

005791

Jef



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

MODELADO Y SIMULACION DEL REACTOR DE LA PLANTA DE ALQUILACION DE BUTILENOS

T E S I S

PARA OBTENER EL GRADO DE: MAESTRO EN INGENIERIA QUIMICA ( P R O C E S O S ) P R E S E N T A : ING. ESPIRIDION BARRIGA SOLORIO



MEXICO, D. F.

1998.

266182

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA  
DIRECCIÓN

**ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ**  
Director General de la Administración Escolar  
Presente

AT'N: Lic. Antonio Díaz García  
Jefe de la Unidad de Administración del Posgrado.

Me es grato informarle que el alumno **ING. ESPIRIDIÓN BARRIGA SOLORIO** presentará próximamente su examen para obtener el grado de Maestría en Ingeniería Química (Procesos) (Clave 479) ante el siguiente jurado:

Presidente	Dr. Rafael Herrera Nájera
Primer Vocal	Dr. Alejandro Lara Márquez (PEMEX)
Secretario	Dr. Sergio Trejo Martínez
Primer Suplente:	Dr. Ricardo Rivero Rodríguez (IMP)
Segundo Suplente:	Dr. Julio Landgrave Romero

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

Atentamente  
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"  
Ciudad Universitaria, D F , 11 de septiembre de 1998.

El Director

Dr. Enrique R. Bazúa Rueda

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

## **DEDICATORIAS**

**A DIOS GRACIAS DE TODO CORAZÓN POR LO QUE ESTAS HACIENDO HOY EN MI VIDA, AL PERMITIRME ALCANZAR MÁS ÉXITO.**

**CON TODO MI AMOR Y CARIÑO PARA MI ESPOSA IMELDA Y MIS HIJAS ANA CAROLINA, ALONDRA MARÍA Y JESÚS DANIEL POR QUE SIEMPRE ESTUBIERÓN RESANDO POR MÍ Y REPRESENTAN LO MÁS HERMOSO DE MI VIDA.**

**A MIS PADRES (†) QUE SIEMPRE ESTAN CONMIGO, SÉ QUE ESTO LOS HUBIERA LLENADO DE FELICIDAD Y ORGULLO. LOS EXTRAÑO!**

**A MIS HERMANOS Y FAMILIARES POR SU INDUDABLE APOYO.**

**A MIS COMPAÑEROS Y AMIGOS DE LA FACULTAD Y TODOS AQUELLOS QUE DE ALGUNA Ú OTRA MANERA CONTRIBUYERÓN CON SU APOYO INCONDICIONAL Y DESINTERESADO, PARA LA REALIZACIÓN DE ESTE TRABAJO.**

## AGRADECIMIENTOS

QUIERO AGRADECER A PETROLEOS MEXICANOS, POR BRINDARME LA OPORTUNIDAD DURANTE LOS ESTUDIOS DE MAESTRÍA.

AL PERSONAL DE LA REFINERÍA ING. ANTONIO M. AMOR, POR LAS FACILIDADES EN LA REALIZACIÓN DE ESTE TRABAJO.

AL ING. CELESTINO MONTIEL MALDONADO, A QUIEN AGRADESCO SU APOYO.

AL DR. SERGIO TREJO Y DR. RAFAEL HERRERA POR SU VALIOSA COLABORACIÓN, ORIENTACIÓN Y CONSEJOS.

A LOS MIEMBROS DEL JURADO, POR SU OPINIÓN DEL PRESENTE TRABAJO.

## INDICE

<b>RESUMEN</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO 1</b>	
<b>INTRODUCCIÓN</b>	
1.1. Importancia	3
1.2. Objetivo principal del presente trabajo	4
1.3. Alcance	4
1.4. Hipótesis	4
1.5. Simulador utilizado	5
<b>CAPÍTULO 2</b>	
<b>GENERALIDADES</b>	
2.1. Secciones de la planta de alquilación	7
2.2. Alquilación con ácidos líquidos	7
2.3. Obtención del producto deseado	12
2.4. Influencia de las variables de operación	15
2.4.1. Tipo y concentración del ácido	15
2.4.2. Temperatura de reacción	17
2.4.3. Relación isobutano/olefinas	18
2.4.4. Composición de la carga	20
2.4.5. Calidad de la emulsión	23
2.4.6. Tiempo de residencia	23
<b>CAPÍTULO 3</b>	
<b>DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN</b>	
3.1. Proceso de alquilación con HF usado como catalizador	26
3.2. Aspectos de ingeniería en alquilación	29
3.3. Transferencia de masa y ecuaciones cinéticas	29
3.4. Mecanismo de reacción	33

## **CAPÍTULO 4**

### **SIMULACIÓN DEL REACTOR DE LA PLANTA DE ALQUILACIÓN**

4.1. Condiciones principales y modelos empleados	39
4.1.1 Componentes de la carga a reacción	39
4.1.2 Modelos de operaciones unitarias empleados	39
4.1.3. Cálculo de propiedades	40
4.2. Modelo propuesto para el reactor de alquilación	43
4.3. Reacciones de alquilación más importantes	43
4.4. Expresiones de velocidad de reacción	45
4.5. Modelo del sistema de reacción	49
4.6. Datos de las corrientes	53
4.7. Métodos de convergencia	53

## **CAPÍTULO 5**

<b>RESULTADOS, PRESENTACIÓN Y ANÁLISIS</b>	<b>55</b>
--	-----------

## **CAPÍTULO 6**

<b>CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</b>	<b>101</b>
---------------------------------------	------------

## **CAPÍTULO 7**

<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>104</b>
---------------------	------------

## **CAPÍTULO 8**

<b>APÉNDICE</b>	<b>107</b>
-----------------	------------

APÉNDICE 8.1. Perfiles de reactivos y productos	108
APÉNDICE 8.2. Análisis típico de la carga a reacción	114
APÉNDICE 8.3. Datos de las corrientes de alimentación	115
APÉNDICE 8.4. Datos de las corrientes de alimentación(diseño)	116

## RESUMEN

En el presente trabajo se propone un modelo de reactor tubular de la planta de alquilación de butilenos de PEMEX-REFINACIÓN, para lo cual se utiliza el simulador ASPEN PLUS para efectuar la simulación, tomando como ejemplo el reactor de alquilación de la Refinería de Salamanca Gto y reproducir los balances de materia, condiciones de operación y propiedades termodinámicas de la planta de alquilación, cuyo licenciador es la PHILLIPS PETROLEUM COMPANY, así como la de llevar a cabo la simulación con los datos de operación reales buscando el mejoramiento en las condiciones de operación para lograr la máxima producción y calidad de alquilado.

Se presenta un sistema de 16 reacciones para la modelación del reactor de las cuales únicamente se consideran 5 reacciones principales, utilizando un modelo de ley de potencias, en el cual se ajustaron los datos cinéticos encontrados en la literatura

Para llevar a cabo la simulación en estado estacionario se utilizaron en principio los datos de diseño con el modelo de reactor propuesto que básicamente fueron consideradas cinco reacciones que son las que producen el alquilado(2,3-dimetilhexano, 2,2,3- y 2,2,4-trimetilpentanos respectivamente), y una que produce ASA(aceite soluble en ácido) productos indeseables del proceso de alquilación.

La simulación del reactor de la planta de alquilación arrojó resultados comparables con los de diseño.

Finalmente se efectuó la simulación con datos puntuales de operación para tener un punto comparativo contra las condiciones de diseño, con la finalidad de poder efectuar ajustes en la planta Y los resultados son acordes con la operación del reactor.



## 1.1. IMPORTANCIA

Como una consecuencia de los problemas ambientales, PEMEX-REFINACIÓN cambió la estrategia de producción de gasolina de acuerdo a las nuevas especificaciones. Los principales factores a reducir son; el nivel de ozono, y emisiones de monóxido de carbono(CO) de los vehículos, así como los hidrocarburos tóxicos; óxidos de azufre(SO<sub>x</sub>) y óxidos de nitrógeno(NO<sub>x</sub>). De acuerdo a esto la nueva gasolina(PREMIUM) se prepara cumpliendo con las siguientes características de calidad:

\*Reducción de volatilidad; esto es bajar la presión de vapor(PVR), para reducir los niveles de ozono. Esto se logra removiendo butanos y pentanos de la gasolina.

\*Limitaciones en el contenido de aromáticos, con especial énfasis en benceno. Se resuelve reduciendo la severidad en las plantas reformadoras.

\*Reducción de olefinas: Principalmente la eliminación de olefinas(C<sup>=</sup>) de planta catalítica(FCC) reducirá la presión de vapor(PVR), y los isoamilenos usarlos para producir TAME(teramil metil eter) en unidades de esterificación

\*Incremento de la cantidad de oxigenados, en la cual las plantas metil-terbutil-eter(MTBE) y TAME(teramil metil eter) son preferidas.

\*Reducción de azufre: Por hidrotreamiento de la carga a planta catalítica(FCC) ó hidrotreamiento de la gasolina pesada de FCC.

\*Eliminación de plomo: Esto ya estaba contemplado de acuerdo a las nuevas normas mencionadas, el índice de octano disminuye, y es compensado con otras corrientes respecto al pool de gasolinas.

De acuerdo a lo anterior la producción de gasolina alquilada, ayudará considerablemente a ajustar el pool de octano, al tener un alto número de octano MON(motor octane number), puesto que es formada en su mayor parte por parafinas ramificadas poco reactivas.

Por lo tanto podemos esperar en los próximos años que la capacidad de alquilación se incremente, especialmente si el desarrollo de nuevos catalizadores sólidos estables(aun en la actualidad no se tienen plantas de alquilación en el ámbito industrial que utilicen catalizadores sólidos) supera las limitaciones del ácido fluorhídrico(HF) ya que es considerado un ácido muy peligroso en cuanto a manejo se refiere.

La simulación del reactor de alquilación efectuada en el presente trabajo se considera importante debido a que se buscará con ello reproducir las condiciones operacionales y seleccionando las que mejor representen el proceso, para una mayor producción de gasolina alquilada

## 1.2. OBJETIVO PRINCIPAL DEL PRESENTE TRABAJO

Generar un modelo practico de simulación del reactor de la planta de alquilación que sea capaz de predecir las condiciones de operación del reactor en términos de las características del producto, para con ello procurar una máxima producción y mejor calidad del producto deseado(alquilado).

## 1.3. ALCANCE

El presente trabajo de simulación del reactor de la planta de alquilación con la alimentación de los datos de diseño, así como de los datos puntuales de planta, será de aplicación teórico-práctica en las plantas de alquilación de PEMEX-REFINACIÓN, para buscar el mejoramiento en el funcionamiento del proceso efectuando los ajustes adecuados en condiciones de operación que nos permita maximizar la producción de alquilado.

## 1.4. HIPOTESIS

Se propone correr la simulación del reactor tipo elevador de la planta de alquilación en el cual ocurren múltiples reacciones de las cuales se suponen que únicamente se llevan a cabo aquellas que producen el alquilado, esencialmente 2,3-DMH(dimetilhexano), 2,2,4-, 2,3,4-TMP's(trimetilpentanos) respectivamente, además de una reacción secundaria que forma aceite soluble en ácido(ASA), en la simulación efectuada se utiliza un modelo de reactor tubular con una cinética sencilla de ley de potencias, donde los efectos de transferencia de masa son despreciables. Por lo tanto el control del proceso es mediante la cinética.

## 1.5. SIMULADOR UTILIZADO

Para este trabajo se utilizo el simulador ASPEN PLUS VERSIÓN 9.3, bajo licencia otorgada por la Compañía Aspen Technology para fines educativos a la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México

Mediante la aproximación secuencial modular que emplea el simulador se podra simular el diagrama de flujo de la sección de reacción del proceso de alquilación. Los programas de simulación son capaces de representar la mayoría de los equipos utilizados en los procesos de refinación. Se pueden estimar las propiedades de mezclas vapor-líquido no ideales y métodos para el calculo de propiedades de mezclas complejas de productos del petróleo.

El simulador cuenta con rutinas que generan propiedades físicas de las sustancias químicas mediante formulas ó tablas de datos. Estos datos incluyen densidad de líquido, constantes críticas, capacidad calorífica, calor latente, solubilidad, puntos normales de fusión y de ebullición, y formulas para calcular presiones de vapor.

Los modelos a utilizar para la simulación del proceso de alquilación, son los modelos de las operaciones unitarias de ASPEN PLUS, se seleccionaran los más adecuados y que representen lo mejor posible todas y cada una de las operaciones que componen el proceso.

Por lo que a este trabajo se refiere, el punto primordial del proceso de alquilacion es el sistema de reacción, por las múltiples reacciones que ocurren en la fase ácida. En el presente trabajo se estudiará el reactor principalmente

## 2.1. SECCIONES DE LA PLANTA DE ALQUILACIÓN

La ingeniería básica del proceso es de la Compañía Phillips y cuenta con las siguientes secciones ver Figuras 2.1.1 y 2.1.2.

2 1.1. Pretratamiento de la carga al proceso constituida principalmente por el reactor Hydrisom, torre agotadora DME(dimetileter) y secado, con la finalidad de eliminar las impurezas que afectan la calidad y rendimiento del alquilado; así como el consumo de ácido fluorhídrico(HF).

2.1.2. Reacción y Asentador de HF.

2 1 3. Columna regeneradora de ácido fluorhídrico.

2 1.4. Separación de productos, que comprende la columna fraccionadora principal de isobutano, propano, butano y alquilado, torre agotadora de ácido fluorhídrico y torre rectificadora de butano.

2.1.5. Tratadores de productos (Defluorinadores de propano y butano).

2.1.6. Sistema de neutralización de aceites solubles en ácido(ASAS).

## 2.2. ALQUILACIÓN CON ÁCIDOS LÍQUIDOS

Catalizadores comerciales. Los primeros pasos para llevar la alquilación de isoparafinas con olefinas fueron hechas en los años 30's. En 1933, Ipatieff y Grosse reportaron la alquilación de hexanos con eteno, usando cloruro de aluminio( $\text{AlCl}_3$ ) promovido por ácido clorhídrico(HCl) como catalizador, y fue utilizado como catalizador comercialmente en 1938. También fueron capaces de llevar a cabo la alquilación de isobutano, producto común de refinería, con eteno en presencia de  $\text{AlCl}_3$  a 60-70°C. Después de un tiempo, se descubrió que la alquilación de isoparafinas toma lugar a temperatura ambiente en presencia de exceso de ácido sulfúrico( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ).

Después de esos resultados, numerosos procesos y catalizadores fueron desarrollados, aunque solamente el ácido sulfúrico( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) y ácido fluorhídrico(HF) han sido comercialmente aplicados para la alquilación de isobutano con olefinas  $\text{C}_3\text{-C}_5$ ; la elección depende de las condiciones y requerimientos específicos.

FIG. 2.1.1. DIAGRAMA DE BLOQUES DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN

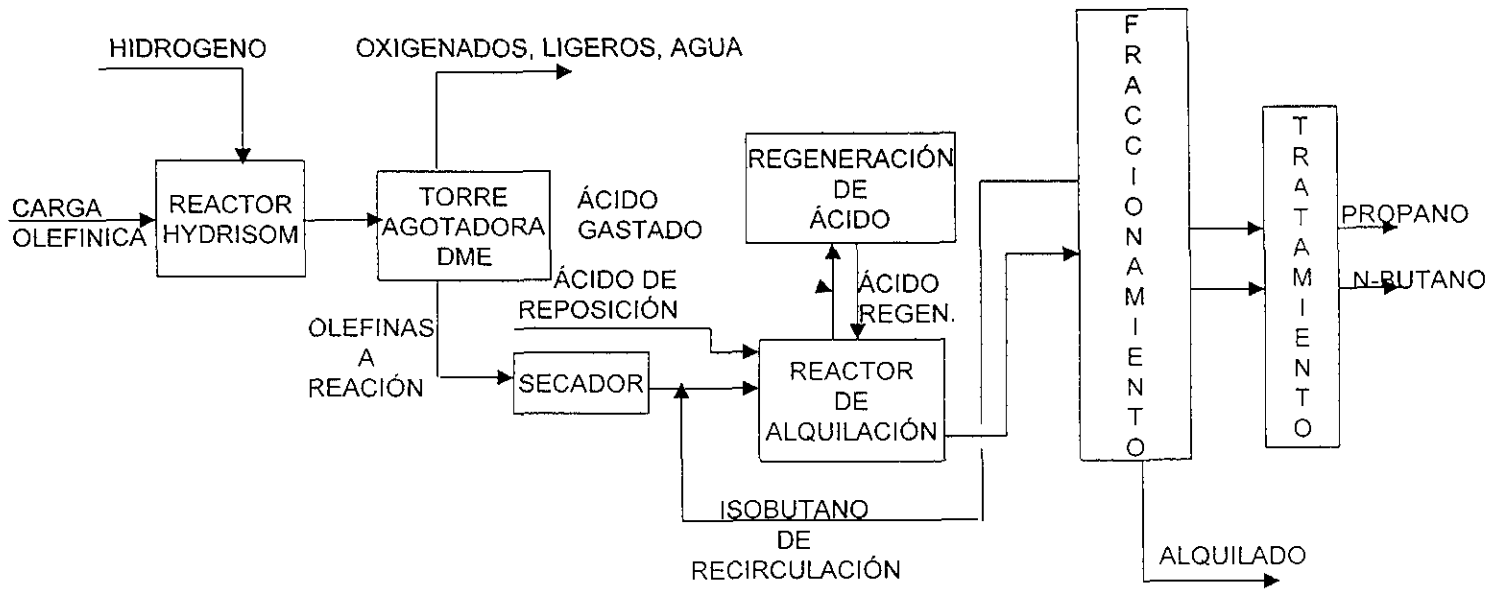
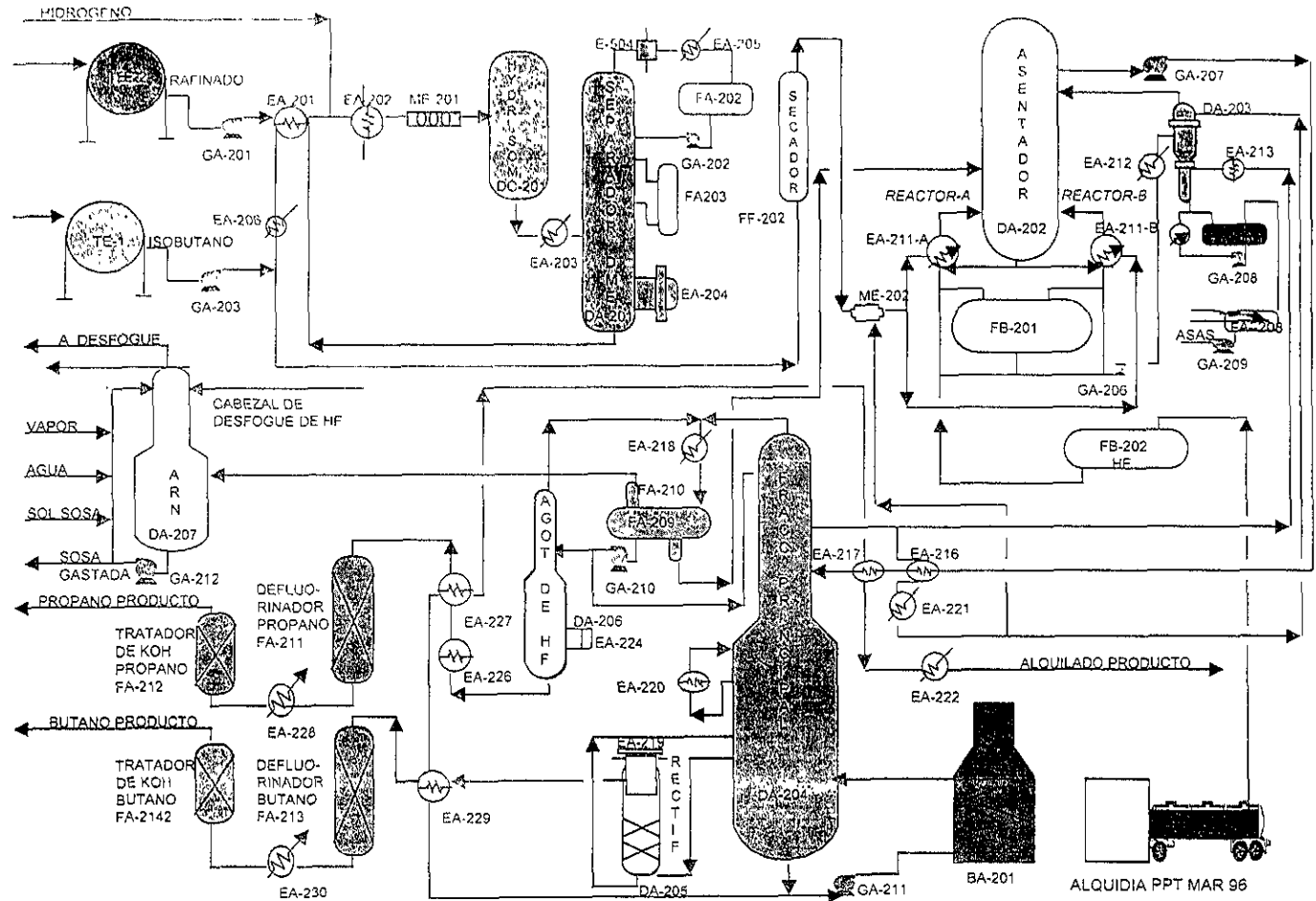


FIG. 2.1.2. DIAGRAMA SIMPLIFICADO PLANTA DE ALQUILACION



Las primeras unidades de alquilación construidas en los años 40's usaron  $H_2SO_4$  como catalizador. Sin embargo la necesidad por las altas cantidades de gasolina de aviación, durante la segunda guerra mundial, obligó al uso de un catalizador más activo; el HF que es el que se usa en las nuevas plantas de alquilación. Este catalizador propone a las refinerías la posibilidad de alimentar propileno y amilenos con los butilenos, para producir altas cantidades de gasolina de alta calidad.

Las propiedades más importantes de catalizadores ( $H_2SO_4$  y HF) están dadas en la Tabla 2.2 1, se consideran principalmente desde el punto de vista de alquilación la fuerza ácida y la solubilidad de hidrocarburos, especialmente el isobutano en el ácido. La facilidad de protonar las olefinas de alimentación depende de la acidez del catalizador, mientras que la concentración del ion carbonio formado es fuertemente dependiente de la solubilidad del isobutano el cual se transfiere a todo lo largo del reactor para reponer el isobutano que contenía inicialmente la fase ácida (HF).

TABLA 2.2.1

## Propiedades de catalizadores

Catalizador	HF	$H_2SO_4$
Peso molecular	20.01	98.08
Punto de ebullición (°C)	19.4	290
Punto de congelación (°C)	-82.8	10
98% ácido	-	3
Gravedad específica	0.99	1.84
Viscosidad (cP)	0.256 (0°C)	33 (15°C)
Tensión superficial (din/cm)	8.1 (27°C)	55 (20°C)
Calor específico (Btu/lb/°F)	0.83 (-1°C)	0.33 (20°C)
Acidez Hammet (-Ho) a 25°C	10.0	11.1
98% Ácido a 25°C	8.9	9.4
Constante dieléctrica	84 (0°C)	114 (20°C)
Solubilidad líquida (% peso)		
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> en 100% ácido a 27°C	2.7	-
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> en 99.5% ácido a 13°C	-	0.10
HF en i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> a 27°C	0.44	-
HF en C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> a 27°C	0.90	-

De la Tabla 2.2.1 se puede ver que el  $\text{H}_2\text{SO}_4$  tiene mayor acidez que el HF, sobre el rango comercial de concentraciones del ácido, como lo indica la función ácida Hammett. La fuerza ácida de ambos ácidos se reduce por la presencia de agua como se observa en la Figura 2.2.1.

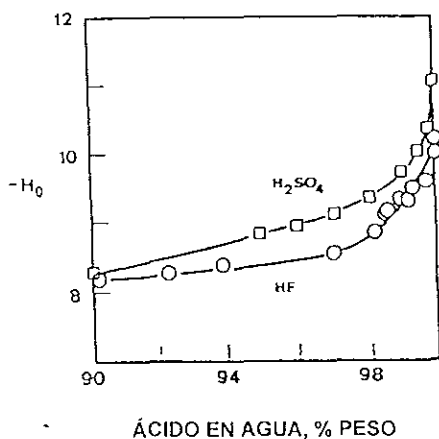


Figura 2.2.1. Función ácida Hammett,  $\text{H}_0$ , de ácidos  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , HF en  $\text{H}_2\text{O}$  a  $25^\circ\text{C}$

La dilución de un ácido con moléculas orgánicas también reduce su acidez, aunque mucho menos. Por otro lado, excesiva acidez promueve la formación de productos indeseables que vienen de las reacciones secundarias. Esto implica que, dependiendo de la olefina específica usada a las condiciones de reacción, se requiere una acidez óptima y por lo tanto una composición óptima del ácido requeridas.

La solubilidad del isobutano en ácido, así como la solubilidad del ácido en isobutano, es más alta para ácido fluorhídrico (HF) que para ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ). Esto disminuye la formación de productos indeseables proveniente de reacciones secundarias, tales como isomerización y polimerización; además de que al incrementar la concentración del isobutano en el ácido, el promedio de vida de los iones carbonio aumenta sobre la interface ácido-hidrocarburos, donde tienen lugar las reacciones de alquilación. Entonces, la concentración del isobutano debe ser lo suficientemente alta respecto del ácido, para que en las reacciones de transformación entre los iones octil carbonio e isobutano se vean favorecidas con HF, incrementar la selectividad de



los productos primarios, tales como 2,2,4-TMP(trimetilpentano), para tiempos cortos de contacto y bajas temperaturas de reacción.

