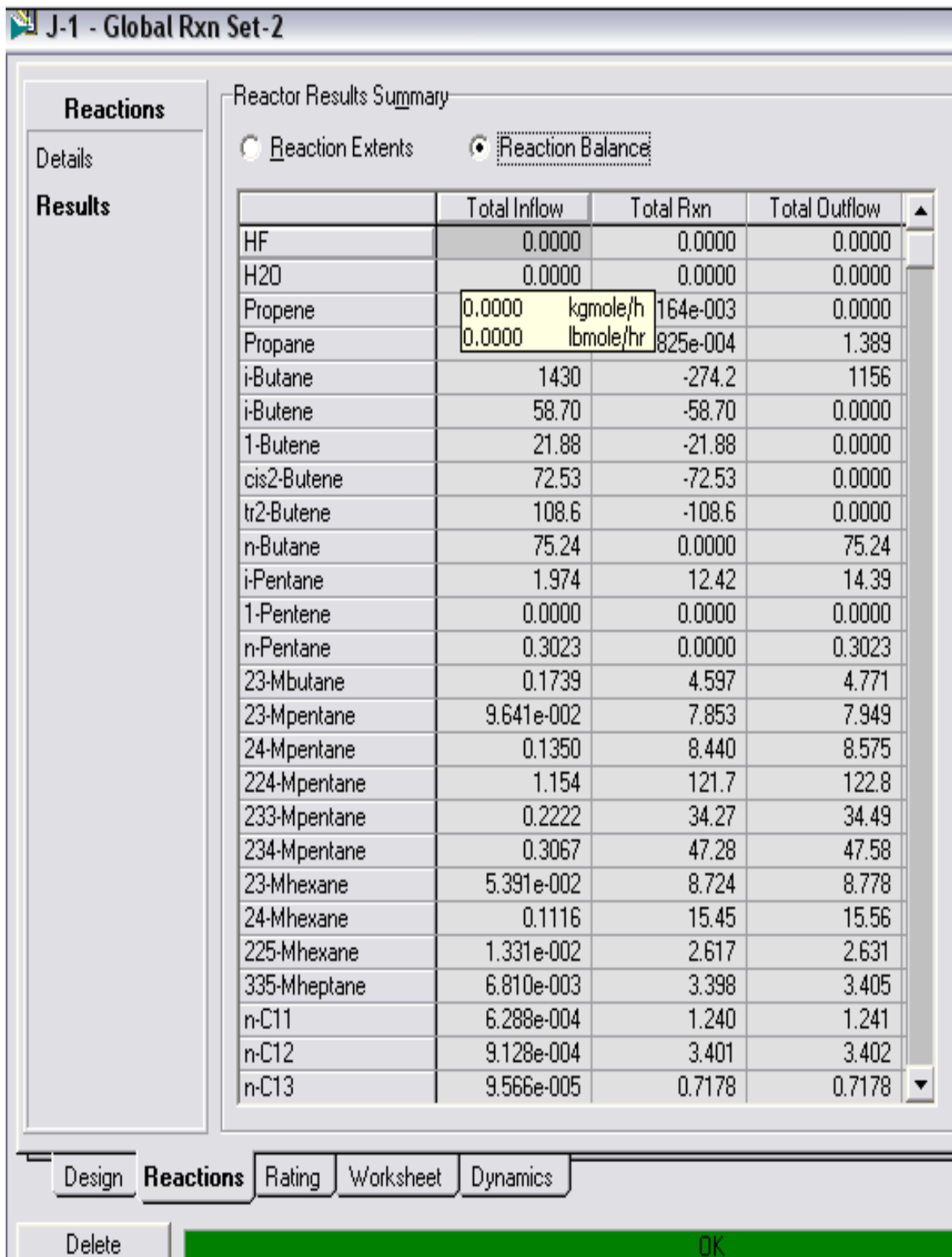


Figura 54. Resultados del reactor A

Reactor J-2

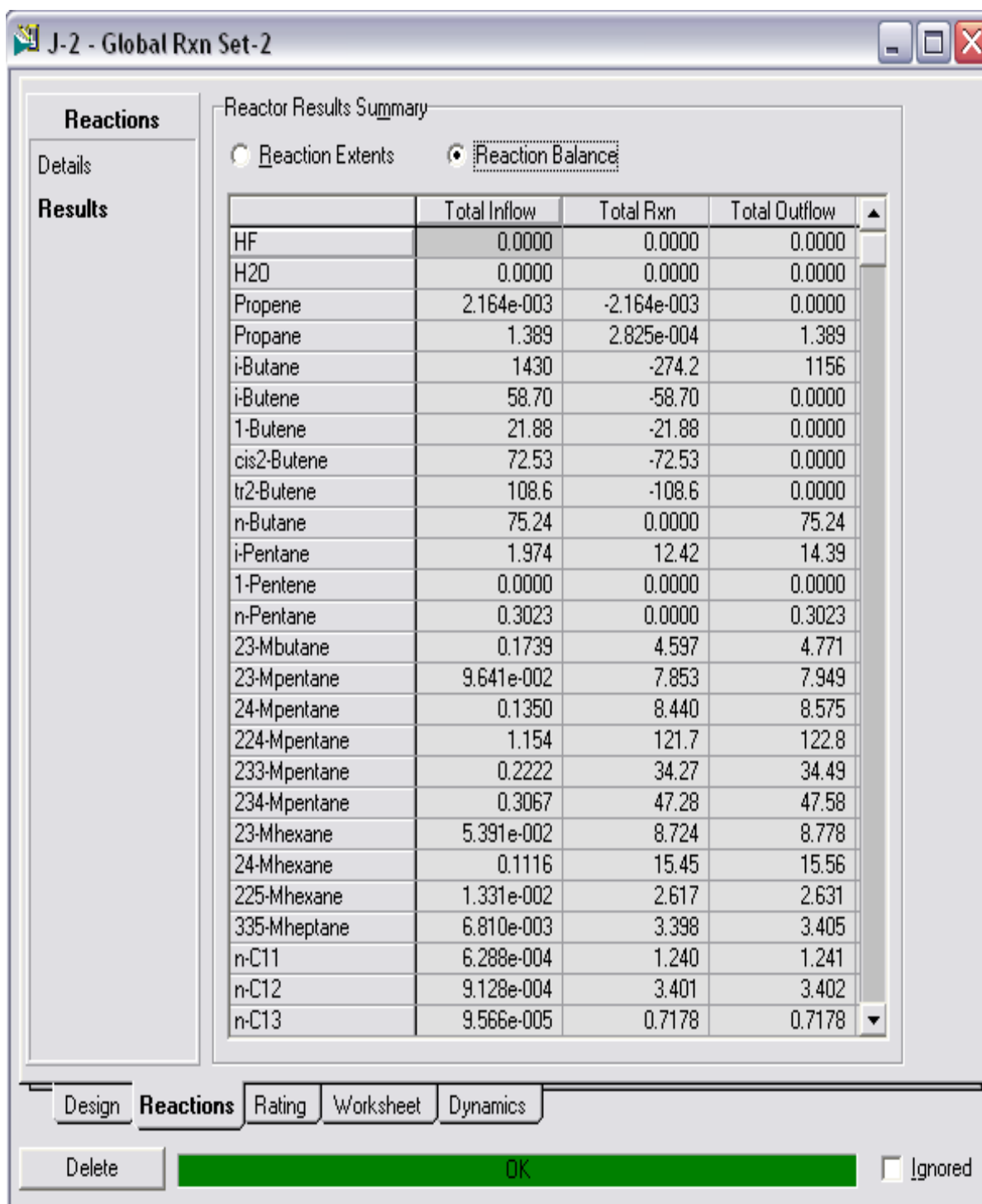


Figura 55 Resultados del reactor B

En Las tablas anteriores se puede observar que el hidrocarburo más producido en los rectores en el 224-M Pentano, seguido por el 233-M Pentano, estos hidrocarburos son cadenas ramificadas, de fácil

combustión y alto octanaje. Por lo cual el objetivo de nuestros reactores se cumplió, transformaron las olefinas en una mezcla de concentrada de productos alquilados.