Otra de las propiedades físicas importantes que afectan el sistema de reacción, es el punto de ebullición. El bajo punto de ebullición del HF permite la regeneración del HF gastado por destilación simple en la unidad de alquilación.

### 2.3. OBTENCION DEL PRODUCTO DESEADO

La alquilación catalítica de isobutano con olefinas ligeras, usualmente butenos, produce una mezcla compleja de hidrocarburos que contiene alrededor de 20% C<sub>5</sub> - C<sub>7</sub>, 60 -65% octanos, y 15 - 20% de componentes de muy alto peso molecular. La fracción C<sub>8</sub> esta principalmente formada por TMP's(trimetilpentanos) 80%, que son los productos más valiosos (isoparafinas) desde el punto de vista de octanos, el resto de los productos C<sub>8</sub> son principalmente DMH's(dimetilhexanos). La producción de alquilado depende de un manejo adecuado de las variables de reacción y lo que a su vez implica el entendimiento del mecanismo de reacción, para llevar la reacción directamente hacia la formación de componentes deseados, y así incrementar la calidad del alquilado.

En principio los productos primarios se obtienen de la adición directa de la olefina al grupo isoalquil, usualmente isobutano. Así, cuando el isobutano es alquilado con 1-buteno, 2-buteno, ó isobutileno, los productos primarios esperados son 2,3-DMH(dimetilhexano), 2,2,3-TMP(trimetilpentano), y 2,2,4-TMP(trimetilpentano), respectivamente.

En la tabla 2.3.1 se muestran los resultados de experimentos que se han llevado a cabo usando HF como catalizador a condiciones que favorecen los productos primarios (tiempos cortos de contacto 15 a 20 seg. y bajas temperaturas 20 a 38°C) y a condiciones que favorecen el equilibrio termodinámico (altas temperaturas mayores a 38°C y largos tiempos de contacto más de 20 seg.), donde el isobutano alquilado con 1-buteno forma 2,3-DMH(dimetilhexano) como producto primario; con 2-buteno, forma 2,2,4-, y 2,3,4-TMP's(trimetilpentanos) con cantidades iguales; y con isobuteno, forma 2,2,4-TMP(trimetilpentano). De otra manera, bajo condiciones que favorecen el equilibrio termodinámico, la cantidad del 2,4-DMH(dimetilhexano) se incrementa. Todos los resultados muestran que el nuevo arreglo de los iones alquil carbonio formados ocurre rápidamente, dejando diferentes isómeros de acuerdo con el mecanismo de reacción. Sin embargo no todos los productos formados durante la alquilación vienen de las reacciones primarias esperadas, en las cuales todas las olefinas y el isobutano son consumidos.

TABLA 2.3.1

Alquilación de isobutano con butenos a las condiciones que favorecen los productos primarios y el equilibrio termodinámico con ácido fluorhídrico(HF) como catalizador.

Olefina	Producto primario			Equilibrio termodinámico			
	1-Buteno	2-Buteno	Isobuteno	1-Buteno	2-Buteno	Isobuteno	Comp. Equilibrio
Temp. (°C)	-10	-10	-11	49	49	47	41
Tiempo Contacto(min)	5	5	5	250	250	259	
% Octanos							
2,2,4-TMP	14.0	38.9	74.8	32.5	37.0	39.7	29.6
2,4-DMH	5.2	4.5	8.4	43.6	33.9	31.5	56.8
2,3,4-TMP	21.3	39.1	16.8	12.0	11.9	17.8	4.5
2,3,3-TMP	-	14.2	-	-	8.3	5.0	3.4
2,3-DMH	59.5	3.3	-	11.9	8.9	6.0	5.7
C <sub>8</sub> en C <sub>5</sub> +alquilado(%peso)	63.1	80.4	64.5	39.2	35.7	41.2	

Reacciones secundarias que ocurren durante el proceso de alquilación son generalmente más lentas que las reacciones primarias. Albrigh encontró, que los butenos no están presentes en el producto después de 15 a 60 seg. de tiempo de residencia, el cual checa con el obtenido en la simulación efectuada de 16 seg. El número de octano es favorecido por el isómero 2,2,4-TMP(trimetilpentano), formado por adición directa de isobutano con isobuteno

Cuando el propileno es usado como olefina, aproximadamente el 50% vol. del alquilado es 2,3-DMP(dimetilpentano), siendo el total de DMP's(dimetilpentanos) 70% vol. del producto.

La Tabla 2.3.2 muestra la composición de los productos obtenidos en planta piloto, bajo condiciones dirigidas hacia la maximización de octano, con cargas puras de butilenos y en presencia de HF. Si se utiliza 1-buteno se obtienen productos menos valiosos DMH's(dimetilhexanos), esto es porque la isomerización de 1-buteno a 2-buteno procede muy lentamente en la etapa de preparación de la carga(reactor hydrisom). Mejor calidad de alquilado se obtiene al utilizar 2-buteno como olefina en la alimentación.

TABLA 2.3.2

Composición del producto(alquilado) de isobutano con olefinas individuales usando HF como catalizador

Componente, % peso	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	i-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -2	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -1
C <sub>5</sub> isopentano	1.0	0.5	0.3	1.0
C <sub>6</sub> ,s				
Dimetilbutanos	0.3	0.8	0.7	0.8
Metilpentanos	-	0.2	0.2	0.3
C <sub>7</sub> ,s				
2,3-Dimetilpentano	29.5	2.0	1.5	1.2
2,4-Dimetilpentano	14.3			
C <sub>8</sub> ,s				
2,2,4-Trimetilpentano	36.3	66.2	48.6	38.5
2,2,3-Trimetilpentano	-	-	1.9	0.9
2,3,4-Trimetilpentano	7.5	12.8	22.2	19.1
2,3,3-Trimetilpentano	4	7.1	12.9	9.7
Dimetilhexanos	3.2	3.4	6.9	22.1
C <sub>9</sub> + productos	3.7	5.3	4.1	5.7

## 2.4. INFLUENCIA DE LAS VARIABLES DE OPERACIÓN

Entre las variables de control que tienen que tomarse en cuenta para mejorar y optimizar la producción y calidad del producto minimizando los costos de operación están las siguientes

**2.4.1. Tipo y concentración del ácido.**

**2.4.2. Temperatura de reacción.**

**2.4.3. Relación isobutano/olefina.**

**2.4.4. Composición de la carga.**

**2.4.5. Calidad de la emulsión.**

**2.4.6. Tiempo de residencia.**

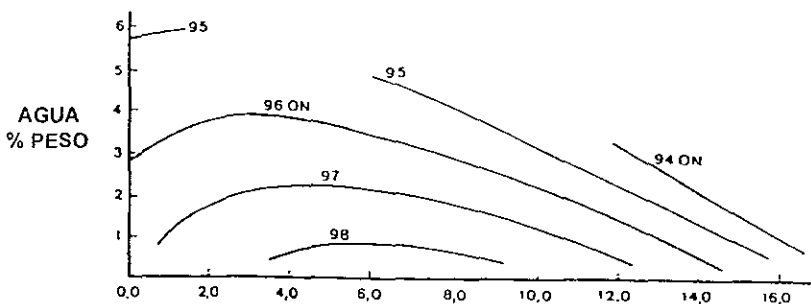
### 2.4.1. Tipo y concentración del ácido.

La composición del ácido no solamente afecta la calidad del alquilado, también influye en la cinética de las reacciones. Por lo tanto la composición óptima del ácido seleccionada dependerá de la carga de butilenos y condiciones de operación específicas. Por ejemplo cuando el isobutano es alquilado con 2-buteno usando HF, una composición de ácido de aprox. 5-6 % de hidrocarburos solubles en ácido y 0.5-1.0 % de agua nos da la mejor calidad de alquilado, como se muestra en la Figura 2.4.1.1.

Cuando se utiliza HF, la formación de hidrocarburos solubles en ácido durante la reacción y la presencia de agua en la fase ácida desactiva el catalizador. Por lo que en plantas con HF, la alimentación debe secarse antes de entrar a la sección de reacción. Además el ácido se diluye y consume grandemente como consecuencia de la alta temperatura y de la alta solubilidad de los hidrocarburos en la fase ácida.

Durante la alquilación se forman ésteres, polímeros conjugados y/o altamente complicados e insaturados. La mejor calidad y más alta producción de alquilado se obtiene a partir de butilenos con HF como catalizador de 83 a 92% peso de HF, y menos de 1% de agua, con el remanente de material orgánico

formado durante la alquilación. La mejor concentración es de 86 a 92 % peso de HF para alquilaciones comerciales.



#### ACEITE SOLUBLE EN ÁCIDO(ASA), % PESO

Fig. 2.4.1.1. Efecto de la composición del ácido fluorhídrico(HF) sobre el número de octano del alquilado<sup>7</sup>.

Los materiales orgánicos provocan en el ácido lo siguiente:

- \*\*Modifica la fuerza ácida y desde luego el efecto catalítico.
- \*\*Incrementa la solubilidad de los reactantes, particularmente isobutano.
- \*\*Sirve como agente de transferencia de hidrógeno en los pasos de reacción.

\*\*Actúa en la modificación de tensiones interfaciales y viscosidad así como el área interfacial entre las fases orgánica y ácida. Además, los coeficientes de transferencia de masa y calor entre las fases se incrementan.

Comercialmente el ácido es regenerado por destilación. Las pérdidas de ácido son muy bajas, aproximadamente de 0.2 a 0.8 lb/bl de alquilado producido, algunas pérdidas son mecánicas y algunas por disolución en corrientes de hidrocarburos. Impurezas como mercaptanos, sulfuros y diolefinas presentes en las cargas de alquilación tienen efecto sobre el consumo de ácido y por lo tanto en el producto.

### 2.4.2. Temperatura de reacción.

Las concentraciones en el equilibrio de los reactantes en la fase ácida cambian con la temperatura, la concentración de reactantes son indirectamente afectados por la temperatura puesto que todas las velocidades de transferencia de masa y cinéticas son afectadas por la temperatura, mientras que los tiempos de residencia y transferencia de masa son controlados hasta cierto punto.

Todas las constantes de velocidad de reacción, varían exponencialmente con la temperatura. Por lo tanto, se debe cuidar mucho esta variable, como ya se indicó, las reacciones químicas son rápidas; y con la temperatura baja se obtiene un producto de mejor calidad. Las temperaturas relativamente bajas, en procesos de HF, generalmente en el rango de 10 a 40 °C, implican el uso de agua de enfriamiento, disminuyendo los costos por refrigeración como en el proceso de ácido sulfúrico( $H_2SO_4$ ). Como tendencia general, se dice que la calidad del alquilado incrementa aproximadamente 1 octano por cada 11 °C de reducción en la temperatura de reacción. Como ejemplo, el RON(research octane number) de un alquilado producido en una unidad con ácido fluorhídrico(HF), cuando cargan una alimentación típica de butano-butilenos de una unidad catalítica(FCC) a varias temperaturas de reacción se muestra en la Figura 2.4.2.1

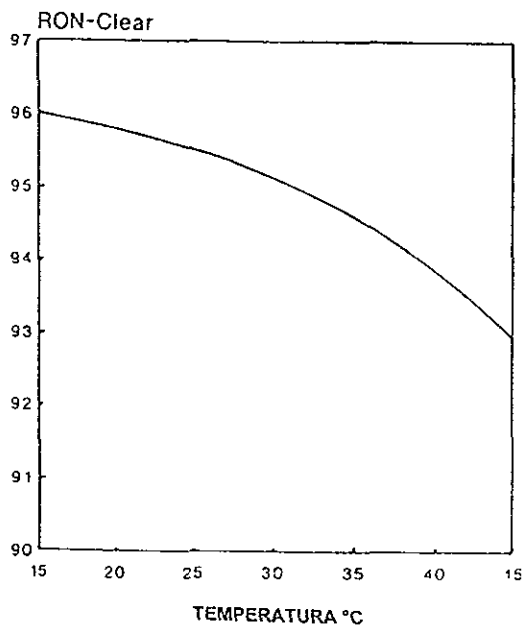


Fig. 2.4.2.1. Efecto de la temperatura del reactor sobre el octanaje RON(research octane number) del alquilado producido en una unidad de alquilación con ácido fluorhídrico(HF)

### 2.4.3. Relación isobutano/olefina.

Una relación alta de isobutano/olefinas en la zona de reacción incrementa la posibilidad para obtener el alquilado deseado. Puesto que las reacciones son rápidas el isobutano y olefinas reaccionan en una proporción de 1:1, y la relación en la fase orgánica es frecuentemente muy alta del orden de 100:1.

La relación isobutano/olefinas es una de las variables del proceso, con ella se controla tanto el consumo de ácido así como la producción y calidad del alquilado. Cuando se tienen altas relaciones isobutano/olefinas, las olefinas tienen una muy alta probabilidad de reaccionar con una molécula de isobutano para formar el producto deseado, minimizando las reacciones indeseables. Si la relación es baja, la producción de polímeros pesados aumenta el consumo de ácido. En la Figura 2.4.3.1 puede verse que un incremento en la relación isobutano/olefina produce una disminución en el consumo del ácido, incrementando la producción y calidad del alquilado. Las relaciones externas isobutano/olefina en unidades con HF son generalmente muy altas, frecuentemente en el rango de 10:1 a 15:1. La recirculación del isobutano separado en la fraccionadora principal a la zona de reacción incrementa la relación interna isobutano/olefina en la interface, reponiendo el isobutano que contenía inicialmente en la fase ácida.

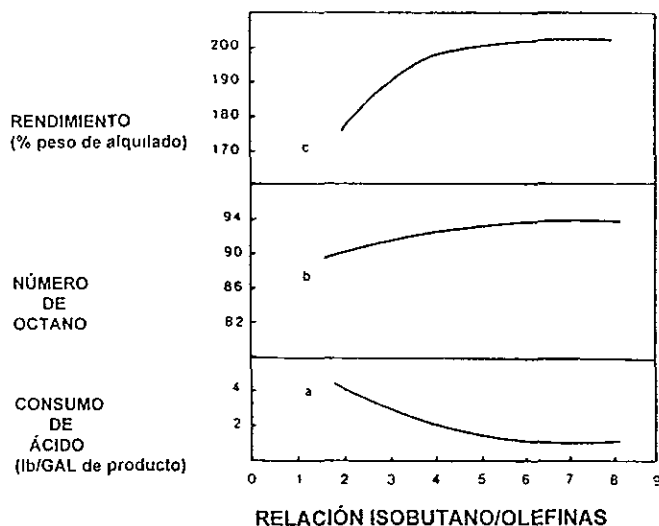


Fig. 2.4.3.1. Influencia de la relación isobutano/olefinas sobre: (a) consumo de ácido, (b) número de octano del alquilado, y (c) rendimiento de alquilado, usando ácido fluorhídrico (HF) como catalizador<sup>7</sup>.

La concentración de la olefina en la fase ácida debe ser mantenida a un nivel bajo para evitar reacciones de polimerización. Frecuentemente los efectos de la concentración de la olefina están correlacionados con el espacio-velocidad. El efecto de este parámetro sobre el octano del alquilado se ilustra en la Figura 2.4.3.2. Bajo espacio-velocidad en el reactor incrementa el octano y requiere mucho menos ácido, mientras que al incrementar el espacio-velocidad incrementa la formación de aceites solubles en ácido (ASAS).

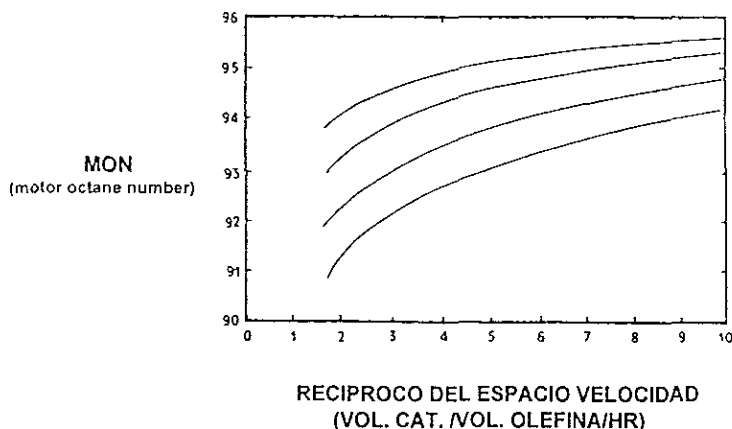


Fig. 2.4.3.2. Efecto del espacio-velocidad de la olefina sobre el número de octano del alquilado total de buteno (cada curva representa una concentración cte. de isobutano, concentración de ácido y temperatura de reacción)<sup>7</sup>.

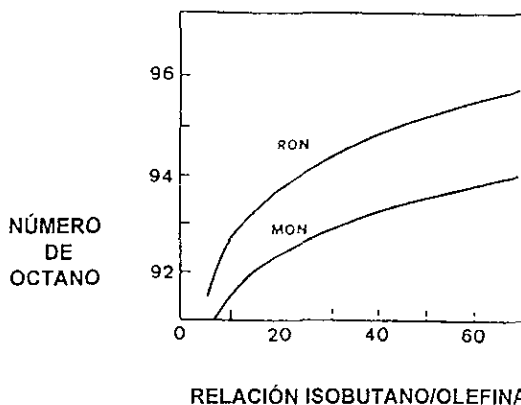


Fig. 2.4.3.3. Efecto de la relación isobutano/olefina sobre el número de octano (RON; research octane number; MON; motor octane number)<sup>7</sup>.



Las Figuras 2.4.3.3 y 2.4.3 4 muestran, que en una unidad de alquilación HF, el efecto de la relación isobutano/olefina sobre la calidad del alquilado y formación de aceites solubles en ácido (ASAS), respectivamente cuando se usa una alimentación de una mezcla de olefinas C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>.

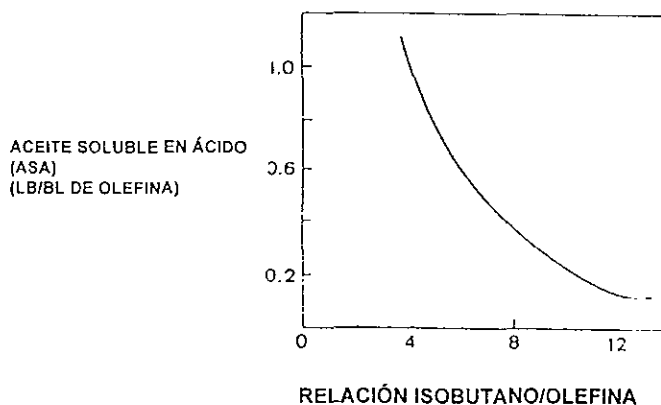


Fig. 2.4.3.4. Efecto de la relación isobutano/olefina sobre la formación de aceite soluble en ácido (ASA)<sup>7</sup>.

De esas figuras puede verse que el número de octano del alquilado incrementa y la formación de ASAS disminuye conforme la relación isoparafina/olefina se incrementa. Sin embargo, a relaciones altas isoparafina/olefina más isobutano tiene que ser separado y recirculado a la sección de reacción, lo cual incrementa los costos de separación.

#### 2.4.4. Composición de la carga.

Varios factores que modifican las reacciones que ocurren en él. En relación con la alimentación de olefinas al reactor, son:

\*\*La concentración de la fase orgánica normalmente está entre 50 y 80% de isobutano, ya que menos isobutano se disuelve en el n-butano presente en la carga. Por ejemplo, si la alimentación de isobutano contiene n-butano

apreciable, la cantidad de isobutano disuelto aumenta significativamente. La concentración del isobutano disuelto a las condiciones de equilibrio disminuye a través del reactor tubular.

**\*\*Tipo de olefina usada.** La calidad del alquilado depende de las olefinas individuales presentes y sus interacciones. La composición de la corriente de olefinas varía significativamente con la situación de la refinería. Usualmente, las unidades catalíticas (FCC) son las principales fuentes de olefinas para plantas de alquilación. En el presente, el riser (reactor elevador de planta catalítica FCC) se opera en condiciones muy severas debido a la alta demanda de gasolina; se destina una mayor cantidad de olefinas para la unidad de alquilación. La desviación de cada olefina individual como reactante para alquilación depende del tipo de catalizador usado. De acuerdo a esta situación, en una planta de alquilación que usa HF, el mejor funcionamiento es obtenido cuando los 2-butenos son alquilados con isobutano.

De otra manera, las diferentes cantidades de alquilado y consumo de ácido se obtienen cuando otras olefinas están presentes en la corriente. Un alto consumo de ácido fresco y más bajo octano en el alquilado resulta al utilizar propileno comparado con los butenos. Cuando los pentenos son adicionados, se consume una cantidad alta de ácido y el alquilado es de más baja calidad en comparación con la alimentación típica.

En el proceso de alquilación con HF el tipo de olefina cargada no tiene un real impacto en el consumo del ácido, y esta abajo de 0.05 Kg HF/bl de producto. Sin embargo, la naturaleza de la olefina tiene un claro impacto sobre la cantidad final del alquilado. En este proceso, la más alta calidad del alquilado se obtiene con 2-buteno. Con el 1-buteno se obtiene un alquilado de bajo octano, debido a que la isomerización a 2-buteno es lenta, produciendo cantidades más altas de dimetilhexanos indeseables, como puede verse en la Tabla 2.4.4.1. y la producción de alquilado con propileno es buena y de calidad. Sin embargo, grandes cantidades de propileno en la alimentación limitan, al obtenerse altas cantidades de propano, como consecuencia de las reacciones de transferencia de hidrógeno.

Las plantas de alquilación con HF ofrecen a las refinerías la posibilidad de maximizar el barril-octano procesando olefinas en el rango de  $C_3$ - $C_5$ , sujetos a la disponibilidad del isobutano.

**\*\*Influencia de las impurezas en la alimentación de hidrocarburos.** Usualmente las corrientes de isobutano y olefina usadas en alquilación van acompañadas con varias impurezas tales como: propileno, propano, n-butano y amilenos. El tipo y cantidad de tales contaminantes dependen de la fuente de hidrocarburos y severidad de las unidades, y usualmente tienen un efecto negativo sobre el consumo de ácido. Así, el butano normal actúa como diluyente

y reduce la concentración efectiva del isobutano. Este componente puede ser separado del isobutano por destilación; sin embargo, su costo debe ser considerado.

**TABLA 2.4.4.1**

**Alquilación de isobutano con diferentes olefinas en planta piloto con ácido fluorhídrico(HF)<sup>7</sup>.**

Tipo de olefina	Propileno	2-Buteno	1-Buteno	Mezcla
Composición alquilado (% peso)				
Isopentano	4.8	2.2	2.7	3.7
C <sub>6</sub> s ramificados	3.9	1.8	1.7	2.9
C <sub>7</sub> s ramificados	45.8	2.8	2.7	25.5
2,2,4-TMP(trimetilpentano)	21.7	49.0	39.7	35.6
Otros TMP: s(trimetilpentanos)	8.8	32.2	25.9	18.6
DMH: s(dimetilhexanos)	3.5	9.2	20.0	7.2
C <sub>9</sub> .	11.5	2.8	7.3	6.5
RON-clear	90.6	97+	94	93

La calidad de la carga a la planta de alquilación ha disminuido como una consecuencia del uso de más gasóleos pesados y muy altas temperaturas en el raiser(reactor elevador de planta catalítica FCC). Esto incrementa la producción de más diolefinas y más baja concentración de los isómeros deseados (2-butenos) en la corriente de alimentación. La presencia de diolefinas en la carga trae como consecuencia la obtención de un alquilado pesado de baja calidad, así como un incremento en el consumo de ácido.

En unidades de alquilación con HF, el mayor beneficio de una hidrogenación selectiva de la alimentación de olefinas se obtiene al isomerizar 1-buteno a 2-buteno al ser removidas las diolefinas, como ocurre en los procesos Universal Oil Products(UOP's) y Phillips Petroleum, en los cuales hay un consumo reducido de ácido, y se incrementa el octano del alquilado y, consecuentemente la producción. Sin embargo, cuando los amilenos son alimentados a las unidades de alquilación, una hidrogenación a las olefinas es de gran beneficio debido a su contenido de diolefinas(1%). Este tratamiento reduce la formación de hidrocarburos solubles en ácido, disminuyendo el consumo de ácido y regeneración del mismo.

El agua es un importante contaminante del ácido, ya que causa problemas de corrosión en la sección ácida de la unidad. La carga de alimentación a la zona de reacción de la unidad con HF tiene que estar bien seca para incrementar el funcionamiento de la planta. Para esto se utiliza sílica alumina, ó mallas moleculares como desecantes.

Componentes de azufre( $H_2S$ , mercaptanos, y sulfuro de carbonilo) están presentes generalmente en la alimentación a la planta de alquilación, y tienen un efecto negativo sobre el consumo de ácido, la producción, y la calidad del alquilado, así como también sobre la disposición del desperdicio. El pretratamiento de la alimentación para reducir el azufre es especialmente importante en la alquilación de amilenos, donde la cantidad de mercaptanos es de dos veces a la alimentación de propileno-butenos.

#### **2.4.5. Calidad de la emulsión.**

En los reactores de alquilación con HF que son de operación simple, como cambiadores de calor, las principales reacciones ocurren en ó cerca de la interface entre las fases Hidrocarburo-ácido, razón por la cual los efectos de transferencia de masa son importantes en la reacción de alquilación; en particular la transferencia del isobutano en la fase ácida es el paso controlante en la reacción de alquilación.

En sistemas a base de HF, el contacto íntimo entre la fase hidrocarburo y la emulsión ácida-continua, se lleva a cabo através de distribuidores especiales; por lo cual el mezclado mecánico no es necesario en este proceso.

#### **2.4.6. Tiempo de residencia.**

Las olefinas reaccionan en presencia de HF en cuestión de segundos. Cuando el isobutano disuelto esta presente en cantidades apreciables en la fase ácida, las reacciones de alquilación ocurren fácilmente. Cuando el isobutano esta presente en el ácido en pequeñas cantidades ó no está, las olefinas tienden a polimerizar y/o formar esteres con los ácidos. Por esta razón se prefieren tiempos de residencia cortos en reactores que operan con una relación alta de isobutano/olefinas en la fase ácida.

Los reactores tubulares son usados comercialmente para alquilación con HF; el flujo de la emulsión através del tubo se da en pocos segundos, y es

indispensable una condición turbulenta. El ácido debe estar saturado con isobutano inicialmente, como ocurre en unidades comerciales donde el isobutano disuelto en el ácido está en contacto a la salida con la fase hidrocarburo por un periodo significativo de tiempo hasta que la emulsión se rompa.

Suponiendo que la longitud del tubo es suficientemente grande, y que la fase ácida fue saturada con isobutano al salir del tubo, entonces las olefinas reaccionan 100%; lo cual se explica porque ahí hay una alta concentración de isobutano en la fase hidrocarburo a la entrada del tubo en comparación con la salida, la cual disminuye con el incremento de la distancia del tubo.

El tiempo real de contacto entre los hidrocarburos y la fase ácida afecta la reacción. Los trimetilpentanos deseados son lentamente degradados a hidrocarburos menos deseados. Es evidente que la calidad del alquilado mejora en poco menos del primer minuto de reacción.

## **CAPÍTULO 3**

### **DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN CON HE**

### 3.1. PROCESO DE ALQUILACIÓN CON HF USADO COMO CATALIZADOR

La alquilación de isobutano con olefinas ligeras para producir componentes de alto octano es un proceso empleado en las refinerías. En la presente descripción se considera un proceso de alquilación que usa ácido fluorhídrico(HF) como catalizador, y que fue diseñado con la licencia de Phillips Petroleum Co.

La versión reciente del proceso utiliza un reactor tubular para llevar a cabo la reacción, permitiendo la alquilación de isobutano con olefinas  $C_3$  a  $C_5$ .

La más reciente de las plantas usa un nuevo diseño del reactor y asentador, como se muestra en la Figura 3.1.1. El diseño básico consiste de un reactor tubular, asentador de ácido, línea de ácido de retorno y un enfriador de ácido.

En plantas grandes, el sistema consiste de más de una línea de retorno de ácido, enfriadores de ácido y asentadores de ácido. En algunos diseños más sencillos, un asentador de ácido opera para 2 reactores colocados en paralelo, como se muestra en la Figura 3.1.2. La recirculación de la fase ácida fluye a través de la concha del enfriador de ácido, que usa normalmente agua de enfriamiento para lograr la temperatura de reacción. La alimentación de isobutano y olefinas se inyecta directamente al ácido, por medio de un eductor localizado en la base del reactor tubular vertical. Así el flujo de alimentación a través del eductor crea un flujo del ácido del enfriador al reactor.

La forma de contacto de las fases hidrocarburo y olefinas es muy importante, puesto que de él depende el mezclado necesario para minimizar concentraciones locales de olefinas en la fase ácida y hacer más eficiente el proceso. Se logra un flujo turbulento con números de Reynolds mayores de 10000, con un tiempo de residencia en el reactor de 20 a 40 seg.

Esencialmente toda la reacción ocurre mientras la mezcla está en el reactor tubular. Relaciones volumétricas de HF a hidrocarburos de 1:1 a 4:1 se usan generalmente. En la instalación que se pretende modelar, el reactor no está enchaquetado(para enfriamiento); y la temperatura de reacción depende de: la relación de HF a hidrocarburos; la cantidad de HF recirculado; la relación de entrada de isobutano a olefinas; y la presencia de hidrocarburos inertes.

Dos termocoples (TE) y un controlador de diferencia de temperatura (Tdc) son utilizados para regular la cantidad de ácido recirculado, y desde luego la temperatura de reacción en el reactor.

FIG. 3.1.1 REACTOR-ASENTADOR DEL PROCESO PHILLIPS

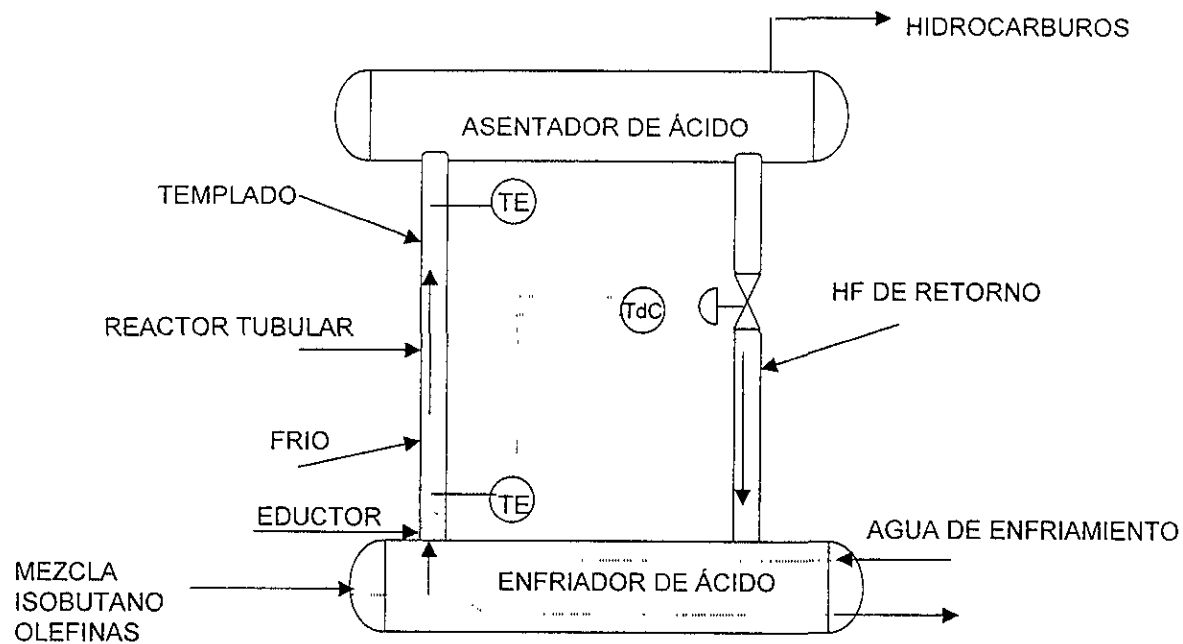
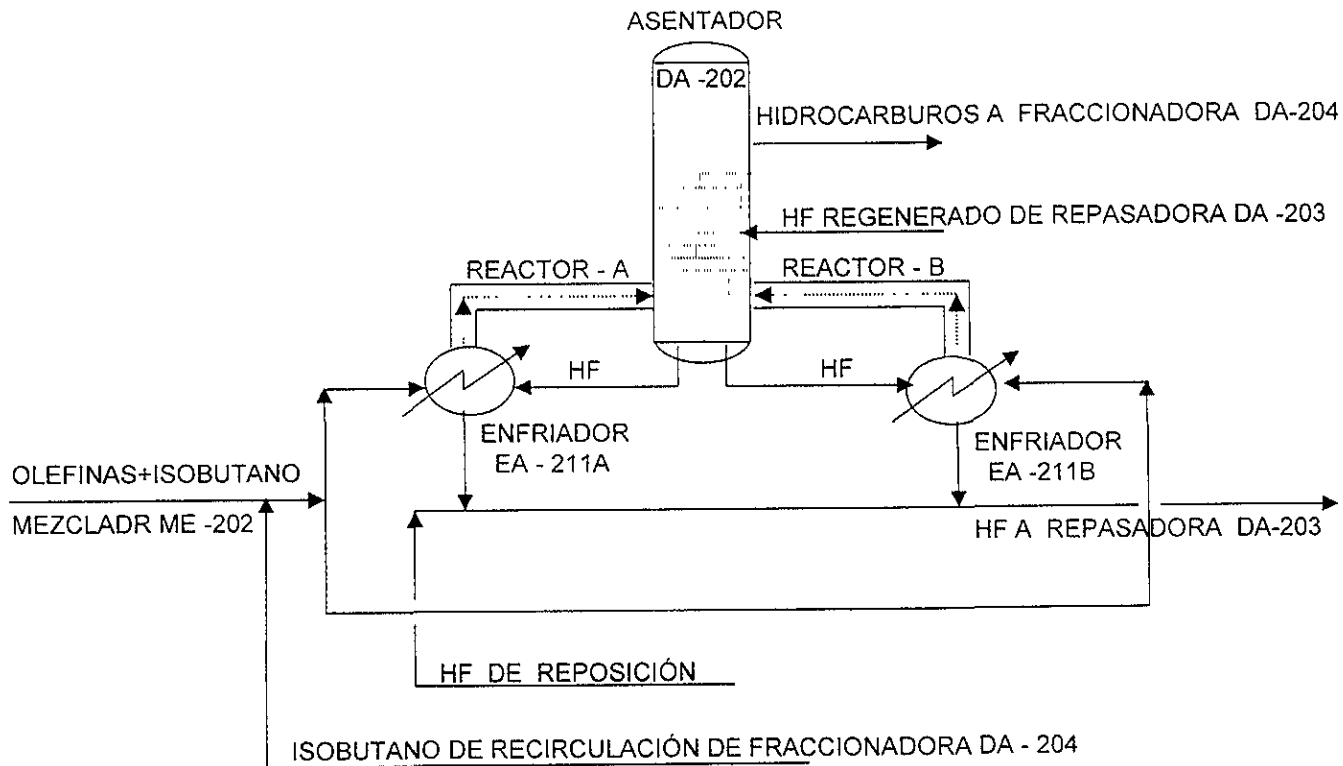




FIG. 3.1.2 ESQUEMA DE DOS REACTORES Y UN ASENTADOR SIMPLE



Una vez la emulsión sale del reactor se separa rápidamente en el asentador de ácido, para recircularse al enfriador de ácido, y una pequeña parte es alimentada al regenerador de ácido. La fase hidrocarburo del asentador de ácido es alimentada a la fraccionadora principal del proceso. Los hidrocarburos entran a la parte media de la columna; isobutano con HF disuelto es recirculado al reactor. El producto de fondos de la columna principal es esencialmente n-butano y alquilado como puede verse en la Figura 3.1.3.

El producto del domo es un azeótropo heterogéneo de propano y HF. La fase propano se utiliza como reflujo a la fraccionadora principal, y como alimentación al agotador de HF. El producto de fondo es principalmente propano, el cual se lava con potasa (KOH), para remover las trazas de HF. La fase ácida del condensador de reflujo se recircula al sistema de reacción.

### 3.2. ASPECTOS DE INGENIERÍA EN ALQUILACIÓN

Las principales reacciones que se presentan en alquilaciones comerciales ocurren en la fase ácida, por lo cual se consideran los siguientes factores

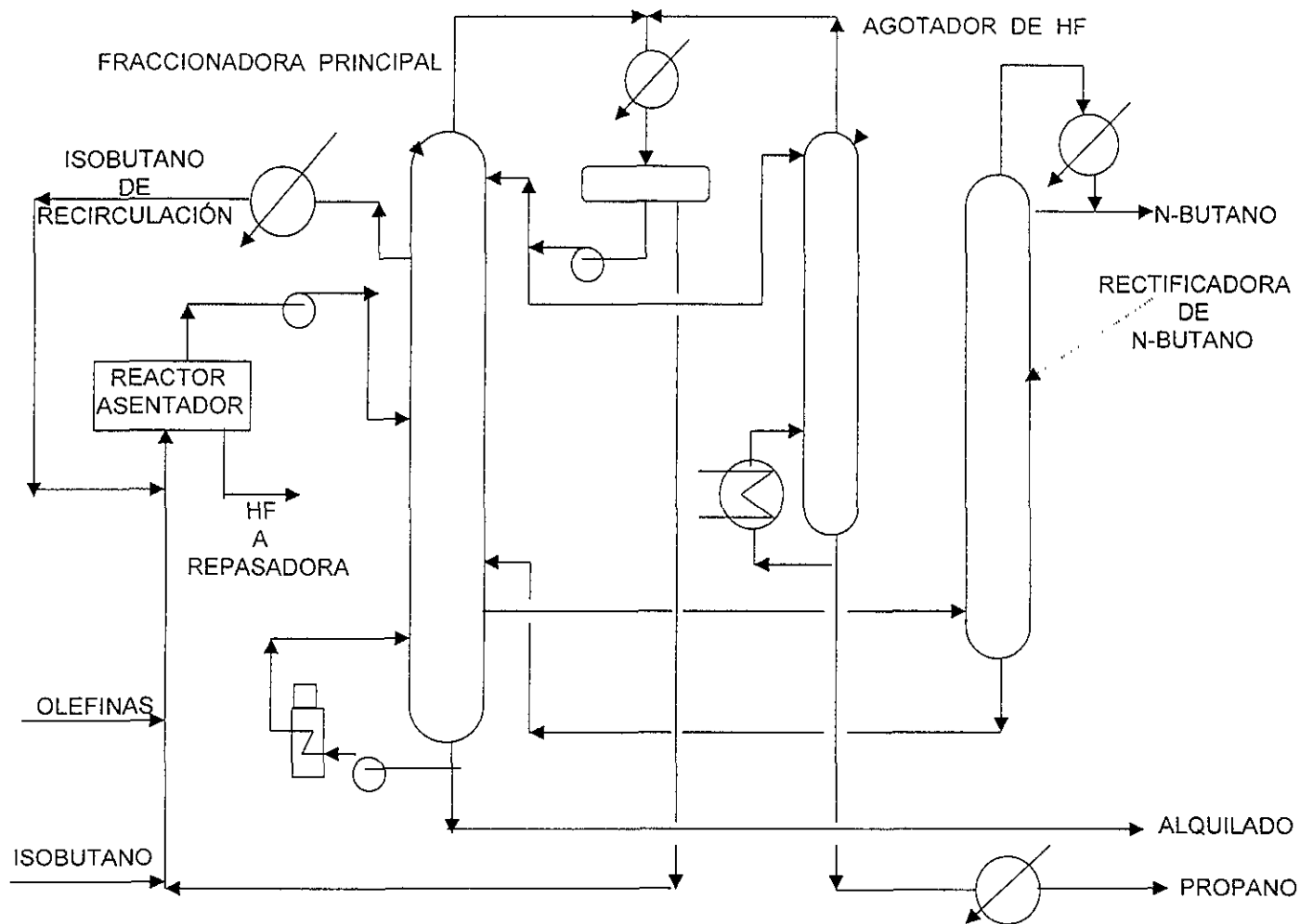
1. Transferencia de isobutano y olefinas desde la fase orgánica a la fase ácida.
2. Transferencia de los productos de alquilación y subproductos de la fase ácida a la fase orgánica.
3. Solubilidad de reactantes y productos en la fase ácida.
4. Porción orgánica en la fase ácida (acumulación de materiales orgánicos en la fase ácida).

### 3.3. TRANSFERENCIA DE MASA Y ECUACIONES CINÉTICAS

El proceso de alquilación se puede llevar a cabo en 2 etapas:

1. Difusión de los reactantes orgánicos(butilenos) a la interface.
2. Difusión y reacción química simultanea de los reactantes(butilenos) en la interfase.

FIG. 3.1.3 PROCESO DE ALQUILACIÓN CON ÁCIDO FLUORHIDRICO(HF) DISEÑO PHILLIPS



La resistencia a la transferencia de masa en la fase orgánica es despreciable, porque los reactantes son poco solubles en el ácido, y la difusividad de la fase orgánica es más grande en el HF. Las concentraciones de isobutano y butenos en la interfase se pueden considerar prácticamente igual a sus correspondientes solubilidades en el ácido.

La alquilación involucra difusión y reacción del isobutano y butilenos, con exceso de isobutano en la cual disminuye rápidamente la concentración de los butilenos a un tiempo de contacto corto, mientras que el isobutano continua difundiendo en la fase ácida.

En la fase ácida, el balance de materia para los reactantes principales: isobutano y/o butilenos.

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad neta de} \\ \text{transferencia de la} \\ \text{fase orgánica a la} \\ \text{fase ácida} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de reacción} \\ \text{de reactantes en la} \\ \text{fase ácida} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de acumulación} \\ \text{de reactantes en la fase} \\ \text{ácida} \end{array} \right]$$

En términos genéricos, el balance de materia para el reactante en un volumen diferencial  $dv$  en el reactor se representa como:

$$(K_L)_1 A (C^*_{R_1} - C_{R_1}) dv = K_a [f(C_{R_1}, C_{R_2})] dv + K_b [f^1(C_{R_1}, C_{R_2}, C_{OTROS})] dv + \dots +$$

$$K_n [f^2(C_{R_1}, C_{R_2}, C_{OTROS})] dv + \left( \frac{dC_{R_1}}{dt} \right) dv$$

donde

$K_L$  = coeficiente de transferencia de masa

$A$  = área interfacial entre las dos fases líquidas

$C^*_{R}$  = concentración en el equilibrio de butilenos en la fase ácida

$C_R$  = concentración de butilenos

$k_a, k_b, \dots, k_n$  = constantes de velocidad de reacción

El primer término del lado derecho de la ecuación representa la ecuación cinética para la reacción de alquilación entre isobutano y butilenos para formar alquilado(isooctano). Puesto que las concentraciones de todas las especies reactantes en la fase ácida,  $C_{OTROS}$ , se han incluido, sin duda se complica mucho más la resolución.

Los coeficientes promedio de transferencia de masa para isobutano y olefinas son muy similares en magnitud. Los valores de  $(C^*_{R1} - C_{R1})$  para isobutano y olefinas son diferentes.

En condiciones de estado pseudoestacionario, se pueden hacer las siguientes simplificaciones:

- 1) El término de acumulación es cero, ya que no hay variación respecto al tiempo.
- 2) La cantidad de butilenos disueltos en la fase ácida es constante(pseudo-estacionario).

Como regla general, la cantidad total de reactantes transferidos de la fase orgánica a la fase ácida es igual a la cantidad que reacciona en la fase ácida.

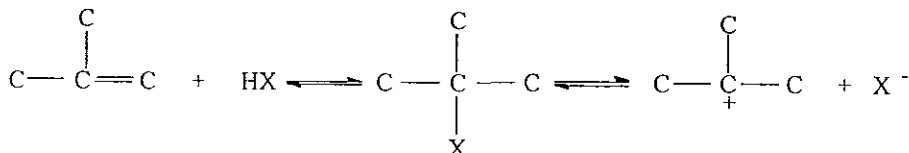
$$K_L A (C^*_{R1} - C_{R1}) = k_a f(C_{R1}, C_{R2})$$

### 3.4. MECANISMO DE REACCIÓN

La alquilación de isobutano con olefinas C<sub>3</sub>-C<sub>5</sub> involucra una serie de reacciones consecutivas y simultáneas que ocurren a través de carbocationes intermediarios. El mecanismo de ion carbonio propuesto por Whitmore ha sido sucesivamente aplicado para explicar las reacciones que ocurren durante el proceso de alquilación.

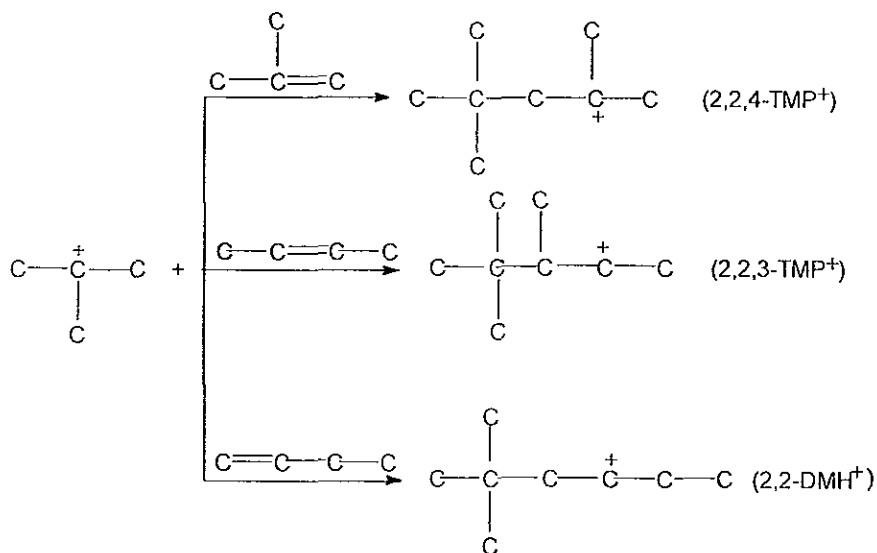
De acuerdo con esta idea, un esquema de reacción general para alquilación de buteno puede resumirse como sigue:

El primer paso es la adición de un protón a la olefina para formar un catión t-butil.



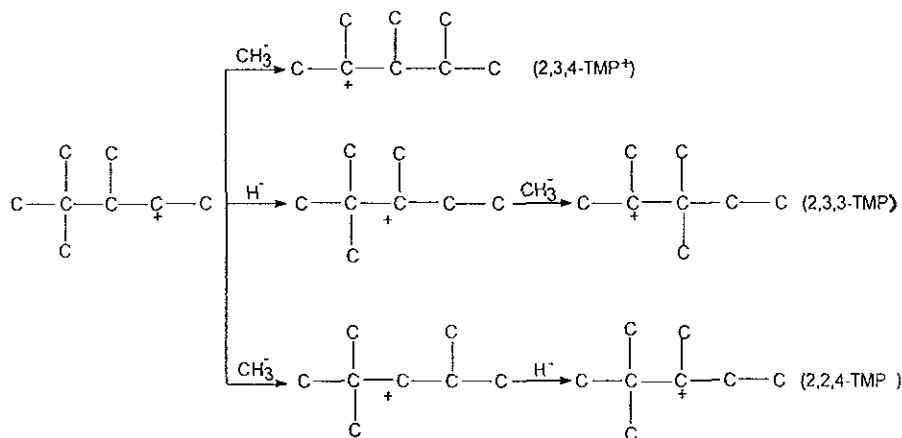
Las reacciones de iniciación son requeridas para generar un alto nivel de iones.

Segundo paso, el catión t-butil es adicionado a la olefina para dar los cationes  $C_8$  correspondientes:



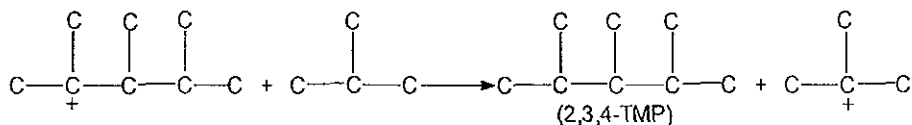
Estos carbocationes  $C_8$  ramificados se desorben con las correspondientes isoparafinas (productos primarios), por un proceso de transferencia de hidrógeno de una molécula nueva de isobutano.

**Tercer paso. Los iones carbonio  $C_8$  formados se isomerizan por cambios vía hidrógeno y metil para formar iones carbonio más estables:**



Los cuales después de saturarse se forman los isómeros 2,3,4-, 2,3,3-, y 2,2,4-TMP's (trimetilpentanos) observados cuando el isobutano es alquilado con 2-buteno.

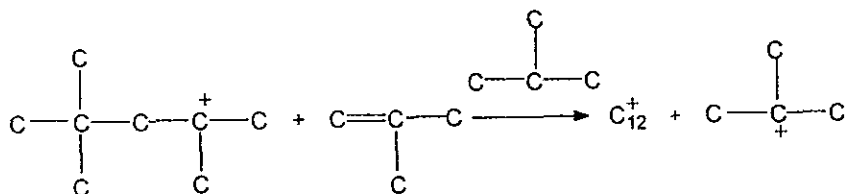
**Cuarto paso. Esos iones carbonio sufren rápida transferencia de hidrogeno del isobutano, en la dirección de los diferentes isómeros y regenerando el catión t-butilo para continuar la secuencia de la cadena.**



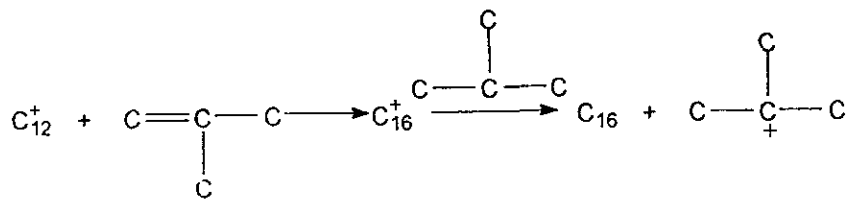


Desafortunadamente, esas no son las únicas reacciones que ocurren durante la alquilación; hay reacciones secundarias que, en general tienden a reducir la calidad del alquilado. Esas reacciones incluyen: polimerización, desproporción, y auto-alquilación.

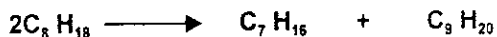
a) **Polimerización** Resulta de la adición de una segunda olefina al carbocatión formado en la reacción primaria, como en el segundo paso del mecanismo:



El  $\text{C}_{12}^+$  puede continuar reaccionando con una olefina para formar un catión isoalquil más grande.



b) **Desproporción** Causa la desaparición de 2 moléculas de alquilado para dar una isoparafina de bajo peso molecular y otra de alto peso molecular comparada con la inicial.



c) **Auto-alquilación:** Esta reacción sucede por la formación de trimetilpentanos al ser alquilado el isobutano con otras olefinas que no son butenos.

Las reacciones de Auto-alquilación son particularmente importantes cuando se utiliza HF como catalizador. Por ejemplo, en la alquilación de isobutano con propileno y HF, aproximadamente el 20% de la olefina es convertida a propano por este mecanismo. Esto se explica en términos de la alta solubilidad del isobutano, con respecto a los butenos.

## 4.1. CONDICIONES PRINCIPALES Y MODELOS EMPLEADOS

A continuación se describen los modelos empleados en la simulación del reactor de la planta de alquilación de butilenos empleando el simulador ASPEN.