La corriente que contiene los productos de ambos reactores es la corriente 25, podemos ver que en su composición altos contenidos de isooctanos como los ya mencionados, esta corriente al unirse con la corriente 36 se lleva a separar para obtener una corriente con una mayor concentración aun de alquilado.

| Worksheet                 |         | Molar Flows |  |
|---------------------------|---------|-------------|--|
| H2O                       | 0.00000 |             |  |
| Propene                   | 0.00000 |             |  |
| i-Butene                  | 0.00000 |             |  |
| 1-Butene                  | 0.00000 |             |  |
| tr2-Butene                | 0.00000 |             |  |
| cis2-Butene               | 0.00000 |             |  |
| 13-Butadiene              | 0.00000 |             |  |
| Propane                   | 2.7787  |             |  |
| i-Butane                  | 2311.2  |             |  |
| n-Butane                  | 150.48  |             |  |
| i-Pentane                 | 28.779  |             |  |
| n-Pentane                 | 0.60469 |             |  |
| 12-Butadiene              | 0.00000 |             |  |
| HF                        | 0.00000 |             |  |
| 23-Mbutane                | 9.5422  |             |  |
| 23-Mpentane               | 15.899  |             |  |
| 24-Mpentane               | 17.150  |             |  |
| 224-Mpentane              | 245.63  |             |  |
| 233-Mpentane              | 68.975  |             |  |
| 234-Mpentane              | 95.169  |             |  |
| 23-Mhexane                | 17.555  |             |  |
| 24-Mheptane               | 0.00000 |             |  |
| 225-Mhexane               | 5.2610  |             |  |
| 335-Mheptane              | 6.8103  |             |  |
| C4H9F*                    | 0.00000 |             |  |
| ...                       | ...     |             |  |
| Total 3017.68763 kgmole/h |         |             |  |

Figura 56. Composición de la corriente 25

La corriente final por la que sale el alquilado que se almacena es la corriente de nombre alquilado, aun contiene pequeñas trazas de propeno, i.Buteno, etc, sin embargo estas trazas tienen magnitudes extremadamente pequeñas, del orden de  $10e-35$  moles; en comparación con los 409.63 moles /Hr que tiene de 234- M pentano.

| Worksheet          |              | Molar Flows         |
|--------------------|--------------|---------------------|
| Conditions         | H2O          | 0.00000             |
| Properties         | Propene      | 8.9401e-035         |
| <b>Composition</b> | i-Butene     | 8.4984e-027         |
| K Value            | 1-Butene     | 2.3836e-026         |
| User Variables     | tr2-Butene   | 0.00000             |
| Notes              | cis2-Butene  | 0.00000             |
| Cost Parameters    | 13-Butadiene | 3.7834e-025         |
|                    | Propane      | 3.1556e-018         |
|                    | i-Butane     | 40.956              |
|                    | n-Butane     | 125.13              |
|                    | i-Pentane    | 52.637              |
|                    | n-Pentane    | 1.3244              |
|                    | 12-Butadiene | 0.00000             |
|                    | HF           | 2.2017e-028         |
|                    | 23-Mbutane   | 37.119              |
|                    | 23-Mpentane  | 42.039              |
|                    | 24-Mpentane  | 47.399              |
|                    | 224-Mpentane | 154.00              |
|                    | 233-Mpentane | 139.55              |
|                    | 234-Mpentane | 409.63              |
|                    | 23-Mhexane   | 155.25              |
|                    | 24-Mheptane  | 155.39              |
|                    | 225-Mhexane  | 24.501              |
|                    | 335-Mheptane | 22.509              |
|                    | C4H9F*       | 0.58284             |
|                    | n-C12        | 1.6853              |
|                    | n-C11        | 0.61432             |
|                    | n-C13        | 0.35558             |
|                    | 24-Mhexane   | 7.6523              |
|                    | 1-Pentene    | 0.00000             |
| Total              |              | 1418.32348 kgmole/h |

Figura 57. Composición de la corriente alquilado

Otra parte de los productos de este proceso son las corrientes 100 y 144 de las cuales se busca obtener la mayor cantidad de i-Butano posible, de nueva cuenta esta corriente contiene trazas de los otros hidrocarburos siendo el n- butano el de mayor cantidad.