### 4.1.1. COMPONENTES DE LA CARGA A REACCIÓN

La carga a tratar en el reactor de alquilación es una mezcla de isobutano y olefinas y se hace en presencia de ácido fluorhídrico como catalizador. Dicha mezcla está básicamente constituida por los siguientes componentes: ácido fluorhídrico, propano, isobutano, isobuteno, 1-buteno, 2c-buteno, 2t-buteno, y n-butano. Todos estos componentes están disponibles en el banco de datos del simulador Aspen Plus.

### 4.1.2. MODELOS DE OPERACIONES UNITARIAS EMPLEADOS

Los modelos empleados en la simulación para representar los equipos del proceso de la sección de reacción se muestran en la tabla 4.1.2.1.

Tabla 4.1.2.1

Modelos de las operaciones unitarias utilizados en la simulación

EQUIPO	MODELO	ESPECIFICACIONES
MIXER	MEZCLADOR DE CORRIENTES ME-202	$\Delta P=0$ , fase que maneja
HEATER	ENFRIADOR EA-211A	Tsalida, Psalida, o $\Delta P$
HEATER	ENFRIADOR EA-211B	Tsalida, Psalida, o $\Delta P$
RPLUG	REACTOR A	Longitud, diámetro, reacciones y cinética
RPLUG	REACTOR B	Longitud, diámetro, reacciones y cinética
FSPLIT	DIVISOR DE CORRIENTES DHF	Flujo que circula por las n-1 corrientes de salida
SEPARADOR	ASENTADOR DA-202	T, P, y flujos de los componentes de una de las corrientes de salida

### 4.1.3. CALCULO DE PROPIEDADES

El modelo termodinámico que se utilizó para el cálculo de propiedades consiste en la ecuación NRTL que representa una extensión aceptada del concepto de WILSON<sup>10</sup>. La cual se aplica a sistemas multicomponentes líq-vapor, líq-líq y líq-líq-vapor. Y por lo tanto, ya que el sistema en cuestión es un proceso de transferencia-reacción en fase líquida, la ecuación NRTL predice bien las propiedades de dicho sistema.

Partiendo de la ecuación de la fracción en volumen local, pero expresando la composición en función de las fracciones molares en vez de fracciones en volumen, para la especie  $i$  en una celda líquida ocupada por una molécula  $i$  en el centro

$$x_{ji} = \frac{x_j \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji})}{\sum_{k=1}^c x_k \exp(-\alpha_{ki} \tau_{ki})}$$

donde

$x_{ji}$  = fracción molar de la pareja  $ji$

$\alpha_{ji}$  = parámetro ajustable de la pareja  $ji$

$\tau_{ji}$  = parámetro de interacción binaria  $ji$

Para una pareja binaria  $ij$ ,  $\tau_{ji}$  y  $\tau_{ij}$  son parámetros ajustables, y  $\alpha_{ji} = \alpha_{ij}$  es un tercer parámetro que puede ser ajustado.

Si se consideran las interacciones de dos moléculas la energía de exceso se expresa:

$$\frac{g^E}{RT} = \sum_{i=1}^c X_i \left( \sum_{j=1}^c X_j \tau_{ji} \right)$$

donde

$g^E$  = energía de Gibbs en exceso por mol

$R$  = constante universal de los gases

$T$  = temperatura en °F

La expresión para el coeficiente de actividad

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^c (\tau_{ji} G_{ji} x_j)}{\sum_{k=1}^c (G_{ki} x_k)} + \sum_{j=1}^c \left[ \frac{(x_j G_{ij})}{\sum_{k=1}^c (G_{kj} x_k)} \left( \tau_{ij} - \frac{\sum_{k=1}^c (x_k \tau_{kj} G_{kj})}{\sum_{k=1}^c (G_{kj} x_k)} \right) \right]$$

Donde el parámetro de interacción  $G_{ji}$  se define por la ecuación

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ij}\tau_{ji})$$

Los coeficientes  $\tau$  vienen dados por

$$\tau_{ij} = \frac{(g_{ij} - g_{jj})}{RT} \quad \tau_{ji} = \frac{(g_{ji} - g_{jj})}{RT}$$

donde:  $g_{ij}$ ,  $g_{jj}$  son energías de interacción entre parejas de moléculas  $G_{ji} \neq G_{ij}$ ,  $\tau_{ij} \neq \tau_{ji}$ ,  $G_{ii} = G_{jj} = 1$  y  $\tau_{ii} = \tau_{jj} = 0$ , con frecuencia  $(g_{ij} - g_{jj})$  y las demás constantes varían linealmente con la temperatura.

El parámetro  $\alpha_{ij}$  caracteriza la tendencia de la especie  $j$  y la especie  $i$  a no distribuirse al azar. Es decir cuando  $\alpha_{ji} = 0$  las fracciones molares locales son iguales a las fracciones molares de la solución global.

Generalmente  $\alpha_{ij}$  es independiente de la temperatura y depende de las propiedades moleculares. Los valores de  $\alpha_{ji}$  están generalmente comprendidos entre 0.2 y 0.47. Cuando  $\alpha_{ji} < 0.426$  predice inmiscibilidad de las fases.

Aunque  $\alpha_{ij}$  puede tratarse como un parámetro ajustable que se determina a partir de datos experimentales de la pareja binaria.

En general la exactitud de la ecuación NRTL es bastante buena, por eso se le escogió como modelo termodinámico para la simulación en el presente trabajo.

## 4.2. MODELO PROPUESTO PARA EL REACTOR DE ALQUILACIÓN

Como se trata de un proceso simultaneo de transferencia de masa y reacción, se tienen 2 suposiciones al respecto:

1. La concentración del isobutano en la fase ácida se supone independiente de la composición de la fase orgánica e igual al 70% de la solubilidad del isobutano.
2. La concentración de olefinas en el ácido es directamente proporcional a la concentración en la alimentación.

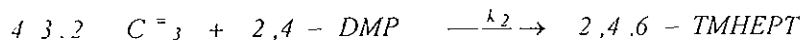
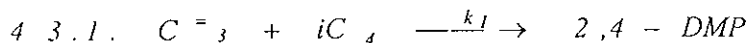
La primera suposición implica que la resistencia a la transferencia de masa para el isobutano en la fase ácida es despreciable y la segunda suposición considera la concentración de las olefinas prácticamente cero después de un minuto de reacción, considerando que las reacciones son rápidas.

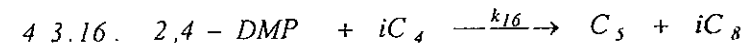
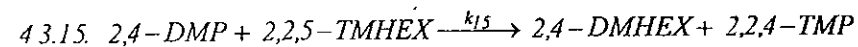
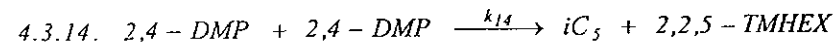
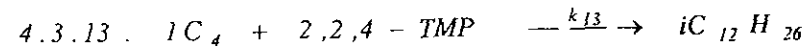
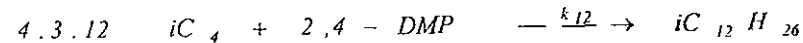
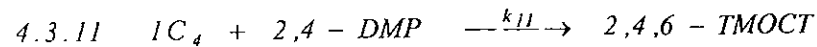
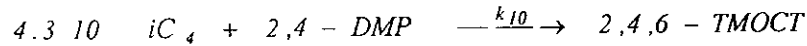
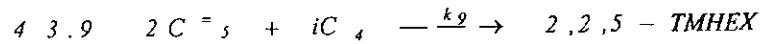
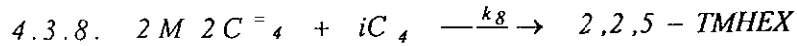
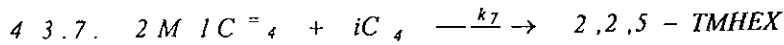
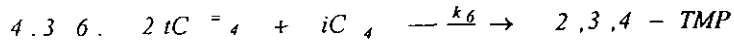
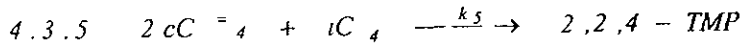
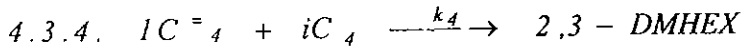
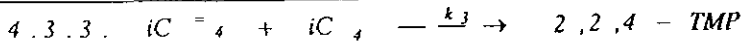
El isobutano es soluble en HF, y la alquilación tiene lugar en la fase ácida rápidamente y no en la fase orgánica, ya que la solubilidad del ácido en la fase hidrocarburo es mucho más baja. De acuerdo con las reacciones que ocurren, los reactantes orgánicos deben difundirse en la fase ácida. Puesto que las solubilidades y las difusividades de los reactantes en la fase ácida son pequeños y las velocidades de reacción química son rápidas, el proceso de alquilación se caracteriza por la transferencia de masa y reacción química simultaneas.

Respecto a lo anterior y al mecanismo global aparente de reacción presentado y lo reportado en la literatura se puede definir las reacciones más importantes, como aquellas que producen el alquilado, estas reacciones son la conivación de isobutano con olefinas en presencia de HF como catalizador.

El alquilado es esencialmente dimetilhexanos y trimetilpentanos. A continuación se describen las reacciones más importantes para el modelo del reactor:

### 4.3. REACCIONES DE ALQUILACIÓN MÁS IMPORTANTES







#### 4.4. EXPRESIONES DE VELOCIDAD DE REACCIÓN

Como se puede ver, se trata de un sistema de reacciones complejo y para simplificar su análisis, se optó por utilizar expresiones de velocidad de reacción del tipo "ley de potencias", como lo recomienda Satterfiel<sup>13</sup>. Para tomar en cuenta la dependencia con la temperatura se acostumbra utilizar relaciones del tipo Arrhenius. Por lo tanto, la expresión general de la velocidad de reacción que se utilizaron fueron de la forma:

$$-r = k_0 e^{-E/RT} C_A^a C_B^b$$

Donde  $k_0$  se toma independiente de la temperatura y área superficial del catalizador. La función de las concentraciones la cual usualmente es mucho más fácil de usar en correlaciones de datos de velocidad, consiste de funciones simples de ley de potencias:  $C_A^a C_B^b$ , donde  $a$  y  $b$  son constantes empíricas.

Esta ecuación es un ejemplo de velocidad de ley de potencias. Para ser usada,  $k_0$  y  $E$  deben ser funciones solamente del catalizador y del sistema reaccionante, y no de la temperatura ó concentración.

Aplicando dicho modelo de ley de potencias al sistema de reacciones en el que se consideró una dependencia de primer orden respecto de la concentración de reactivos, y de segundo orden gloval se tienen las siguientes expresiones de velocidad de reacción:

Para Propileno ( $C^3, S$ )

$$R_{C^3} = -k_1 C_{C^3} C_{iC_4} - k_2 C_{2,4-DMP}$$

Para Butilenos ( $C^=4's$ )

$$R_{iC^=4} = -k_3 C_{iC^=4} C_{iC_4} - k_{10} C_{iC^=4} C_{2,4-DMP} - k_{12} C_{iC^=4} C_{2,2,4-TMP}$$

$$R_{iC^=4} = -k_4 C_{iC^=4} C_{iC_4} - k_{11} C_{2,4-DMP} C_{iC_4}^2 - k_{13} C_{iC^=4} C_{2,2,4-TMP}$$

$$R_{2cC^=4} = -k_5 C_{2cC^=4} C_{iC_4}$$

$$R_{2iC^=4} = -k_6 C_{2iC^=4} C_{iC_4}$$

Para Pentenos ( $C^=5's$ )

$$R_{2cC^=5} = -k_9 C_{2cC^=5} C_{iC_4}$$

$$R_{2MIC^=4} = -k_7 C_{2MIC^=4} C_{iC_4}$$

$$R_{2MC^=4} = -k_8 C_{2MC^=4} C_{iC_4}$$

Para el Alquilado (2,4-DMP)

$$R_{2,4-DMP} = -k_{14} C_{2,4-DMP}^2 - k_{15} C_{2,4-DMP} C_{2,2,5-TMHEX} - k_{16} C_{2,4-DMP} C_{iC_4}$$

---

*Para Isobutano*

$$R_{iC_4} = -(R_1 + R_3 + R_4 + R_5 + R_6 + R_7 + R_8 + R_9 + R_{16})$$

A continuación se dan los datos de las constantes cinéticas por volumen del reactor y que se ajustaron de acuerdo con el modelo desarrollado por Langley<sup>16</sup> para la alquilación de propileno con isobutano. Se tomo la cinética para reacciones de segundo orden.

$$k_1/v = 4.0645 \text{ mol}^{-1} \text{ seg}^{-1}$$

$$k_2/v = 4.5726 \text{ mol}^{-1} \text{ seg}^{-1}$$

$$k_3/v = 5.0806 \text{ mol}^{-1} \text{ seg}^{-1}$$

$$k_4/v = 5.0806 \text{ mol}^{-1} \text{ seg}^{-1}$$

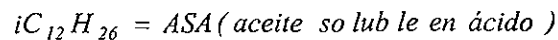
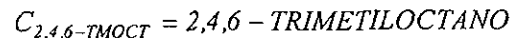
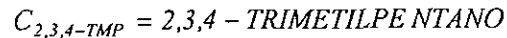
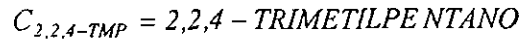
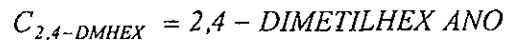
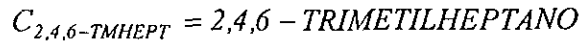
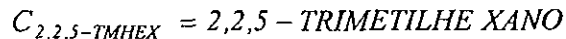
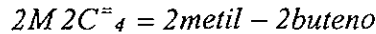
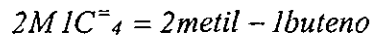
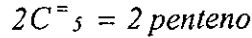
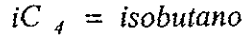
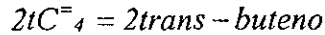
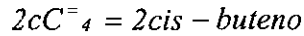
$$k_5/v = 0.203 \text{ mol}^{-1} \text{ seg}^{-1}$$

donde

$C^=3 = \text{propileno}$

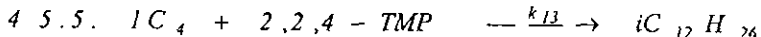
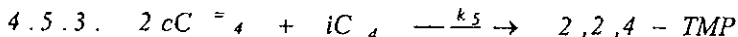
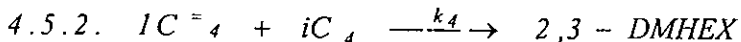
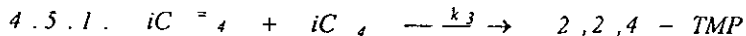
$iC^=4 = \text{isobuteno}$

$1C^=4 = 1\text{-buteno}$



#### 4.5. MODELO DEL SISTEMA DE REACCIÓN

Para simplificar aun más el modelo antes expuesto, de las 16 reacciones únicamente se tomarán en cuenta las reacciones que involucran las olefinas, que producen el alquilado, y una reacción que produce los aceites solubles en ácido (ASAS).



De acuerdo con lo antes expuesto, la ecuación general de conservación de masa en la fase ácida para un componente  $i$  que reacciona es de la forma:

$$\frac{dc}{dz} = \frac{K_L a_v}{V} (C_{i^*} - C_i) + \frac{R_i}{V}$$

donde

$K_L$  = coeficiente de transferencia de masa

$a_v$  = área interfacial

$C_i^*$  = concentración del componente  $i$  en el equilibrio

$C_i$  = concentración del componente  $i$

$R_i$  = velocidad de reacción del componente  $i$

Este modelo es empleado únicamente para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, y no para correr la simulación, se aplica únicamente para el isobutano por ser el reactivo en exceso y más soluble en el ácido(HF) comparado con las olefinas, para correr la simulación se toma el modelo simple de ley de potencias, entonces las ecuaciones quedan de la siguiente manera:

Los perfiles obtenidos para el isobutano, olefinas, dimetilhexano, trimetilpentanos y ASA(aceite soluble en ácido) se anexan en el apéndice 1

*Balance de isobutano :*

$$\frac{dq_{C_4}}{dz} = -\frac{1}{V} \left( k_1 C_{iC_4} C_{iC_4} + k_2 C_{iC_4} C_{1C_4} + k_3 C_{iC_4} C_{2C_4} + k_4 C_{iC_4} C_{2C_4} \right) - \frac{1}{V} \left( -K_L a_v C_{iC_4}^* - K_L a_v C_{iC_4} \right)$$

*Balance de isobuteno :*

$$\frac{dC_{iC=4}}{dz} = -k_1 C_{iC_4} C_{iC=4}$$

*Balance de 1-buteno :*

$$\frac{dC_{1C=4}}{dz} = -k_2 C_{iC_4} C_{1C=4} - k_5 C_{1C=4} C_{C_{224-TMP}}$$

*Balance de 2c y 2t-butenos :*

$$\frac{dC_{2cC=4}}{dz} = -k_3 C_{iC_4} C_{2cC=4}$$

$$\frac{dC_{2tC=4}}{dz} = -k_3 C_{iC_4} C_{2tC=4}$$

*Balance de 2,2,4 – TMP :*

$$\frac{dC_{2,2,4-TMP}}{dz} = k_1 C_{iC_4} C_{iC=4} + k_3 C_{iC_4} C_{2cC=4} - k_5 C_{iC=4} C_{2,2,4-TMP}$$

*Balance de 2,3 – DMHEX :*

$$\frac{dC_{2,3-DMHEX}}{dz} = k_2 C_{iC=4} C_{iC_4}$$

*Balance de 2,3,4 – TMP :*

$$\frac{dC_{2,3,4-TMP}}{dz} = k_4 C_{iC_4} C_{2iC=4}$$



*Balance de ASA (  $iC_{12}H_{26}$  ) :*

$$\frac{dC_{iC_{12}H_{26}}}{dz} = k_5 C_{1C=4} C_{2,2,4-TMP}$$

#### 4.6. DATOS DE LAS CORRIENTES

Las corrientes que están involucradas en el esquema de simulación son las siguientes:

4.6.1. Carga de isobutano y olefinas tratada en la sección Hydrisom

4.6.2. Isobutano de recirculación proveniente de la fraccionadora principal

4.6.3. Corriente de ácido fluorhídrico del la fraccionadora principal

4.6.4. Corriente de ácido fluorhídrico de la torre repasadora de ácido

A estas corrientes se les proporciona como datos flujo de cada uno de los componentes de la mezcla y una combinación de dos de las siguientes variables Temperatura, Presión ó fase.

#### 4.7. METODOS DE CONVERGENCIA

El simulador Aspen Plus emplea métodos de convergencia de las corrientes de los diagramas de flujo que deben resolverse iterativamente, por lo que se requiere un estimado inicial, y en algunas ocasiones una secuencia de cálculo.

Tales métodos son los siguientes:

4.7.1. Wegstein es descrito como "bounded wegstein"

4.7.2. Directo es descrito como de sustitución directa

4.7.3. Broyden el cual se describe como Broyden cuasi-Newton

En esta parte del trabajo se efectuara el análisis de las corrientes del esquema de simulación del reactor de alquilación, Figuras 5.1 y 5.2 Comparándose los resultados obtenidos en aspen con los datos de diseño, así como también la comparación de los resultados por aspen al introducir datos puntuales(reales) de planta respecto de los datos de diseño.

Como podemos ver en las Tablas de resultados 5.1, 5.2 y de acuerdo a los esquemas(Figuras 5.1 y 5.2), las corrientes 6,7,8 y 9, corresponden a las entradas y salidas de los dos reactores de alquilación, y representan los puntos primordiales de comparación.

En primera instancia se comparan los datos calculados con el simulador aspen con los datos de diseño, por lo que respecta a la distribución de los flujos de las corrientes de carga 6 Y 7 a los reactores A y B se tienen pequeñas diferencias, sin embargo el punto de comparación sé tiene en la cantidad de olefinas, esto es debido a que en el diseño reportan cantidad total y para la simulación se tomo en cuenta el análisis cromatografico de la corriente de carga, pero en flujo total no hay diferencia.

También se ve que las condiciones de operación son consistentes, esto es debido a que se introducen los datos de diseño, donde se notan diferencias es en las propiedades de mezcla, debido a que sé esta manejando un sistema complejo de multicomponentes.

Respecto a las corrientes 8 Y 9 de salida de los reactores, las olefinas alcanzan una conversión al 100%, lo cual confirma que después de 16 segundos de tiempo de residencia obtenido de la simulación ya no quedan olefinas por reaccionar, tal como la literatura menciona, el consumo de olefinas es en el primer minuto de reacción, esto puede verse también en los perfiles de concentración obtenidos al resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en el apéndice 1 donde se nota claramente que las olefinas reaccionan rápidamente en los primeros 7 metros de longitud del reactor.

Por lo que respecta a la cantidad de alquilado, el desempeño es bueno; las cantidades obtenidas de los componentes deseados son similares.

Otro resultado importante es la cantidad de asas, por aspen se obtiene 61 Kg más, lo cual representa una cantidad considerable respecto al diseño, y que por ser un producto indeseable empeoraría su manejo.

En la corriente 13 de hidrocarburos del asentador a la fraccionadora principal, el distingo que podemos apreciar es la cantidad de asas que sé arrastra, y tendrá que ser separado con el alquilado. Una explicación puede ser que aspen no tiene un modelo de asentador tal como el del diseño del proceso, y puesto que la separación se lleva a cabo efectuada por diferencia de

densidad, para correr la simulación en aspen se eligió como modelo un separador que no representa adecuadamente el proceso de separación que se tiene, en el cual se especifican las condiciones y flujos de los componentes a separar.

Por lo que respecta a las demás corrientes del esquema, todos los datos obtenidos muestran una buena aproximación, lo cual demuestra que el modelo es consistente

Para todas las corrientes involucradas en el esquema de simulación se trazarán gráficas de comparación (ver Figura 5.3) las cuales se anexan para cada corriente, verificando con ello que el simulador Aspen es capaz de reproducir los datos de diseño con buena precisión.

El otro análisis que se hizo fue tomando como base la información tomada de la planta en operación, para correr la simulación se alimentarán datos puntuales de planta, flujos, presiones, temperaturas, y el análisis cromatográfico de la corriente de carga a reacción.

La Tabla 5.2 muestra los resultados obtenidos en aspen al utilizar la dicha información de planta, donde claramente se notan diferencias, básicamente en los flujos másicos de todos los componentes manejados. La carga real es más alta, la diferencia esta en que los flujos son más altos, principalmente en componentes indeseables tal como el propano y n-butano, este ultimo perjudica la relación isobutano/olefinas ya que el n-butano disuelve considerablemente al isobutano, por lo tanto el direccionamiento de las reacciones es hacia los productos secundarios. En tanto que el propano satura los equipos.

El flujo de olefinas es menor y la temperatura también es baja, esto mejora la producción y calidad del alquilado, ya que, por un lado el tener menor cantidad de olefinas, la relación isobutano/olefinas aumenta produciendo más alquilado, y al tener menor temperatura el índice de octano alcanzado es mayor. Esto no se observa en la cantidad de alquilado obtenido respecto al diseño corriente 10 de la Tabla 5.2, se tiene un déficit de aproximadamente 2000 kg/hr, debido a lo que ya se mencionó: la presencia de propano y n-butano contribuyen a la baja producción de alquilado.

Para ver más claramente la diferencia, se trazaron las gráficas correspondientes a las corrientes del esquema de simulación, Figura 5.4 ahí se puede corroborar que al utilizar los datos puntuales de planta siempre se tendrá diferencias, ya que la carga siempre será diferente en composición, cantidad de olefinas y pureza del isobutano, estas características que dependen de la disponibilidad y calidad de las cargas manejadas en la refinería, por lo que ante cualquier variabilidad es necesario ajustar las condiciones de operación lo más cercano posible a las de diseño, que es nuestro principal punto de comparación;

---

además, la garantía en producción y calidad de alquilado se da sobre la base de las condiciones de diseño.

Es importante recalcar que la carga de butilenos es el refinado de la planta MTBE(metil- terbutil-eter) y dicha carga dependerá en gran medida de lo eficiente del tratamiento que se tenga en el reactor hydrisom, antes de alimentarse a la sección de reacción, con la finalidad de que la carga tenga la menor cantidad de impurezas que impida el funcionamiento adecuado del proceso.

La realización de la simulación del reactor de alquilación, se debe tomar como punto de partida para la estructuración de un modelo más robusto, capaz de representar el proceso más fielmente, y llevarlo a cabo a régimen dinámico, para lograr el mejoramiento y optimización del mismo, con el planteamiento de la función objetivo adecuada que traigan beneficios tales como; el comportamiento del proceso en los arranques y paros de planta, minimizar el consumo de energía y/o maximizar producción de alquilado.