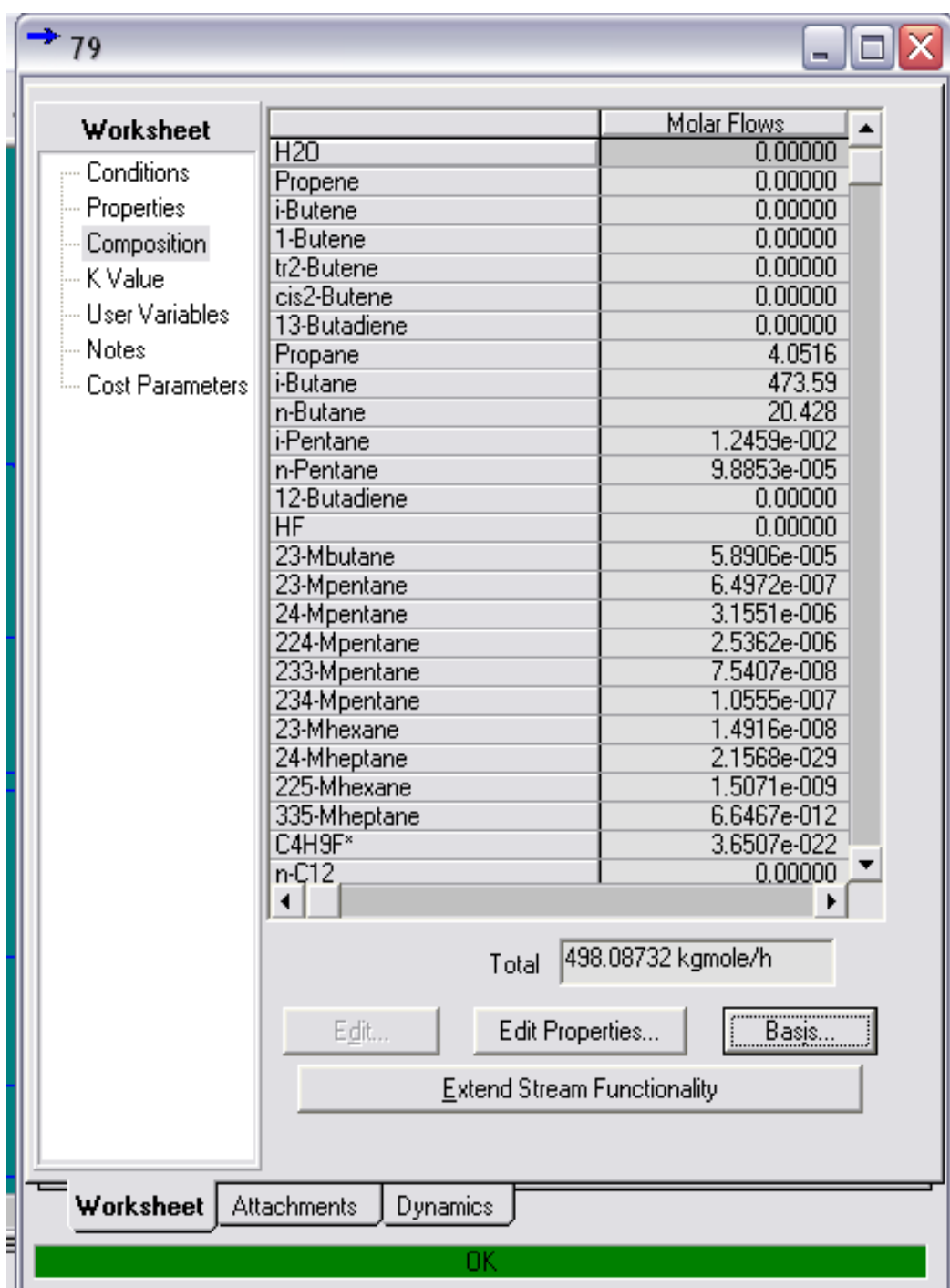


Figura 58. Composición de la corriente 79

|                | Molar Flows |
|----------------|-------------|
| H2O            | 0.00000     |
| Propene        | 0.00000     |
| i-Butene       | 0.00000     |
| 1-Butene       | 0.00000     |
| tr2-Butene     | 0.00000     |
| cis2-Butene    | 0.00000     |
| 1,3-Butadiene  | 0.00000     |
| Propane        | 5.7192e-002 |
| i-Butane       | 22.107      |
| n-Butane       | 1.0066      |
| i-Pentane      | 1.5793e-002 |
| n-Pentane      | 2.0658e-004 |
| 1,2-Butadiene  | 0.00000     |
| HF             | 1.2785e-010 |
| 2,3-Mbutane    | 7.6963e-004 |
| 2,3-Mpentane   | 4.3730e-004 |
| 2,4-Mpentane   | 2.4056e-004 |
| 2,2,4-Mpentane | 2.5036e-004 |
| 2,3,3-Mpentane | 1.7954e-004 |
| 2,3,4-Mpentane | 3.4984e-004 |
| 2,3-Mhexane    | 6.9594e-005 |
| 2,4-Mheptane   | 2.7482e-005 |
| 2,2,5-Mhexane  | 4.4467e-007 |
| 3,3,5-Mheptane | 4.0905e-008 |
| C4H9F*         | 1.9896e-003 |
| n-C12          | 0.00000     |

Total 23.19141 kgmole/h

Buttons: Edit..., Edit Properties..., Basis..., Extend Stream Functionality, OK

Figura 59. Composición de la corriente 88

La corriente que contiene el n- Butano que se recupera de este proceso es la corriente 64, el cual después de pasar por varios filtros y un asentador, en caso de contener agua aquí se eliminaría, esta corriente contiene trazas del resto de los orgánicos, sin embargo el i-butano es también el de mayor cantidad.

## 8. Conclusiones

La simulación nos brinda una herramienta muy útil e importante para la ingeniería química, los beneficios que se desprenden de ella son amplios y muy útiles, como saber las características de corrientes de una planta que aun no esta terminada es un paso muy importante.