FIG. 5.1 DIAGRAMA DE FLUJO REACTOR - ASENTADOR(DISEÑO)

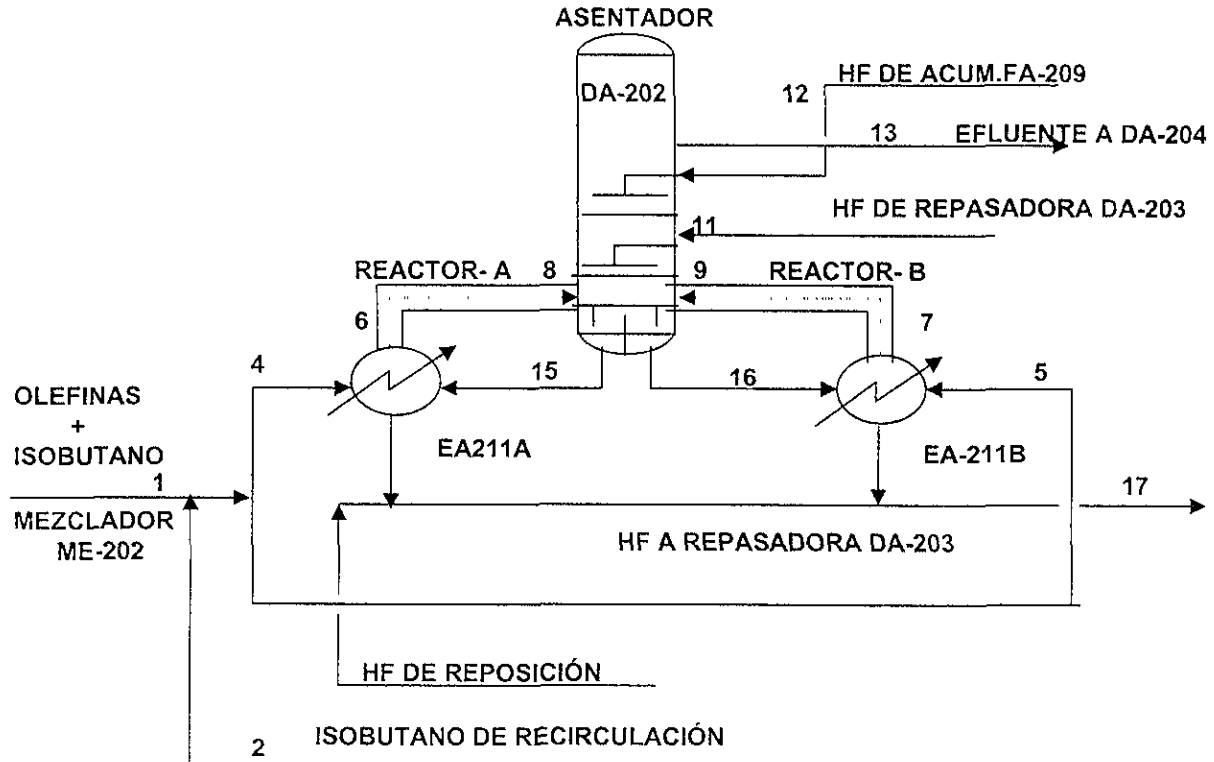


FIG. 5.2 SECCION DE REACCION

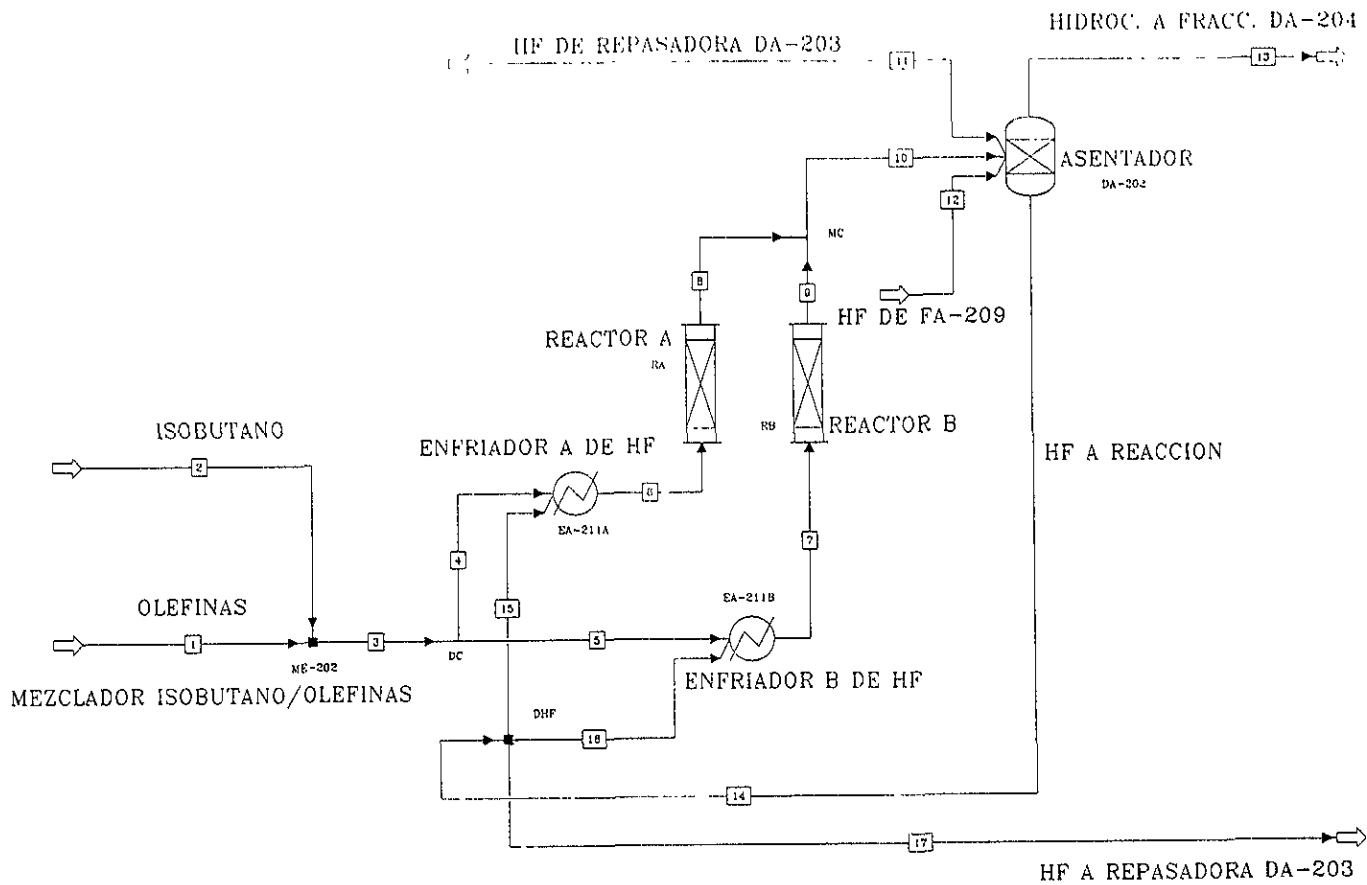


TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	3 ASPEN PLUS	3 DISEÑO	% ERROR
ALIMENTACION			
ISOBUTANO/OLEFINAS			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	239.500000	239.500000	0.000000
PROPANO	3510.500000	3510.500000	0.000000
ISOBUTENO	1421.000000	1421.000000	0.000000
1-BUTENO	1244.000000	1244.000000	0.000000
2C-BUTENO	1776.000000	1776.000000	0.000000
2T-BUTENO	3368.000000	3368.000000	0.000000
ISOBUTANO	85998.700000	85998.700000	0.000000
N-BUTANO	16026.300000	16026.300000	
2,3-DIMETILHEXANO	26.800000	26.800000	
2,3,4-TRIMETILPENTANO	451.700000	451.700000	0.000000
2,2,4-TRIMETILPENTANO	451.700000	451.700000	0.000000
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	0.000000	0.000000	
AGUA	0.000000	0.000000	
FLUJO TOTAL KMOL/HR	1994.220000	1997.490000	
FLUJO TOTAL KG/HR	1.145140E+05	1.145140E+05	
FLUJO TOTAL PIE /HR	210.971700		
TEMPERATURA °C	37.797610	37.800000	0.006323
PREISION BAR	13.530000	13.190000	-2.577710
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-33.815190		
ENTALPIA KCAL/KG	-588.878500		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-67.435910		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-101.331300		
ENTROPIA CAL/GM-K	-1.764644		
DENSIDAD KMOL/CUM	9.452547		
DENSIDAD KG/CUM	542.794100	542.455000	-0.062512
PESO MOLECULAR PROM.	57.423050	57.329000	-0.164053
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.703000	0.618900	-13.588625
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.079938	0.080900	1.189370
VISC MEZCLA cP	0.145748	0.135400	-7.642245



TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	4 ASPEN PLUS	4 DISEÑO	% ERROR
ALIMENTACION			
AL ENFRIADOR EA-211A			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	119.750000	119.800000	0.041736
PROPANO	1755.250000	1755.300000	0.002849
ISOBUTENO	710.499900	710.499900	0.000000
1-BUTENO	621.999900	621.999900	0.000000
2C-BUTENO	888.000000	888.000000	0.000000
2T-BUTENO	1684.000000	1684.000000	0.000000
ISOBUTANO	42999.350000	42999.350000	0.000000
N-BUTANO	8013.150000	8013.200000	0.000624
2,3-DIMETILHEXANO	13.400000	13.900000	3.597122
2,3,4-TRIMETILPENTANO	225.850000	225.600000	-0.110816
2,2,4-TRIMETILPENTANO	225.850000	225.600000	-0.110816
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	0.000000	0.000000	
AGUA	0.000000	0.000000	
FLUJO TOTAL KMOL/HR	997.110000	998.750000	0.164205
FLUJO TOTAL KG/HR	57257.090000	57257.100000	0.000017
FLUJO TOTAL PIE /HR	105.485800		
TEMPERATURA °C	37.797610	37.800000	0.006323
PRESION BAR	13.530000	13.190000	-2.577710
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-33.815190		
ENTALPIA KCAL/KG	-588.878500		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-33.717950		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-101.331300		
ENTROPIA CAL/GM-K	-1.764644		
DENSIDAD KMOL/CUM	9.452547		
DENSIDAD KG/CUM	542.794100	542.455000	-0.062512
PESO MOLECULAR PROM.	57.423050	57.329000	-0.164053
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.703000	0.618900	-13.588625
K(cond.mez ) KCAL-M/HR	0.079938	0.080900	1.189370
VISC MEZCLA cP	0.145748	0.135400	-7.642245

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	5 ASPEN PLUS	5 DISEÑO	% ERROR
ALIMENTACIÓN			
AL ENFRIADOR EA-211B			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	119.750000	119.800000	0.041736
PROPANO	1755.250000	1755.300000	0.002849
ISOBUTENO	710.499900	710.499900	0.000000
1-BUTENO	621.999900	621.999900	0.000000
2C-BUTENO	888.000000	888.000000	0.000000
2T-BUTENO	1684.000000	1684.000000	0.000000
ISOBUTANO	42999.350000	42999.350000	0.000000
N-BUTANO	8013.150000	8013.200000	0.000624
2,3-DIMETILHEXANO	13.400000	13.900000	3.597122
2,3,4-TRIMETILPENTANO	225.850000	225.600000	-0.110816
2,2,4-TRIMETILPENTANO	225.850000	225.600000	-0.110816
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	0.000000	0.000000	
AGUA	0.000000	0.000000	
FLUJO TOTAL KMOL/HR	997.110000	998.750000	0.164205
FLUJO TOTAL KG/HR	57257.090000	57257.100000	0.000017
FLUJO TOTAL PIE /HR	105.485800		
TEMPERATURA °C	37.797610	37.800000	0.006323
PRESION BAR	13.530000	13.190000	-2.577710
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-33.815190		
ENTALPIA KCAL/KG	-588.878500		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-33.717950		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-101.331300		
ENTROPIA CAL/GM-K	-1.764644		
DENSIDAD KMOL/CUM	9.452547		
DENSIDAD KG/CUM	542.794100	542.455000	-0.062512
PESO MOLECULAR PROM	57.423050	57.329000	-0.164053
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.703000	0.618900	-13.588625
K(cond.mez ) KCAL-M/HR	0.079938	0.080900	1.189370
VISC. MEZCLA cP	0.145748	0.135400	-7.642245

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	6 ASPEN PLUS	6 DISEÑO	% ERROR
CARGA AL REACTOR			
RA			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	3.457820E+05	3.466722E+05	2.567844E-01
PROPANO	2567.857000	2570.000000	8.338521E-02
ISOBUTENO	710.499900	976.125000	2.721220E+01
1-BUTENO	621.999900	976.125000	3.627866E+01
2C-BUTENO	888.000000	976.125000	9.028045E+00
2T-BUTENO	1684.000000	976.125000	-7.251889E+01
ISOBUTANO	53972.980000	54001.300000	5.244318E-02
N-BUTANO	9941.084000	9946.100000	5.043183E-02
2,3-DIMETILHEXANO	79.928640	80.000000	8.920000E-02
2,3,4-TRIMETILPENTANO	699.629600	700.850000	1.741314E-01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	699.629600	700.850000	1.741314E-01
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	15335.800000	15375.300000	2.569056E-01
AGUA	7667.850000	7687.600000	2.569072E-01
FLUJO TOTAL KMOL/HR	19039.670000	18052.860000	-5.466225E+00
FLUJO TOTAL KG/HR	4.406510E+05	4.416386E+05	2.236218E-01
FLUJO TOTAL PIE /HR	502.926500		
TEMPERATURA °C	37.800010	37.800000	-2.645503E-05
PRESION BAR	13.190000	13.190000	0.000000E+00
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-65.082990		
ENTALPIA KCAL/KG	-2812.109000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-1239.177000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-13.239160		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.572038		
DENSIDAD KMOL/CUM	37.857760		
DENSIDAD KG/CUM	876.173900	890.274000	1.583793E+00
PESO MOLECULAR PROM.	23.143840	21.292000	-8.697351E+00
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.480000	0.675600	2.895204E+01
K(cond.mez ) KCAL-M/HR	0.170037	0.257950	3.408153E+01
VISC. MEZCLA cP	0.191369	0.155000	-2.346413E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	7 ASPEN PLUS	7 DISEÑO	% ERROR
CARGA AL REACTOR			
RB			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	3.466720E+05	3.466722E+05	5.769142E-05
PROPANO	2569.950000	2570.000000	1.945563E-03
ISOBUTENO	710.499900	976.125000	3.738566E+01
1-BUTENO	621.999900	976.125000	5.693330E+01
2C-BUTENO	888.000000	976.125000	9.923986E+00
2T-BUTENO	1684.000000	976.125000	-4.203533E+01
ISOBUTANO	54001.250000	54001.300000	9.259045E-05
N-BUTANO	9946.049000	9946.100000	5.127664E-04
2,3-DIMETILHEXANO	80.099990	80.000000	-1.248315E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	700.849900	700.850000	1.426839E-05
2,2,4-TRIMETILPENTANO	700.849900	700.850000	1.426839E-05
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	15375.300000	15375.300000	0.000000E+00
AGUA	7687.600000	7687.600000	0.000000E+00
FLUJO TOTAL KMOL/HR	19086.140000	18052.860000	-5.413771E+00
FLUJO TOTAL KG/HR	4.416390E+05	4.416386E+05	-9.057171E-05
FLUJO TOTAL PIE /HR	504.009400		
TEMPERATURA °C	37.800010	37.800000	-2.645502E-05
PRESION BAR	13.190000	13.190000	0.000000E+00
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-65.087200		
ENTALPIA KCAL/KG	-2812.851000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-1242.282000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-13.228020		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.571671		
DENSIDAD KMOL/CUM	37.868630		
DENSIDAD KG/CUM	876.250600	890.274000	1.600387E+00
PESO MOLECULAR PROM.	23.139230	21.292000	-7.983109E+00
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.480000	0.675600	4.075000E+01
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.170137	0.257950	5.161320E+01
VISC. MEZCLA cP	0.191376	0.155000	-1.900778E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	8 ASPEN PLUS	8 DISEÑO	% ERROR
SALIDA DEL REACTOR			
RA			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	3.457820E+05	3.466722E+05	2.567844E-01
PROPANO	2567.857000	2570.000000	8.338521E-02
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	49921.030000	49968.700000	9.539972E-02
N-BUTANO	9941.084000	9946.100000	5.043183E-02
2,3-DIMETILHEXANO	1359.582000	1360.000000	3.073529E-02
2,3,4-TRIMETILPENTANO	4128.748000	4023.550000	-2.614557E+00
2,2,4-TRIMETILPENTANO	3912.623000	4023.550000	2.756943E+00
ASA(AC SOLUBLE EN HF)	15397.830000	15387.000000	-7.038409E-02
AGUA	7667.850000	7687.600000	2.569072E-01
FLUJO TOTAL KMOL/HR	18970.080000	18984.600000	7.648304E-02
FLUJO TOTAL KG/HR	4.406780E+05	4.416387E+05	2.175308E-01
FLUJO TOTAL PIE /HR	498.844100		
TEMPERATURA °C	37.800010	41.500000	8.915639E+00
PRESION BAR	13.190000	9.330000	-4.137192E+01
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-65.386580		
ENTALPIA KCAL/KG	-2814.726000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-1240.407000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-13.416580		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.577550		
DENSIDAD KMOL/CUM	38.028070		
DENSIDAD KG/CUM	883.399000	880.309000	-3.510131E-01
PESO MOLECULAR PROM.	23.230180	23.263000	1.410824E-01
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.450000	0.672200	3.305564E+01
K(cond.mez ) KCAL-M/HR	0.170403	0.352400	5.164492E+01
VISC. MEZCLA cP	0.192284	0.154000	-2.485968E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	9 ASPEN PLUS	9 DISEÑO	% ERROR
SALIDA DEL REACTOR			
RB			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	3.466720E+05	3.466722E+05	5.769139E-05
PROPANO	2569.950000	2570.000000	1.945525E-03
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	49950.000000	49968.700000	3.742343E-02
N-BUTANO	9946.049000	9946.100000	5.127638E-04
2,3-DIMETILHEXANO	1358.365000	1360.000000	1.202206E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	4129.969000	4023.550000	-2.644903E+00
2,2,4-TRIMETILPENTANO	3913.803000	4023.550000	2.727616E+00
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	15437.400000	15387.000000	-3.275492E-01
AGUA	7687.600000	7687.600000	0.000000E+00
FLUJO TOTAL KMOL/HR	19016.550000	18984.600000	-1.682943E-01
FLUJO TOTAL KG/HR	4.416650E+05	4.416387E+05	-5.955094E-03
FLUJO TOTAL PIE /HR	499.927500		
TEMPERATURA °C	37.800010	41.500000	8.915639E+00
PRESION BAR	13.190000	9.330000	-4.137192E+01
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-65.390050		
ENTALPIA KCAL/KG	-2815.466000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-1243.511000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-13.404930		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.577169		
DENSIDAD KMOL/CUM	38.038620		
DENSIDAD KG/CUM	883.458500	880.309000	-3.577721E-01
PEÑO MOLECULAR PROM.	23.225310	23.263000	1.620169E-01
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.450000	0.672200	3.305564E+01
K(cond.mez) KCAL-M/HR	0.170504	0.352400	5.161649E+01
VISC MEZCLA cP	0.192289	0.154000	-2.486273E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	10 ASPEN PLUS	10 DISEÑO	% ERROR
EFLUENTE TOTAL			
DE REACTORES			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	6.924540E+05	6.933444E+05	1.285862E-01
PROPANO	5137.807000	5139.900000	4.073723E-02
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	99871.030000	99937.300000	6.635558E-02
N-BUTANO	19887.130000	19892.200000	2.549387E-02
2,3-DIMETILHEXANO	2717.947000	2800.000000	3.018933E+00
2,3,4-TRIMETILPENTANO	8258.717000	8007.050000	-3.047289E+00
2,2,4-TRIMETILPENTANO	7826.426000	8007.050000	2.307873E+00
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	30835.230000	30774.100000	-1.982473E-01
AGUA	15355.450000	15375.300000	1.292701E-01
FLUJO TOTAL KMOL/HR	37986.640000	37969.190000	-4.593720E-02
FLUJO TOTAL KG/HR	8.823440E+05	8.832773E+05	1.057751E-01
FLUJO TOTAL PIE /HR	998.772000		
TEMPERATURA °C	37.800110	41.500000	9.788040E+00
PRESION BAR	13.190000	9.330000	-2.926459E+01
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-65.388320		
ENTALPIA KCAL/KG	-2815.096000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-2483.918000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-13.410750		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.577359		
DENSIDAD KMOL/CUM	38.033340		
DENSIDAD KG/CUM	883.428500	880.309000	-3.531129E-01
PESO MOLECULAR PROM.	23.227740	23.263000	1.518013E-01
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.450000	0.672200	4.937778E+01
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.170453	0.352400	1.067427E+02
VISC.MEZCLA cP	0.192286	0.154000	-1.991101E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	13 ASPEN PLUS	13 DISEÑO	% ERROR
EFLUENTE DE HIDROC.			
DEL ASENTADOR			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	1195.385000	1195.400000	0.001255
PROPANO	3611.507000	3611.500000	-0.000194
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	79216.040000	79254.100000	0.048023
N-BUTANO	16237.430000	16237.500000	0.000431
2,3-DIMETILHEXANO	2586.946000	2590.000000	0.117915
2,3,4-TRIMETILPENTANO	7316.717000	7105.200000	-2.976932
2,2,4-TRIMETILPENTANO	6884.426000	7105.200000	3.107217
ASA(AC SOLUBLE EN HF)	104.335100	0.000000	
AGUA	0.050077	0.000000	
FLUJO TOTAL KMOL/HR	1931.487000	1940.590000	0.469084
FLUJO TOTAL KG/HR	1.171530E+05	1.170989E+05	-0.046200
FLUJO TOTAL PIE /HR	211.514400		
TEMPERATURA °C	48.200010	48.200000	-0.000021
PRESION BAR	10.220000	10.220000	0.000000
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-37.933180		
ENTALPIA KCAL/KG	-625.400700		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-73.268520		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-106.876300		
ENTROPIA CAL/GM-K	-1.762059		
DENSIDAD KMOL/CUM	9.131707		
DENSIDAD KG/CUM	553.876500	548.792000	-0.926489
PESO MOLECULAR PROM.	60.654210	60.342000	-0.517401
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.707000	0.630100	-12.204412
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.077327	0.080800	4.298762
VISC MEZCLA cP	0.143893	0.124200	-15.856119



TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	14 ASPEN PLUS	14 DISEÑO	% ERROR
HF TOTAL DEL ASENTADOR			
A ENFRIADORES EA-211A/B			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	6.931050E+05	6.931048E+05	-2.885566E-05
PROPANO	1629.400000	16290.400000	8.997791E+02
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	22003.800000	22003.800000	0.000000E+00
N-BUTANO	3865.800000	3865.800000	0.000000E+00
2,3-DIMETILHEXANO	133.400000	133.000000	-2.998501E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	950.000000	950.100000	1.052632E-02
2,2,4-TRIMETILPENTANO	950.000000	950.100000	1.052632E-02
ASA(AC SOLUBLE EN HF)	30750.600000	30750.600000	0.000000E+00
AGUA	15375.200000	15375.200000	0.000000E+00
FLUJO TOTAL KMOL/HR	36178.070000	36105.720000	-1.999830E-01
FLUJO TOTAL KG/HR	7.687630E+05	7.687630E+05	0.000000E+00
FLUJO TOTAL PIE /HR	852.661100		
TEMPERATURA °C	41.500010	41.500000	-2.409638E-05
PRESION BAR	10.110000	10.110000	0.000000E+00
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-66.815580		
ENTALPIA KCAL/KG	-3144.349000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-2417.294000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-8.894875		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.418594		
DENSIDAD KMOL/CUM	42.429600		
DENSIDAD KG/CUM	901.604300	890.274000	-1.256682E+00
PESO MOLECULAR PROM.	21.249420	21.292000	2.003819E-01
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.708000	0.675600	-4.576271E+00
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.244371	0.380500	5.570600E+01
VISC MEZCLA cP	0.189246	0.155000	-1.809581E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	15 ASPEN PLUS	15 DISEÑO	% ERROR
HF DEL ASENTADOR			
AL ENFRIADOR EA-211A			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	3.456620E+05	3.465524E+05	2.569308E-01
PROPANO	812.606900	814.700000	2.569167E-01
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	10973.630000	11001.900000	2.569556E-01
N-BUTANO	1927.934000	1932.900000	2.569197E-01
2,3-DIMETILHEXANO	66.528640	66.500000	-4.306767E-02
2,3,4-TRIMETILPENTANO	473.779700	475.050000	2.674034E-01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	473.779700	475.050000	2.674034E-01
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	15335.800000	15375.300000	2.569056E-01
AGUA	7667.850000	7687.600000	2.569072E-01
FLUJO TOTAL KMOL/HR	18042.560000	18052.860000	5.705467E-02
FLUJO TOTAL KG/HR	3.833940E+05	3.843815E+05	2.569062E-01
FLUJO TOTAL PIE /HR	425.235300		
TEMPERATURA °C	41.500010	41.500000	-2.409639E-05
PRESION BAR	10.110000	10.110000	0.000000E+00
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-66.815580		
ENTALPIA KCAL/KG	-3144.349000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-1205.542000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-8.894875		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.418594		
DENSIDAD KMOL/CUM	42.429600		
DENSIDAD KG/CUM	901.604300	890.274000	-1.272676E+00
PESO MOLECULAR PROM.	21.249420	21.292000	1.999812E-01
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.708000	0.675600	-4.795737E+00
K(cond mez ) KCAL-M/HR	0.244371	0.380500	3.577640E+01
VISC. MEZCLA cP	0.189246	0.155000	-2.209387E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	16 ASPEN PLUS	16 DISEÑO	% ERROR
HF DEL ASENTADOR			
AL ENFRIADOR EA-211B			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	3.465520E+05	3.465524E+05	1.154227E-04
PROPANO	814.699900	814.700000	1.227446E-05
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	11001.900000	11001.900000	0.000000E+00
N-BUTANO	1932.900000	1932.900000	0.000000E+00
2,3-DIMETILHEXANO	66.699990	66.500000	-3.007368E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	475.000000	475.050000	1.052521E-02
2,2,4-TRIMETILPENTANO	475.000000	475.050000	1.052521E-02
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	15375.300000	15375.300000	0.000000E+00
AGUA	7687.600000	7687.600000	0.000000E+00
FLUJO TOTAL KMOL/HR	18089.030000	18052.860000	-2.003561E-01
FLUJO TOTAL KG/HR	3.843820E+05	3.843815E+05	-1.300791E-04
FLUJO TOTAL PIE /HR	426.330600		
TEMPERATURA °C	41.500010	41.500000	-2.409639E-05
PRESION BAR	10.110000	10.110000	0.000000E+00
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-66.815580		
ENTALPIA KCAL/KG	-3144.349000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-1208.647000		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-8.894875		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.418594		
DENSIDAD KMOL/CUM	42.429600		
DENSIDAD KG/CUM	901.604300	890.274000	-1.272676E+00
PESO MOLECULAR PROM.	21.249420	21.292000	1.999812E-01
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.708000	0.675600	-4.795737E+00
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.244371	0.380500	3.577640E+01
VISC MEZCLA cP	0.189246	0.155000	-2.209387E+01