Se sabe que la planta de alquilación es muy importante en el proceso de producción de gasolinas, y su reconfiguración representa un costo relevante para PEMEX, las herramientas utilizadas nos permite analizar la composición de cada una de sus corrientes, así como las propiedades de los equipos, la cantidad de producto alquilado que se obtiene por medio de esta planta así como su composición, tenemos información de las salidas, entradas y lo que ocurre cada uno de lo equipos. Es decir contamos con un esquema que nos permite calcular y modificar nuestra planta, esto es de suma utilidad tomando en cuenta que podemos manipular las alimentaciones, temperaturas, y condiciones de los equipos, con el fin de obtener datos de utilidad en la industria.

La planta procesa una corriente de olefinas provenientes de la planta vecina de hidrogenación, y nos entrega una corriente de alquilado, una butano y otra con el isobutano, cada una de las anteriores con trazas de los demás} componentes de este sistema, el fin de esta planta es el de transformar de la manera mas eficiente las olefinas en alquilado, el cual se utiliza para producir gasolinas. Analizando la situación actual de nuestro país esto es de suma importancia si tomamos en cuenta que actualmente el país se encuentra ante una discusión intensa acerca de la reforma energética, entre los puntos que algunos mexicanos han tocado, se tiene la siguiente pregunta cómo es posible que si México es un país rico en petróleo y que exporta el mismo, tengamos que importar gasolinas.