TABLA 5.1 RESULTADOS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	17 ASPEN PLUS	17 DISEÑO	% ERROR
HF A LA COLUMNA			
REGENERADORA			
LIQUIDO			
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORIDRICO	890.314600	890.300000	-0.001639897
PROPANO	2.093015	2.100000	0.332619048
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	28.264560	28.300000	0.125229682
N-BUTANO	4.965740	5.000000	0.6852
2,3-DIMETILHEXANO	0.171356	0.200000	14.3218
2,3,4-TRIMETILPENTANO	1.220305	1.200000	-1.692083333
2,2,4-TRIMETILPENTANO	1.220305	1.200000	-1.692083333
ASA(AC. SOLUBLE EN HF)	39.500100	39.500000	-0.000253165
AGUA	19.749920	19.700000	-0.253401015
FLUJO TOTAL KMOL/HR	46.471850	46.380000	-0.198037947
FLUJO TOTAL KG/HR	987.500000	987.500000	0
FLUJO TOTAL PIE /HR	1.095270		
TEMPERATURA °C	41.500010	41.500000	-2.40964E-05
PRESION BAR	10.110000	10.770000	6.128133705
FRACCION VAPOR	0.000000	0.000000	
FRACCION LIQUIDA	1.000000		
ENTALPIA KCAL/MOL	-66.815580		
ENTALPIA KCAL/KG	-3144.349000		
ENTALPIA MMKCAL/HR	-3.105089		
ENTROPIA CAL/MOL-K	-8.894875		
ENTROPIA CAL/GM-K	-0.418594		
DENSIDAD KMOL/CUM	42.429600		
DENSIDAD KG/CUM	901.604300	890.274000	-1.272675603
PESO MOLECULAR PROM.	21.249420	21.292000	0.199981214
CP MEZCLA CAL/MOL-K	0.708000	0.675600	-4.795737123
K(cond.mez.) KCAL-M/HR	0.244371	0.380500	35.77639947
VISC. MEZCLA cP	0.189246	0.155000	-22.09387097

FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO

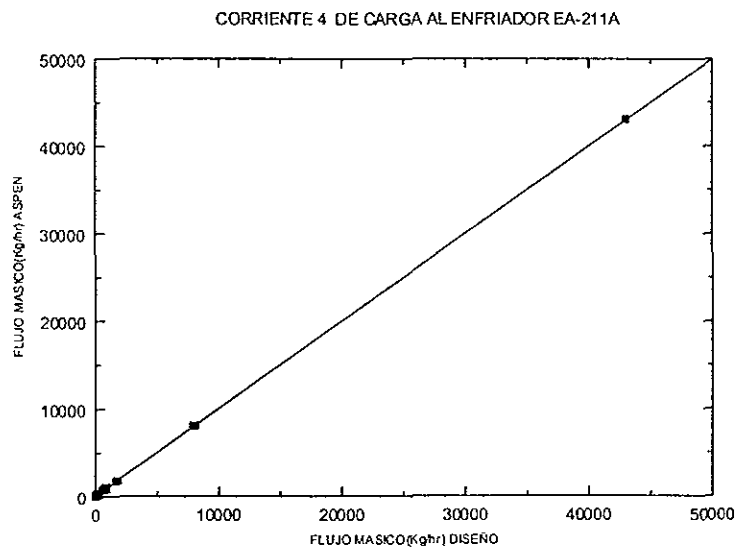
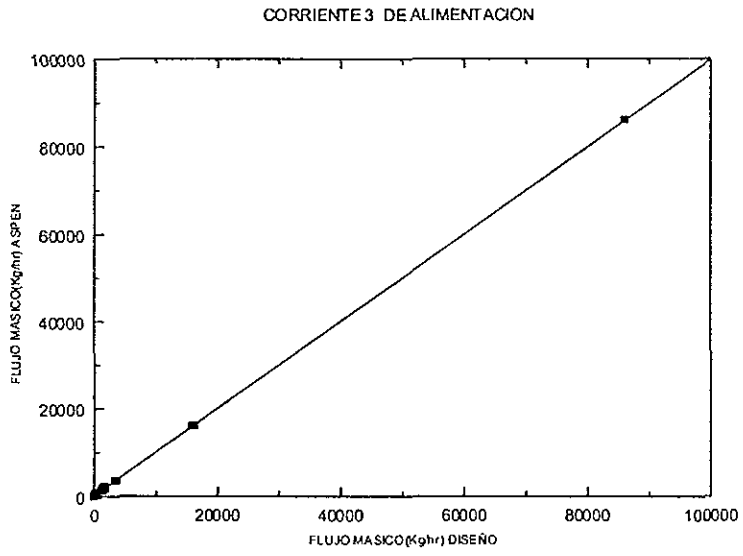
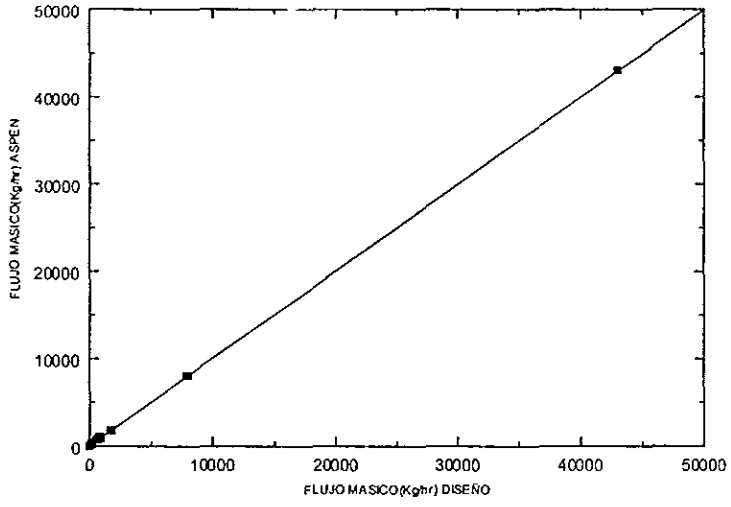


FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE 5 DE ALIMENTACIÓN ALENFRIADOR EA-211B



CORRIENTE 6 CARGA AL REACTOR A

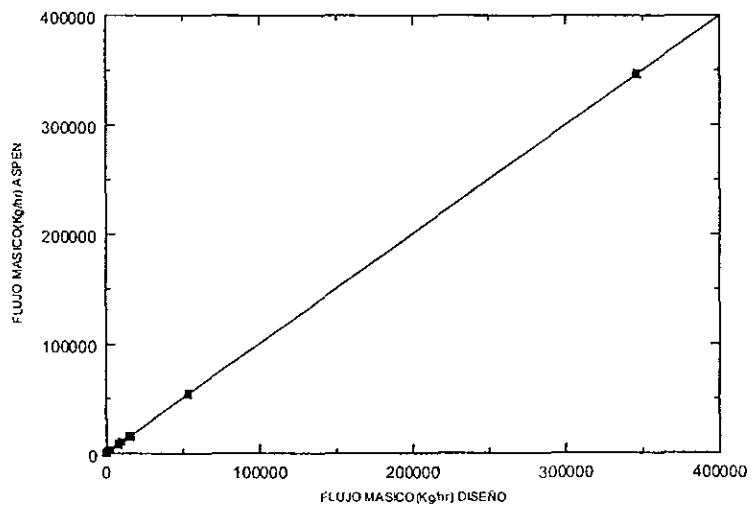
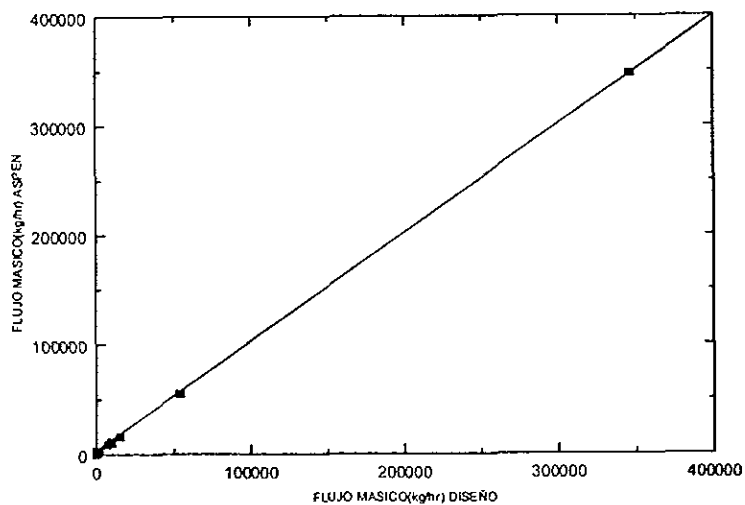


FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE 7 DE ALIMENTACION AL REACTOR B



CORRIENTE 8 DE SALIDA DEL REACTOR A

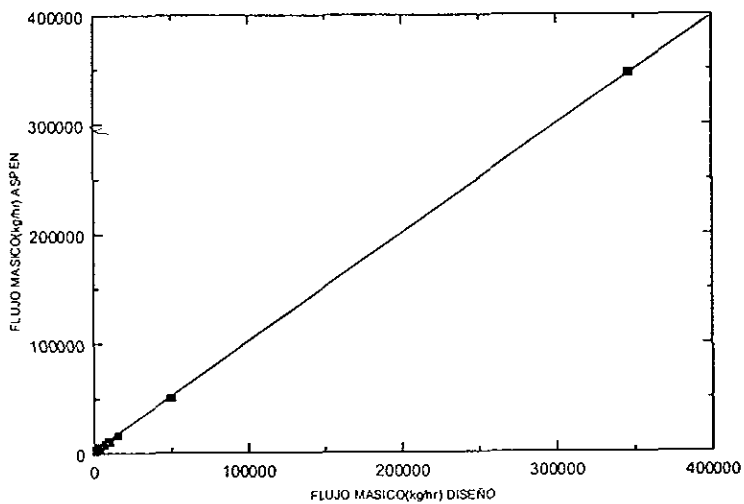


FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

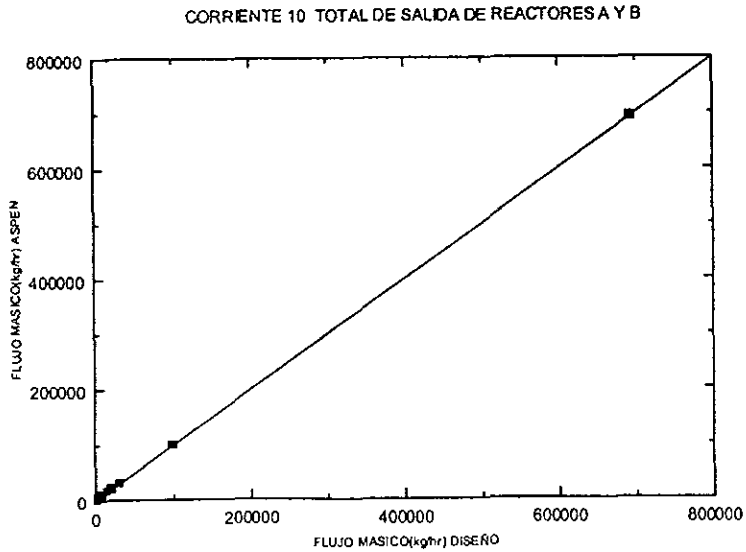
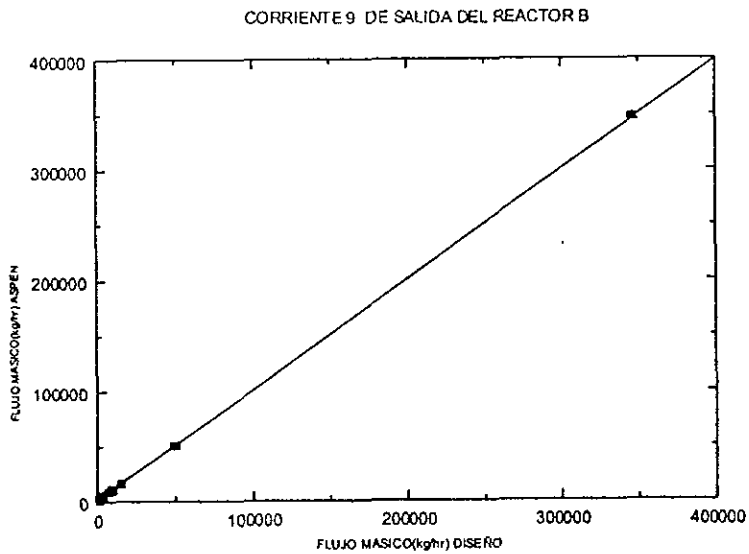




FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

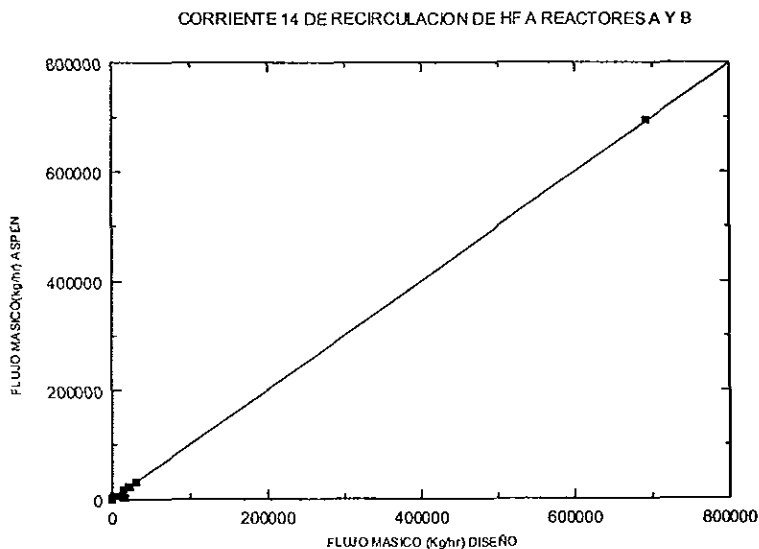
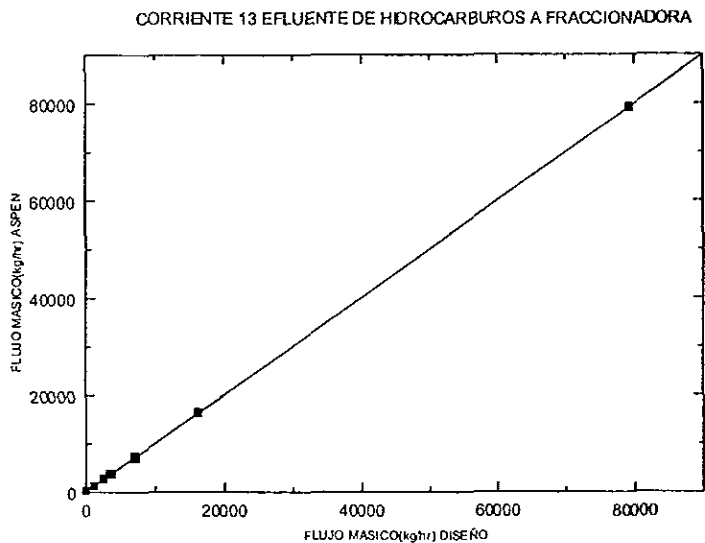
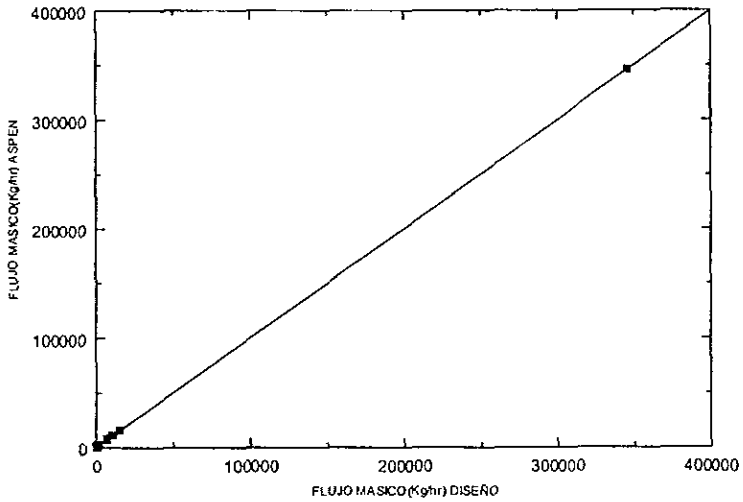


FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

CORRIENTE 15 DE HF DEL ASENTADOR AL REACTOR-A



CORRIENTE 16 DE HF DEL ASENTADOR AL REACTOR-B

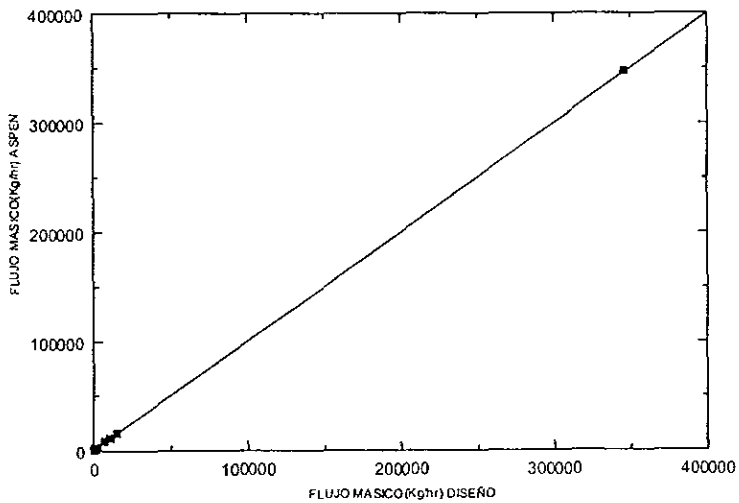


FIG. 5.3 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN VS. DATOS DE DISEÑO (CONTINUACIÓN)

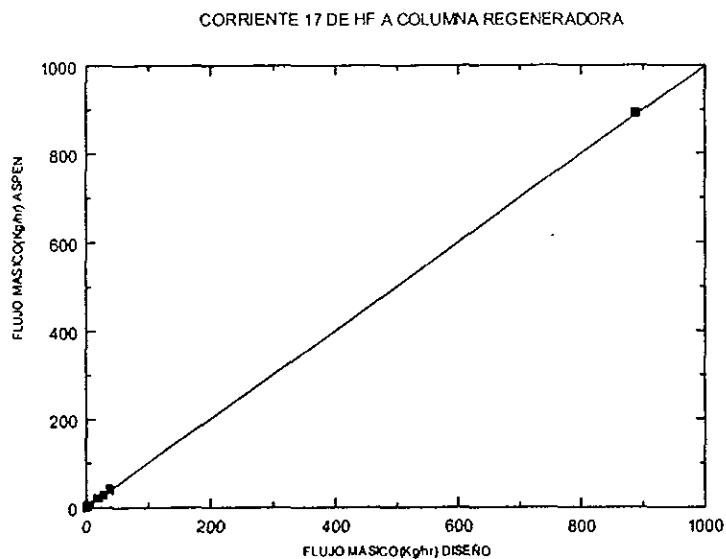


TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS DATOS DE DISEÑO

CORRIENTE	3 ASPEN(REAL)	3 DISEÑO	% ERROR
ALIMENTACIÓN	ME-202		
ISOBUTANO/OLEFINAS	DC		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORHIDRICO	286.000000	239.500000	-19.415449
PROPANO	4235.000000	3510.500000	-20.638086
ISOBUTENO	925.999900	1421.000000	34.834631
1-BUTENO	1555.000000	1244.000000	-25.000000
2C-BUTENO	1944.000000	1776.000000	-9.459459
2T-BUTENO	2407.000000	3368.000000	28.533254
ISOBUTANO	1.004810E+05	85998.700000	-16.840138
N-BUTANO	20029.000000	16026.300000	-24.975821
2,3-DIMETILHEXANO	32.000000	26.800000	-19.402985
2,3,4-TRIMETILPENTANO	538.000000	451.700000	-19.105601
2,2,4-TRIMETILPENTANO	538.000000	451.700000	-19.105601
ASA	0.000000	0.000000	
AGUA	0.000000	0.000000	
Flujo Total KMOL/HR	2315.148000	1997.490000	-15.902858
Flujo Total KG/HR	1.329710E+05	1.145140E+05	-16.117680
Flujo Total PIE /HR	241.091100		
Temperatura °C	30.792610	37.800000	18.538069
Presión BAR	13.240000	13.190000	-0.379075
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Liquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-34.560620		
Entalpia KCAL/KG	-601.732300		
Entalpia MMKCAL/HR	-80.014100		
Entropia CAL/MOL-K	-102.704400		
Entropia CAL/GM-K	-1.788178		
Densidad KMOL/PIE	9.602790		
Densidad KG/PIE	551.538200	542.455000	-1.674461
Peso Molec. Promedio	57.435200	57.329000	-0.185247
CP Mezcla CAL/MOL-K	39.234940	0.618900	-6239.463564
Cond Mezcla KCAL-M/HR	0.082124	0.080900	-1.512361
Viscosidad Mezcla cP	0.154419	0.135400	-14.046529

TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	4 ASPEN(REAL)	4 DISEÑO	% ERROR
ALIMENTACIÓN	DC		
AL ENFRIADOR EA-211A	EA-211A		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	123.151100	119.800000	-2.721129
PROPANO	1823.584000	1755.300000	-3.744494
ISOBUTENO	398.734100	710.499900	78.188898
1-BUTENO	669.580500	621.999900	-7.106031
2C-BUTENO	837.083200	888.000000	6.082645
2T-BUTENO	1036.450000	1684.000000	62.477688
ISOBUTANO	43266.950000	42999.350000	-0.618486
N-BUTANO	8624.455000	8013.200000	-7.087462
2,3-DIMETILHEXANO	13.779150	13.900000	0.877050
2,3,4-TRIMETILPENTANO	231.661900	225.600000	-2.616701
2,2,4-TRIMETILPENTANO	231.661900	225.600000	-2.616701
ASA	0.000000	0.000000	
AGUA	0.000000	0.000000	
Flujo Total KMOL/HR	996.898900	998.750000	0.185686
Flujo Total KG/HR	57257.090000	57257.100000	0.000017
Flujo Total PIE /HR	103.813500		-100.000000
Temperatura °C	30.792610	37.800000	22.756726
Presión BAR	13.240000	13.190000	-0.377644
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-34.560620		
Entalpia KCAL/KG	-601.732300		
Entalpia MMKCAL/HR	-34.453940		
Entropia CAL/MOL-K	-102.704400		
Entropia CAL/GM-K	-1.788178		
Densidad KMOL/PIE	9.602790		
Densidad KG/PIE	551.538200	542 455000	-1.646885
Peso Molec. Promedio	57.435200	57.329000	-0.184904
CP Mezcla CAL/MOL-K	39.234940	0.618900	-98.422579
Cond Mezcla KCAL-M/HR	0.082124	0.080900	-1.489829
Viscosidad Mezcla cP	0.154419	0.135400	-12.316490

TABLA 5.2. RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	5 ASPEN(REAL)	5 DISEÑO	% ERROR
ALIMENTACIÓN	DC		
AL ENFRIADOR EA-211B	EA-211B		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	162.848900	119.800000	-35.933973
PROPANO	2411.416000	1755.300000	-37.379137
ISOBUTENO	527.265800	710.499900	25.789462
1-BUTENO	885.419400	621.999900	-42.350409
2C-BUTENO	1106.917000	888.000000	-24.652815
2T-BUTENO	1370.550000	1684.000000	18.613420
ISOBUTANO	57214.040000	42999.350000	-33.057918
N-BUTANO	11404.540000	8013.200000	-42.321919
2,3-DIMETILHEXANO	18.220850	13.900000	-31.085252
2,3,4-TRIMETILPENTANO	306.338000	225.600000	-35.788121
2,2,4-TRIMETILPENTANO	306.338000	225.600000	-35.788121
ASA	0.000000	0.000000	
AGUA	0.000000	0.000000	
Flujo Total KMOL/HR	1318.249000	998.750000	-31.989887
Flujo Total KG/HR	75713.890000	57257.100000	-32.234937
Flujo Total PIE /HR	137.277700		
Temperatura °C	30.792610	37.800000	18.538069
Presión BAR	13.240000	13.190000	-0.379075
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Liquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-34.560620		
Entalpia KCAL/KG	-601.732300		
Entalpia MMKCAL/HR	-45.560160		
Entropia CAL/MOL-K	-102.704400		
Entropia CAL/GM-K	-1.788178		
Densidad KMOL/PIE	9.602790		
Densidad KG/PIE	551.538200	542.455000	-1.674461
Peso Molec. Promedio	57.435200	57.329000	-0.185247
CP Mezcla CAL/MOL-K	39.234940	0.618900	-6239.463564
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.082124	0.080900	-1.512361
Viscosidad Mezcla cP	0.154419	0.135400	-14.046529