Lo que pasa con PEMEX es que no produce la suficiente gasolina para abastecer la población vehicular. Tan solo en el periodo de Enero a Abril del 2008, la importación de gasolinas le costo al país alrededor de siete mil 70 millones de dólares, esto representa un 74% mas que el mismo periodo de un año atrás que fue de cuatro mil 58 millones de dólares, durante este periodo del presente año se han comprado un promedio de 317mil barriles por día para abastecer un parque vehicular de más de 20 millones de autos, en la actualidad nuestro país demanda aproximadamente 779mil barriles por día, sin embargo las seis refinerías con las que contamos en el país no producen lo suficiente para abastecer el país, la producción de gasolinas se ha estancado prácticamente desde el 2003 cuando se producían 456mil bpd, hoy en día producimos un total de 459mil bpd.

Es por esta situación que la reconfiguración en la refinería "General Lázaro Cárdenas del Río" es necesaria, aunque no suficiente, esta medida se tendrá un aumento en la producción de gasolinas entre un 60 - 63% pasando de 27500bpd a 30250bpd esto es 2155bpd mas de gasolina producida.

Se tiene planeado que la reconfiguración se termine para finales del 2009, es decir actualmente se trabaja en ello, la importancia de la simulación radica en el análisis de la planta, ya que con esta se pueden obtener datos de una planta que aun no esta terminada, con la ayuda del simulador se pueden tener resultados al aumentar o disminuir algunas variables, tales como temperatura, presión, conversión para el caso de las reacciones, etc.

Es inminente la necesidad de la construcción de una refinería, con reconfiguraciones se esta controlando el problema sin embargo la creciente necesidad de consumo de gasolinas nos hace ver la necesidad de una nueva refinería que cubra con mas eficacia el consumo de los



mexicanos, y no pagar por la importación de gasolinas, que representa el procesamiento que se le da en el extranjero al petróleo que México vende.

## 9. Bibliografía

1. Manual de Aspen HYSYS
2. Hernández Martines Angel Ramon, "Modelado y Simulación de la torre fraccionadora de la planta de alquilación de isobutano", Tesis mención Ingeniero Químico, 2004
3. Barriga Solorio Espiridion, "Modelado y simulación del reactor de la planta de alquilación de butilenos", Tesis mención Maestro en Ingeniería Química, 1998
4. Hernández Andrade Katia Jannete, "Análisis de una planta de alquilación con HF mediante el uso de Advanced Process Analysis System" Tesis mención Ingeniería Química, 2003
5. Chapin, L.E. Liolios, G.C. and Robertson, T.M. "Which Alkylation HF or H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>" , Hydrocarbon Processing, September 1985
6. A. H. Bolkob, "Alquilación catalítica y térmica de isobutano con etileno".
7. GLK, "HF Alkylation Unit Problem Solution]", Octubre 1993
8. PRO/II Casebok, "Sulfuric Acid Alkylation plant", Octubre 1991
9. K.W. Li, Roger E. Eckert and Lyle F. Albrighth "Alkylation of isobutane with light olefins using sulfuric acid" Ind Eng. Chem. Process Des. Develop, Vol 9 No 3 1970
10. K.W. Li, Roger E. Eckert and Lyle F. Albrighth "Alkylation of isobutane with light olefins using sulfuric acid, reaction mechanism and comparison with HF alkylation" Ind Eng. Chem. Process Des. Develop, Vol 9 No 3 1970
11. F.B. Sprow "Role of interfacial Area in Sulfuric Acid Alkylation", I & EC Process Desing and Development, Vol. 8 No. 2 April 1969
12. F.G. Ciapetta, "Alkylation of isoparaffins, application of the carbonium-ion theory" The atlantic refining company Philadelphia.
13. C.R. Cupit, J. E. Gwyn & E.C. Jernigan, "Catalitic Alkylation" Petro/Chem Engineer, January 1962
14. José Gil, "Producción pico y precio del barril" [periódico en línea] [http://www.soberania.org/Articulos/articulo\\_3878.htm](http://www.soberania.org/Articulos/articulo_3878.htm) consulta: Mayo 2008

15. José Gil, "Reservas y producción petrolera hacia su hora cero" [periódico en línea], Consulta: Mayo 08
16. El informador [periodico en línea] [www.elinformador.com](http://www.elinformador.com) consulta: 23Mayo 2008.

10. **Anexo A Diagrama de La simulación**