TABLA 52 RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO (CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	6 ASPEN(REAL)	6 DISEÑO	% ERROR
CARGA AL	EA-211A		
REACTOR A	RA		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	3.457850E+05	3.466722E+05	2.559190E-01
PROPANO	2636.191000	2570.000000	-2.575525E+00
ISOBUTENO	398.734100	976.125000	5.915133E+01
1-BUTENO	669.580500	976.125000	3.140423E+01
2C-BUTENO	837.083200	976.125000	1.424426E+01
2T-BUTENO	1036.450000	976.125000	-6.180049E+00
ISOBUTANO	54240.590000	54001.300000	-4.431190E-01
N-BUTANO	10552.390000	9946.100000	-6.095756E+00
2,3-DIMETILHEXANO	80.307790	80.000000	-3.847375E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	705.441600	700.850000	-6.551473E-01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	705.441600	700.850000	-6.551473E-01
ASA	15335.800000	15375.300000	2.569056E-01
AGUA	7667.850000	7687.600000	2.569072E-01
Flujo Total KMOL/HR	19039.460000	18052.860000	-5.465062E+00
Flujo Total KG/HR	4.406510E+05	4.416386E+05	2.236218E-01
Flujo Total PIE /HR	501.300000		
Temperatura °C	36.600010	37.800000	3.174577E+00
Presión BAR	13.240000	13.190000	-3.790751E-01
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-65.109180		
Entalpia KCAL/KG	-2813.209000		
Entalpia MMKCAL/HR	-1239.661000		
Entropia CAL/MOL-K	-13.222890		
Entropia CAL/GM-K	-0.571329		
Densidad KMOL/PIE	37.980170		
Densidad KG/PIE	879.016600	890.274000	1.264487E+00
Peso Molec. Promedio	23.144090	21.292000	-8.698525E+00
CP Mezcla CAL/MOL-K	1.224927	0.675600	-8.130950E+01
Cond. Mezcla KCAL-M/HR	0.170682	0.257950	3.383144E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.193019	0.155000	-2.452806E+01

TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS DATOS DE DISEÑO (CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	7 ASPEN (REAL)	7 DISEÑO	% ERROR
CARGA AL	EA-211B		
REACTOR B	RB		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	3.467150E+05	3.466722E+05	-1.234596E-02
PROPANO	3226.115000	2570.000000	-2.552977E+01
ISOBUTENO	527.265800	976.125000	4.598378E+01
1-BUTENO	885.419400	976.125000	9.292416E+00
2C-BUTENO	1106.917000	976.125000	-1.339910E+01
2T-BUTENO	1370.550000	976.125000	-4.040722E+01
ISOBUTANO	68215.930000	54001.300000	-2.632276E+01
N-BUTANO	13337.440000	9946.100000	-3.409718E+01
2,3-DIMETILHEXANO	84.920840	80.000000	-6.151050E+00
2,3,4-TRIMETILPENTANO	781.338000	700.850000	-1.148434E+01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	781.338000	700.850000	-1.148434E+01
ASA	15375.300000	15375.300000	0.000000E+00
AGUA	7687.600000	7687.600000	0.000000E+00
Flujo Total KMOL/HR	19407.280000	18052.860000	-7.502523E+00
Flujo Total KG/HR	4.600950E+05	4.416386E+05	-4.179073E+00
Flujo Total PIE /HR	527.751900		
Temperatura °C	35.800010	37.800000	5.290979E+00
Presión BAR	13.240000	13.190000	-3.790751E-01
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-64.605110		
Entalpia KCAL/KG	-2725.108000		
Entalpia MMKCAL/HR	-1253.828000		
Entropia CAL/MOL-K	-14.570460		
Entropia CAL/GM-K	-0.614596		
Densidad KMOL/PIE	36.773490		
Densidad KG/PIE	871.802300	890.274000	2.074833E+00
Peso Molec. Promedio	23.707360	21.292000	-1.134398E+01
CP Mezcla CAL/MOL-K	1.929532	0.675600	-1.856027E+02
Cond. Mezcla KCAL-M/HR	0.160309	0.257950	3.785265E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.193285	0.155000	-2.470013E+01



TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	8 ASPEN(REAL)	8 DISEÑO	% ERROR
SALIDA DEL REACTOR A	RA		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	3.457850E+05	3.466722E+05	2.559190E-01
PROPANO	2636.191000	2570.000000	-2.575525E+00
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	51205.440000	49968.700000	-2.475029E+00
N-BUTANO	10552.390000	9946.100000	-6.095756E+00
2,3-DIMETILHEXANO	1411.021000	1360.000000	-3.751544E+00
2,3,4-TRIMETILPENTANO	2820.244000	4023.550000	2.990658E+01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	3192.457000	4023.550000	2.065571E+01
ASA	15384.270000	15387.000000	1.774225E-02
AGUA	7667.850000	7687.600000	2.569072E-01
Flujo Total KMOL/HR	18987.030000	18984.600000	-1.279985E-02
Flujo Total KG/HR	4.406550E+05	4.416387E+05	2.227386E-01
Flujo Total PIE /HR	498.257600		
Temperatura °C	36.600010	41.500000	1.180720E+01
Presión BAR	13.240000	9.330000	-4.190782E+01
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-65.338040		
Entalpia KCAL/KG	-2815.298000		
Entalpia MMKCAL/HR	-1240.593000		
Entropia CAL/MOL-K	-13.354950		
Entropia CAL/GM-K	-0.575440		
Densidad KMOL/PIE	38.106850		
Densidad KG/PIE	884.392100	880.309000	-4.638258E-01
Peso Molec. Promedio	23.208220	23.263000	2.354812E-01
CP Mezcla CAL/MOL-K	1.182626	0.672200	-7.593365E+01
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.170916	0.352400	5.149935E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.193713	0.154000	-2.578786E+01

TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO (CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	9 ASPEN(REAL)	9 DISEÑO	% ERROR
SALIDA DEL REACTOR B	FB		
FASE	MER		
	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	3.467150E+05	3.466722E+05	-1.234596E-02
PROPANO	3226.115000	2570.000000	-2.552977E+01
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	64199.550000	49968.700000	-2.847953E+01
N-BUTANO	13337.440000	9946.100000	-3.409718E+01
2,3-DIMETILHEXANO	1858.863000	1360.000000	-3.668110E+01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	3572.203000	4023.550000	1.121763E+01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	4074.921000	4023.550000	-1.276758E+00
ASA	15427.600000	15387.000000	-2.638591E-01
AGUA	7687.600000	7687.600000	0.000000E+00
Flujo Total KMOL/HR	19337.950000	18984.600000	-1.861245E+00
Flujo Total KG/HR	4.601000E+05	4.416387E+05	-4.180182E+00
Flujo Total PIE /HR	523.666400		
Temperatura °C	35.800010	41.500000	1.373492E+01
Presión BAR	13.240000	9.330000	-4.190782E+01
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-64.900380		
Entalpia KCAL/KG	-2727.758000		
Entalpia MMKCAL/HR	-1255.058000		
Entropia CAL/MOL-K	-14.744520		
Entropia CAL/GM-K	-0.619711		
Densidad KMOL/PIE	36.927990		
Densidad KG/PIE	878.611900	880.309000	1.927846E-01
Peso Molec. Promedio	23.792570	23.263000	-2.276448E+00
CP Mezcla CAL/MOL-K	1.877353	0.672200	-1.792849E+02
Cond. Mezcla KCAL-M/HR	0.160540	0.352400	5.444387E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.194188	0.154000	-2.609591E+01

TABLA 5.2. RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	10 ASPEN(REAL)	10 DISEÑO	% ERROR
EFLUENTE TOTAL	MER		
DE REACTORES A/B	DA-202		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	6.925000E+05	6.933444E+05	1.217865E-01
PROPANO	5862.307000	5139.900000	-1.405488E+01
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	1.154050E+05	99937.300000	-1.547740E+01
N-BUTANO	23889.830000	19892.200000	-2.009647E+01
2,3-DIMETILHEXANO	3269.885000	2800.000000	-1.678161E+01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	6392.447000	8007.050000	2.016477E+01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	7267.378000	8007.050000	9.237759E+00
ASA	30811.870000	30774.100000	-1.227331E-01
AGUA	15355.450000	15375.300000	1.291032E-01
Flujo Total KMOL/HR	38324.980000	37969.190000	-9.370492E-01
Flujo Total KG/HR	9.007550E+05	8.832773E+05	-1.978733E+00
Flujo Total PIE /HR	1021.678000		
Temperatura °C	36.110380	41.500000	1.298704E+01
Presión BAR	13.240000	9.330000	-4.190782E+01
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-65.117210		
Entalpia KCAL/KG	-2770.583000		
Entalpia MMKCAL/HR	-2495.651000		
Entropia CAL/MOL-K	-14.051780		
Entropia CAL/GM-K	-0.597870		
Densidad KMOL/PIE	37.511780		
Densidad KG/PIE	881.642000	880.309000	-1.514241E-01
Peso Molec. Promedio	23.503070	23.263000	-1.031982E+00
CP Mezcla CAL/MOL-K	1.541065	0.672200	-1.292569E+02
Cond Mezcla KCAL-M/HR	0.165403	0.352400	5.306373E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.194073	0.154000	-2.602169E+01

TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	13 ASPEN(REAL)	13 DISEÑO	% ERROR
EFLUENTE DE HIDROC.	DA-202		
A FRACC. PRINC.			
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	1241.885000	1195.400000	-3.888657
PROPANO	4336.006000	3611.500000	-20.061083
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	94749.990000	79254.100000	-19.552162
N-BUTANO	20240.130000	16237.500000	-24.650531
2,3-DIMETILHEXANO	3138.885000	2590.000000	-21.192471
2,3,4-TRIMETILPENTANO	5450.447000	7105.200000	23.289323
2,2,4-TRIMETILPENTANO	6325.378000	7105.200000	10.975370
ASA	80.971050	0.000000	
AGUA	0.050077	0.000000	
Flujo Total KMOL/HR	2269.828000	1940.590000	-16.965871
Flujo Total KG/HR	1.355640E+05	1.170989E+05	-15.768807
Flujo Total PIE /HR	244.942300		
Temperatura °C	43.700010	48.200000	9.336079
Presión BAR	10.220000	10.220000	0.000000
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-37.533580		
Entalpia KCAL/KG	-628.448000		
Entalpia MMKCAL/HR	-85.196000		
Entropia CAL/MOL-K	-105.917100		
Entropia CAL/GM-K	-1.773436		
Densidad KMOL/PIE	9.266788		
Densidad KG/PIE	553.451900	548.792000	-0.849120
Peso Molec. Promedio	59.724240	60.342000	1.023765
CP Mezcla CAL/MOL-K	41.810160	0.630100	-6535.480083
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.078480	0.080800	2.870916
Viscosidad Mezcla cP	0.146421	0.124200	-17.890982

TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	14 ASPEN(REAL)	14 DISEÑO	% ERROR
HF DEL ASENTADOR	DA-202		
A ENFRIADORES	DHF		
FASE	LIQUIDO		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	6.931050E+05	6.931048E+05	-2.885567E-05
PROPANO	1629.400000	16290.400000	8.999779E+01
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	22003.800000	22003.800000	0.000000E+00
N-BUTANO	3865.800000	3865.800000	0.000000E+00
2,3-DIMETILHEXANO	133.400000	133.000000	-3.007519E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	950.000000	950.100000	1.052521E-02
2,2,4-TRIMETILPENTANO	950.000000	950.100000	1.052521E-02
ASA	30750.600000	30750.600000	0.000000E+00
AGUA	15375.200000	15375.200000	0.000000E+00
Flujo Total KMOL/HR	36178.070000	36105.720000	-2.003838E-01
Flujo Total KG/HR	7.687630E+05	7.687630E+05	0.000000E+00
Flujo Total PIE /HR	829.445100		
Temperatura °C	31.000010	41.500000	2.530118E+01
Presión BAR	7.260000	10.110000	2.818991E+01
Fracción Vapor	0.000000	0.000000	
Fracción Líquido	1.000000		
Entalpia KCAL/MOL	-66.806220		
Entalpia KCAL/KG	-3143.908000		
Entalpia MMKCAL/HR	-2416.955000		
Entropia CAL/MOL-K	-8.426086		
Entropia CAL/GM-K	-0.396533		
Densidad KMOL/PIE	43.617190		
Densidad KG/PIE	926.840000	890.274000	-4.107275E+00
Peso Molec. Promedio	21.249420	21.292000	1.999812E-01
CP Mezcla CAL/MOL-K	7.522452	0.675600	-1.013448E+03
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.252028	0.380500	3.376413E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.204204	0.155000	-3.174465E+01

TABLA 5.2 RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	15 ASPEN(REAL)	15 DISEÑO	% ERROR
HF A ENFRIADOR	D:HF		
EA-211A	EA-211A		
FASE	MIXED		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHIDRICO	3.456620E+05	3.465524E+05	2.569308E-01
PROPANO	812.606900	814.700000	2.569167E-01
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	10973.630000	11001.900000	2.569556E-01
N-BUTANO	1927.934000	1932.900000	2.569197E-01
2,3-DIMETILHEXANO	66.528640	66.500000	-4.306767E-02
2,3,4-TRIMETILPENTANO	473.779700	475.050000	2.674034E-01
2,2,4-TRIMETILPENTANO	473.779700	475.050000	2.674034E-01
ASA	15335.800000	15375.300000	2.569056E-01
AGUA	7667.850000	7687.600000	2.569072E-01
Flujo Total KMOL/HR	18042.560000	18052.860000	5.705467E-02
Flujo Total KG/HR	3.833940E+05	3.843815E+05	2.569062E-01
Flujo Total PIE /HR	4621.420000		
Temperatura °C	86.675960	41.500000	-1.088577E+02
Presión BAR	7.260000	10.110000	2.818991E+01
Fracción Vapor	0.055959	0.000000	
Fracción Líquido	0.944041		
Entalpia KCAL/MOL	-66.806220		
Entalpia KCAL/KG	-3143.908000		
Entalpia MMKCAL/HR	-1205.373000		
Entropia CAL/MOL-K	-10.434840		
Entropia CAL/GM-K	-0.491065		
Densidad KMOL/PIE	3.904116		
Densidad KG/PIE	82.960210	890.274000	9.068150E+01
Peso Molec. Promedio	21.249420	21.292000	1.999812E-01
CP Mezcla CAL/MOL-K	7.636578	0.675600	-1.030340E+03
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.212275	0.380500	4.421162E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.143811	0 155000	7.218452E+00

TABLA 5.2. RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	16 ASPEN(REAL)	16 DISEÑO	% ERROR
HF A ENFRIADOR	DHF		
EA-211B	EA-211B		
FASE	MIXED		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ÁCIDO FLUORHÍDRICO	3.465520E+05	3.465524E+05	1.154227E-04
PROPANO	814.699900	814.700000	1.227446E-05
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	11001.900000	11001.900000	0.000000E+00
N-BUTANO	1932.900000	1932.900000	0.000000E+00
2,3-DIMETILHEXANO	66.699990	66.500000	-3.007368E-01
2,3,4-TRIMETILPENTANO	475.000000	475.050000	1.052521E-02
2,2,4-TRIMETILPENTANO	475.000000	475.050000	1.052521E-02
ASA	15375.300000	15375.300000	0.000000E+00
AGUA	7687.600000	7687.600000	0.000000E+00
Flujo Total KMOL/HR	18089.030000	18052.860000	-2.003561E-01
Flujo Total KG/HR	3.843820E+05	3.843815E+05	-1.300791E-04
Flujo Total PIE /HR	4633.323000		
Temperatura °C	86.675960	41.500000	-1.088577E+02
Presión BAR	7.260000	10.110000	2.818991E+01
Fracción Vapor	0.055959	0.000000	
Fracción Líquido	0.944041		
Entalpia KCAL/MOL	-66.806220		
Entalpia KCAL/KG	-3143.908000		
Entalpia MMKCAL/HR	-1208.477000		
Entropia CAL/MOL-K	-10.434840		
Entropia CAL/GM-K	-0.491065		
Densidad KMOL/PIE	3.904116		
Densidad KG/PIE	82.960210	890.274000	9.068150E+01
Peso Molec. Promedio	21.249420	21.292000	1.999812E-01
CP Mezcla CAL/MOL-K	7.636578	0.675600	-1.030340E+03
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.212275	0.380500	4.421162E+01
Viscosidad Mezcla cP	0.143811	0.155000	7.218452E+00

TABLA 5.2. RESULTADOS CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	17 ASPEN(REAL)	17 DISEÑO	% ERROR
HF A TORRE	DHF		
REGENERADORA			
FASE	MIXED		
COMPONENTES			
FLUJO MASA KG/HR			
ACIDO FLUORHIDRICO	890.314600	890.300000	-0.001639897
PROPANO	2.093015	2.100000	0.332619048
ISOBUTENO	0.000000	0.000000	
1-BUTENO	0.000000	0.000000	
2C-BUTENO	0.000000	0.000000	
2T-BUTENO	0.000000	0.000000	
ISOBUTANO	28.264560	28.300000	0.125229682
N-BUTANO	4.965740	5.000000	0.6852
2,3-DIMETILHEXANO	0.171356	0.200000	14.3218
2,3,4-TRIMETILPENTANO	1.220305	1.200000	-1.692083333
2,2,4-TRIMETILPENTANO	1.220305	1.200000	-1.692083333
ASA	39.500100	39.500000	-0.000253165
AGUA	19.749920	19.700000	-0.253401015
Flujo Total KMOL/HR	46.471850	46.380000	-0.198037947
Flujo Total KG/HR	987.500000	987.500000	0
Flujo Total PIE /HR	11.903300		
Temperatura °C	86.675960	41.500000	-108.8577349
Presión BAR	7.260000	10.770000	32.59052925
Fracción Vapor	0.055959	0.000000	
Fracción Líquido	0.944041		
Entalpia KCAL/MOL	-66.806220		
Entalpia KCAL/KG	-3143.908000		
Entalpia MMKCAL/HR	-3.104654		
Entropia CAL/MOL-K	-10.434840		
Entropia CAL/GM-K	-0.491065		
Densidad KMOL/PIE	3.904116		
Densidad KG/PIE	82.960210	890.274000	90.68149693
Peso Molec. Promedio	21.249420	21.292000	0.199981214
CP Mezcla CAL/MOL-K	7.636578	0.675600	-1030.340142
Cond.Mezcla KCAL-M/HR	0.212275	0.380500	44.21161629
Viscosidad Mezcla cP	0.143811	0.155000	7.218451613



FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO

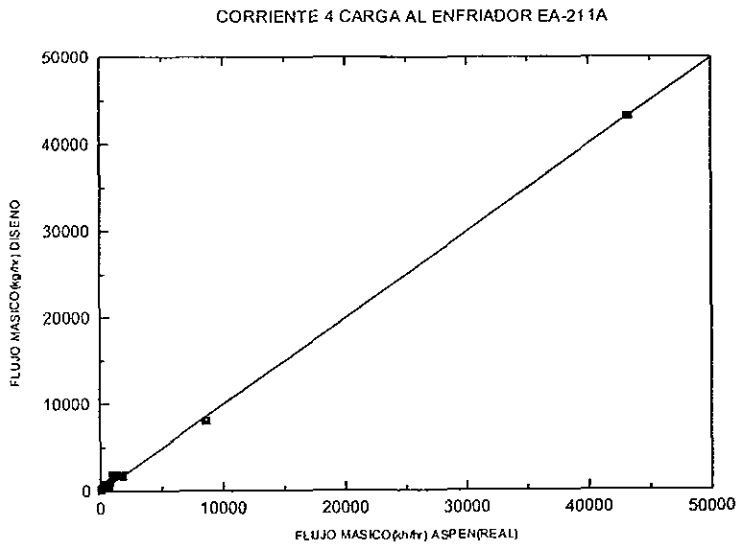
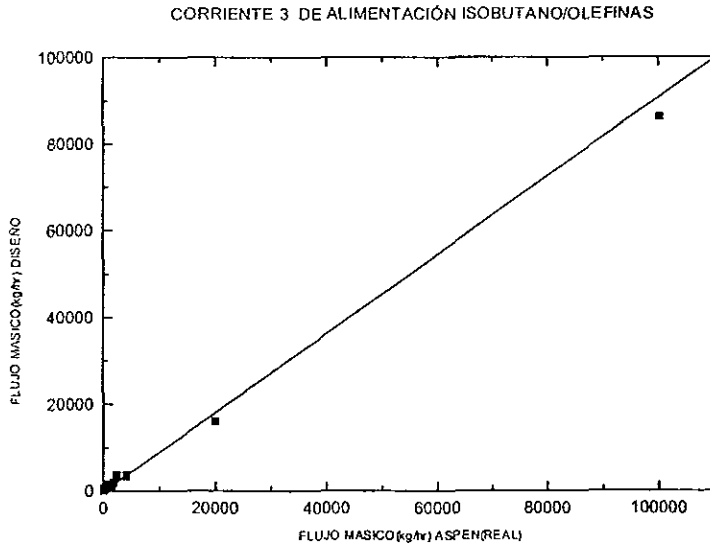


FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO (CONTINUACIÓN)

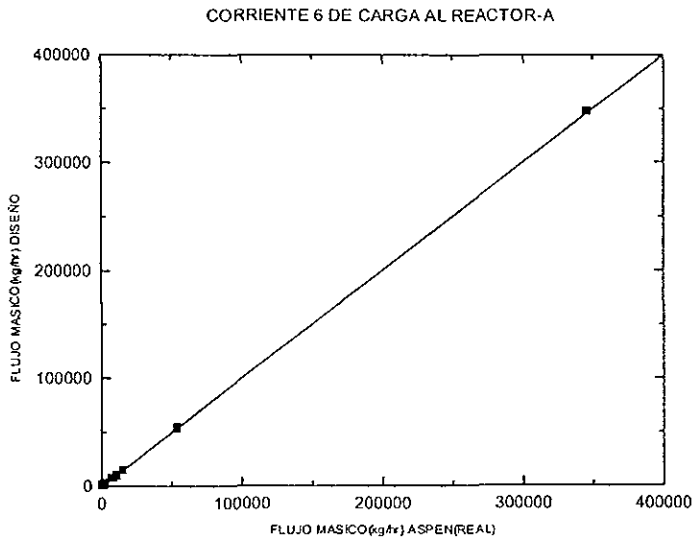
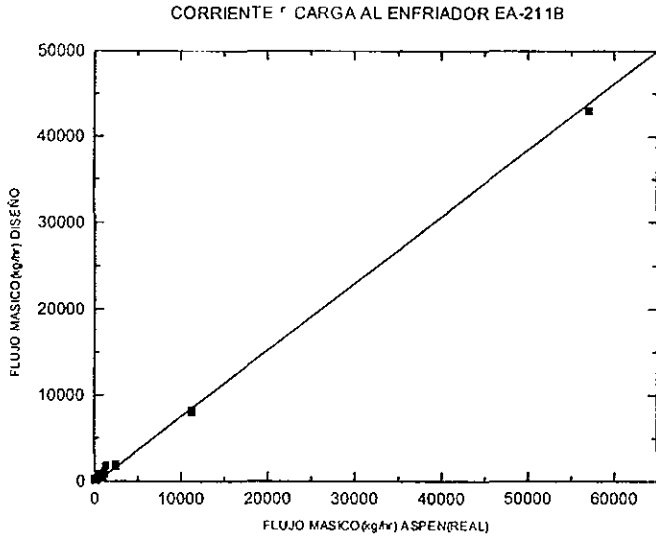


FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

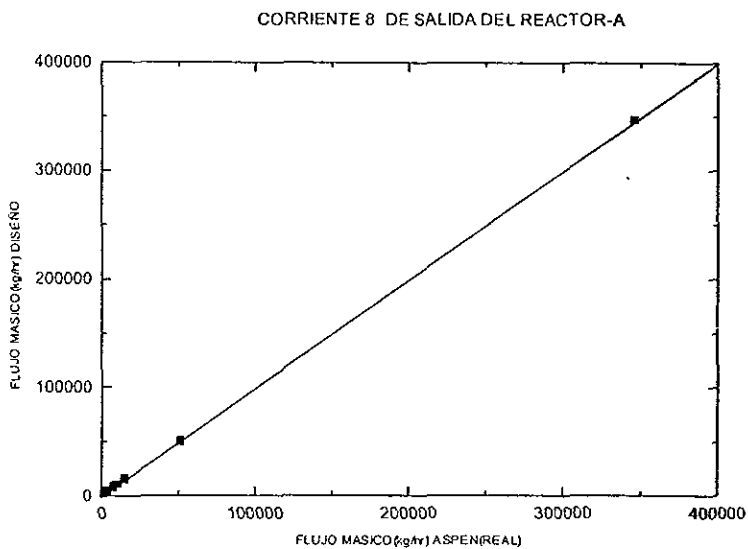
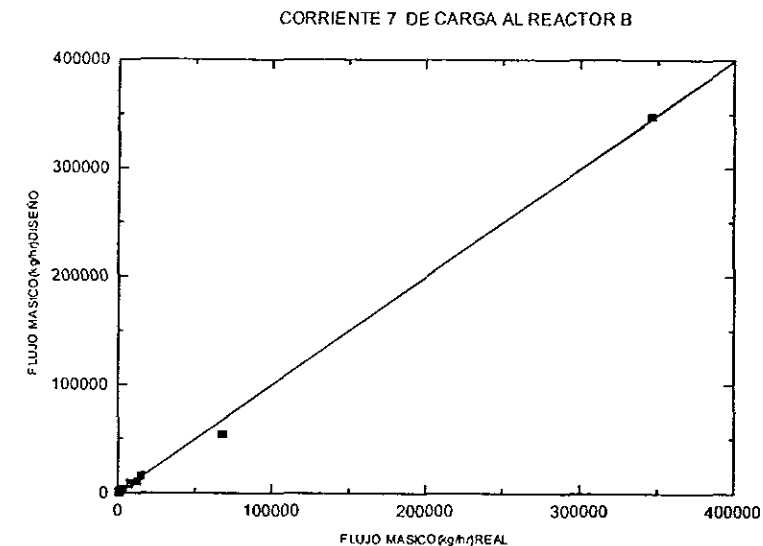


FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

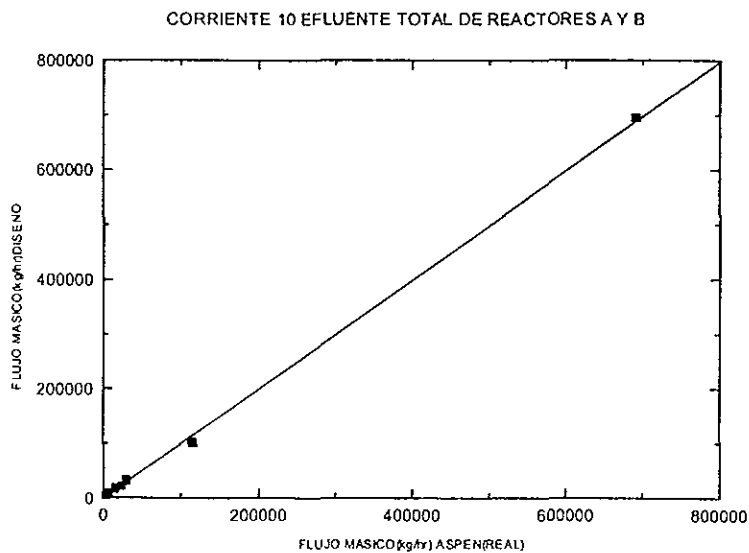
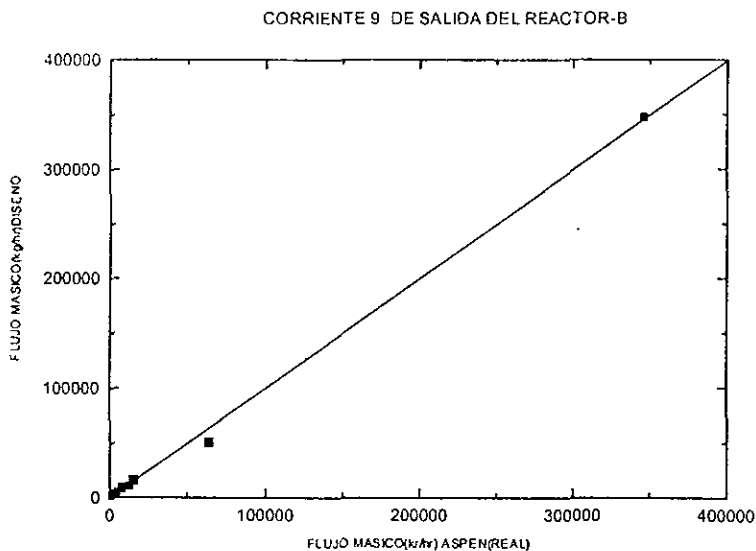


FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)

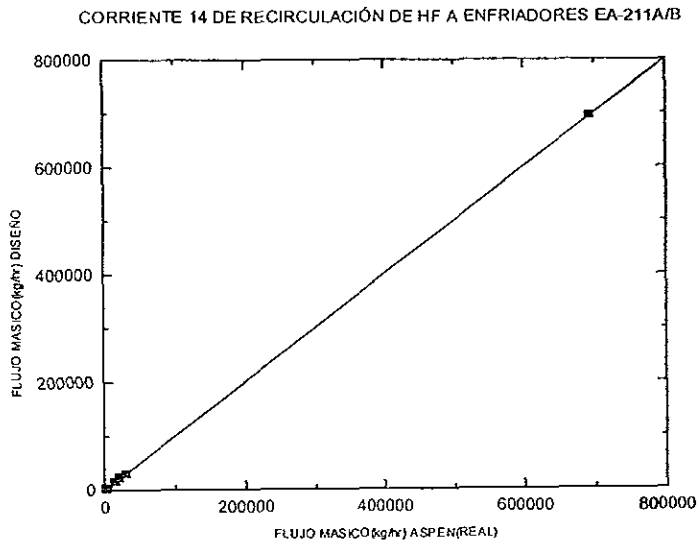
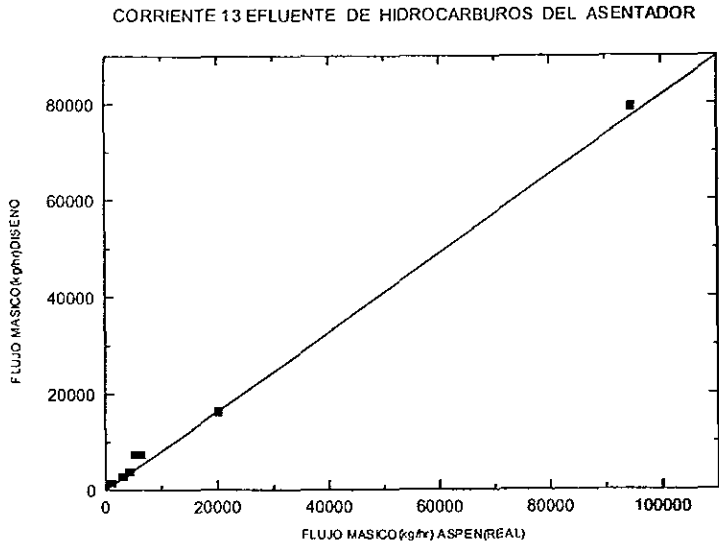


FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO (CONTINUACIÓN)

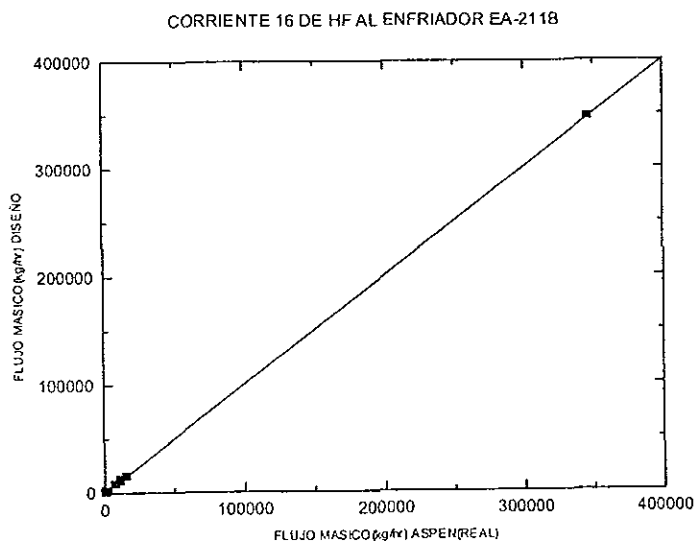
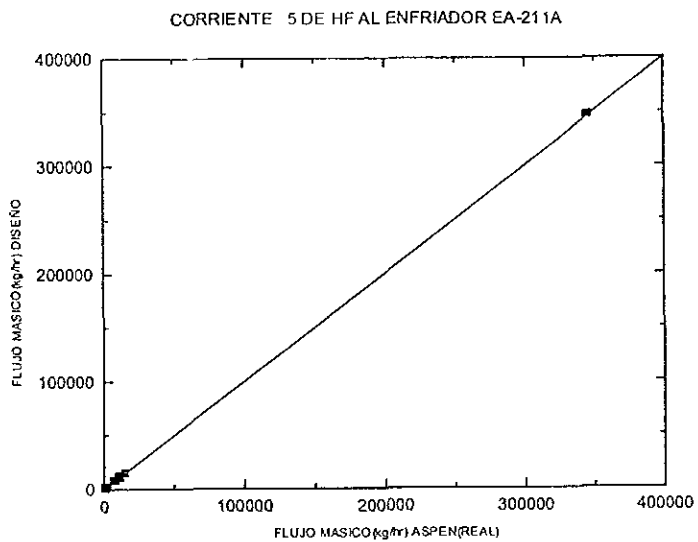
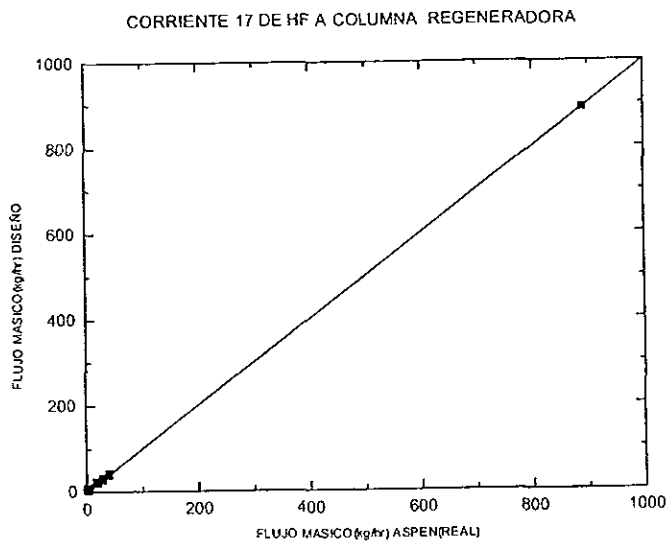


FIG. 5.4 GRAFICAS COMPARATIVAS DE ASPEN CON DATOS REALES VS. DATOS DE DISEÑO(CONTINUACIÓN)



## CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En principio es importante indicar que el uso del simulador para el estudio de esquemas de proceso, representa una de las opciones de análisis más accesibles, ya que se pueden efectuar estudios en el menor tiempo, ya que realiza cálculos con una gran rapidez y a un costo mínimo.

El simulador Aspen demostró tener características muy similares a las condiciones de diseño, lo cual indica que el modelo propuesto y los modelos elegidos de los equipos empleados del simulador, así como la cinética tomada de la literatura, fueron argumentos suficientes para lograr la reproducción de los datos operacionales del esquema de simulación con resultados satisfactorios, a pesar de ser un modelo sencillo.

Puesto que las composiciones de los cuatro butenos son básicamente similares, los butenos son isomerizados antes de la alquilación con isobutano. El paso de isomerización produce con isobutano el ion 2,2,4-trimetilpentil para formar el 2,2,4-TMP(trimetilpentano), principal producto final. El ion 2,2,4-trimetilpentil es capaz de isomerizar también otros iones trimetilpentil y producir otros trimetilpentanos, principalmente 2,3,4-TMP(trimetilpentano).

Es importante aclarar que la simulación efectuada a estado estacionario sirve de base para mejorar el funcionamiento del proceso, estableciendo las condiciones de operación y lograr que el proceso sea más eficiente.

Cabe mencionar que la cinética utilizada para poder correr la simulación se estimo de los datos reportados en la literatura para alquilación de propileno, estos datos fueron ajustandose al esquema de simulación propuesto, con buenos resultados.

Es recomendable continuar con otro estudio que sea más robusto, en el que se incluyan los coeficientes de transferencia de masa, y todas las reacciones químicas que sean importantes para el modelado completo del reactor ya que la modelación y simulación efectuada esta basada en información de cómo es el comportamiento de sistemas en fase líquida con transferencia de masa únicamente ó bien cuando se controla por la cinética.

También es importante la realización de un modulo para computadora donde el operador en planta pueda predecir el comportamiento del proceso, buscando siempre una mayor producción y calidad de alquilado.

Podemos concluir que el objetivo planteado se pudo cubrir con resultados hasta cierto punto satisfactorio, ya que el modelo propuesto es capaz de reproducir los balances de materia y condiciones de operación de diseño y que podrá servir como punto de partida para un estudio más completo. Además se



recomienda utilizarlo en las plantas de alquilación de PEMEX-REFINACIÓN, y procurar el mejoramiento en las condiciones de operación del proceso.

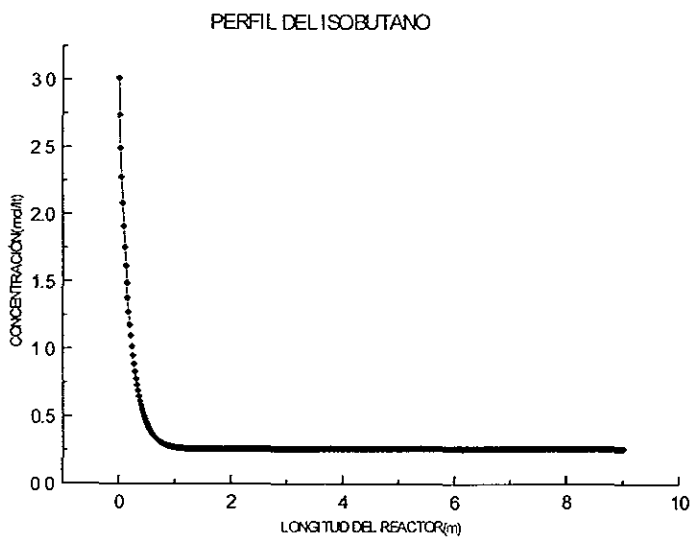
1. **ALBRIGHT, LYLE F.** "Alkylation Processes Using Hydrogen Fluoride as Catalyst" *Chemical Engineering*, Sep. 12, 1966, pp 205-210.
2. **ALBRIGHT, LYLE F.** "Comparisons of Alkylation Processes" *Chemical Engineering*, Oct. 10, 1966, pp 209-214.
3. **ALBRIGHT, LYLE F, Li K. W., Eckert R. E.**, "Alkylation of isobutane with light olefins using sulfuric acid" *Ind.Eng. Chem. Process Des. Develop.*, Vol. 9, No. 3, 1970, pp 441-454.
4. **ALBRIGHT, LYLE F.** "Alkylation:Chemical and Engineering Factors for Reactor Design" *Chem. Eng.*, July 4, 1966, pp 119-126
5. **Carlson C. E.**, "Don't Gamble With Physical Properties For Simulations" *Chemical Engineering Progress*, october 1996, pp35-46.
6. **CIAPETTA F. G.** "Alkylation of isoparaffins" *Ind. Eng. Chem.* Vol. 37, No. 12, Dec. 1945, pp 1210-1216.
7. **Corma A., Martínez A.** "Chemistry, Catalysts, and Processes for Isoparaffin-Olefin Alkylation: Actual Situation and Future Trends". *Catal. REV-SCI. ENG.* 35 pp 483-524.
8. **Cupit C. R., Gwyn J. E., & Jernigan E. C.**, "Catalytic Alkylation" *Petro/Chem Eng.* December 1961 Parte 1, pp 43-55
9. **Cupit C. R., Gwyn J. E., & Jernigan E. C.**, "Catalytic Alkylation" *Petro/Chem Eng.* January 1962 Parte 2, pp 49-59.
10. **Henley E. J., Seader J. D.** "Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química" *EDITORIAL REVERTÉ, S.A.* 1988 Cap. 5, pp 230-232.
11. **Hutson T., Hays G. E.** "Reaction Mechanisms for Hydrofluoric Acid Alkylation" *Phillips Petroleum Company, Bartlesville, OK 74004*, cap. 2, pp 27-56

- 
12. **John J. Mcketta**. Encyclopedia of Chemical Processing and Design, Vol 2 pp357-387
  13. **Satterfiel C. N.** "Catálisis Heterogéneo" Mc Graw-Hill Book Company 1980 cap. 3, pp42-45
  14. **Sheckler C. J., Shah B. R.** "UOP HF Alkylation Technology" Cap.1.4, pp1.31-1.38.
  15. **SPROW, F. B.** "Role of interfacial area in sulfuric acid alkilation" I & EC PDD, Vol. 8 No.2 apr. 1969, pp 254-257.
  16. **Stefanidakis G., Gwyn J. E.** "Alkylation" pp 357-387.

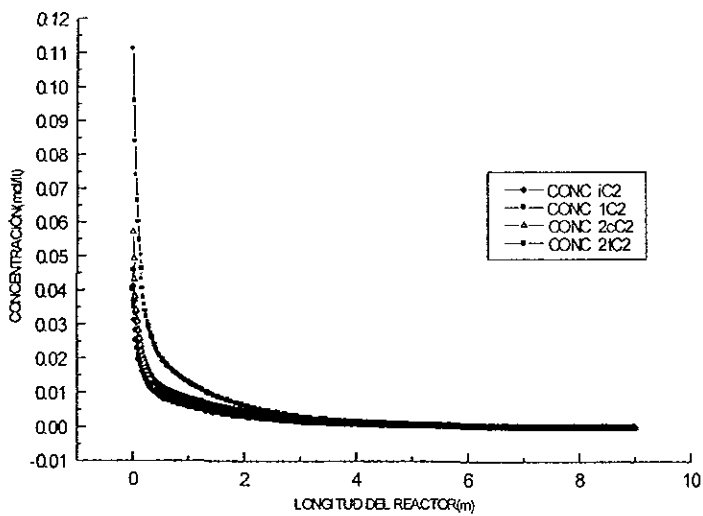
## APÉNDICE 8.1 PERFILES DE REACTIVOS Y PRODUCTOS

El sistema de ecuaciones diferenciales se resolvió utilizando el método de Runge Kutta de cuarto orden, para la obtención de los perfiles de concentración respecto a la longitud del reactor, y puesto que el isobutano es más soluble en el HF que los butilenos y reactivo en exceso, se considera el coeficiente de transferencia para el isobutano.

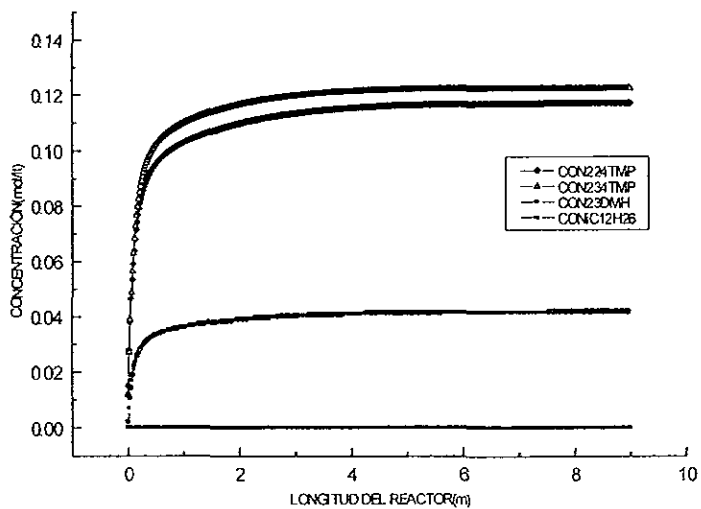
### PERFILES DE REACTIVOS Y PRODUCTOS



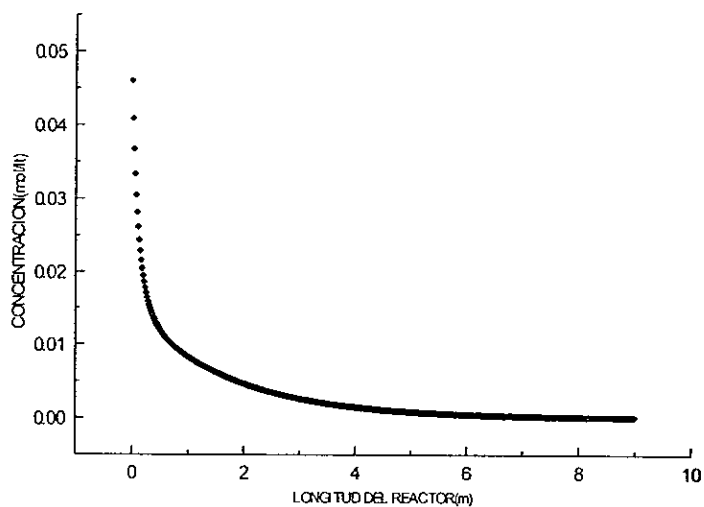
## PERFIL DE REACTIVOS



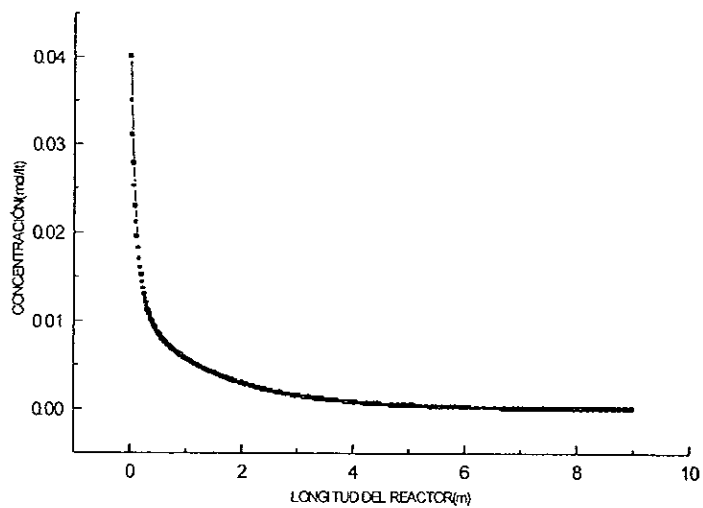
## PERFIL DE PRODUCTOS



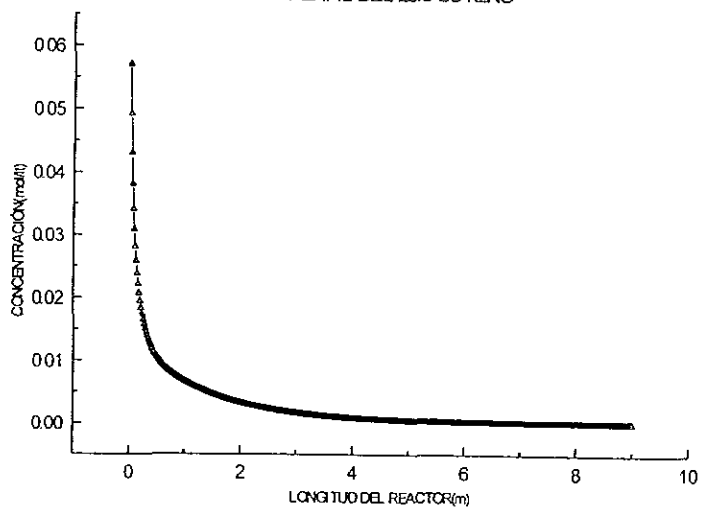
PERFIL DEL ISOBUTENO



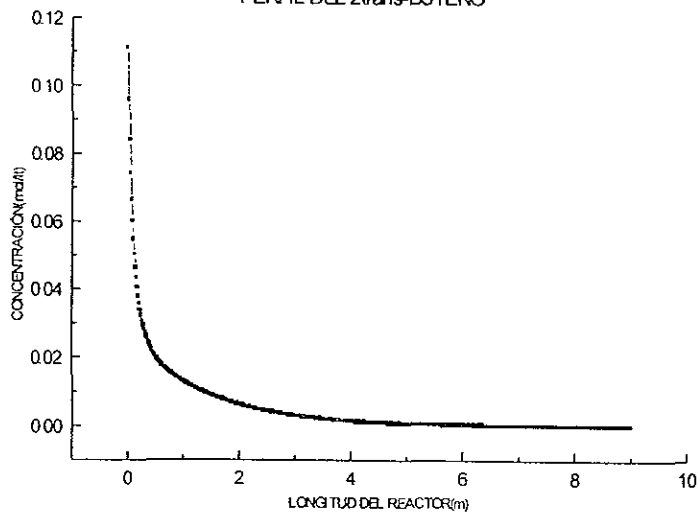
PERFIL DEL 1-BUTENO

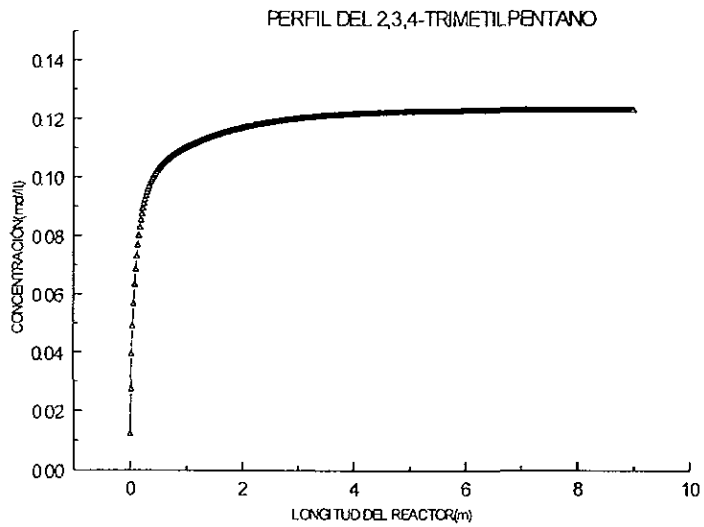
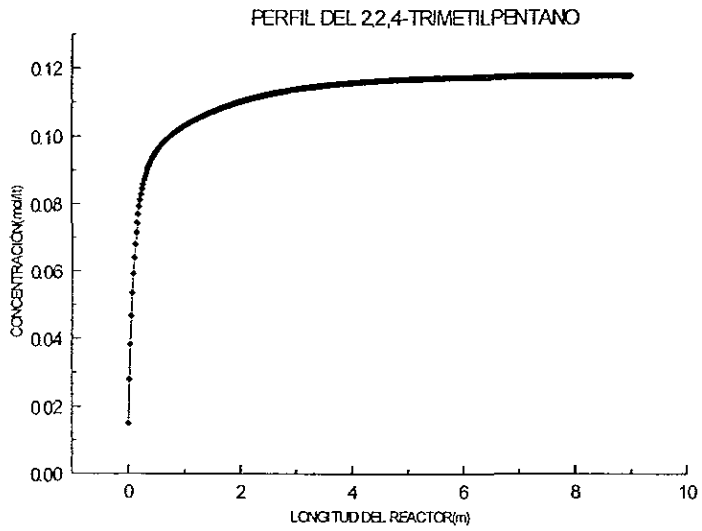


PERFIL DEL 2cis-BUTENO



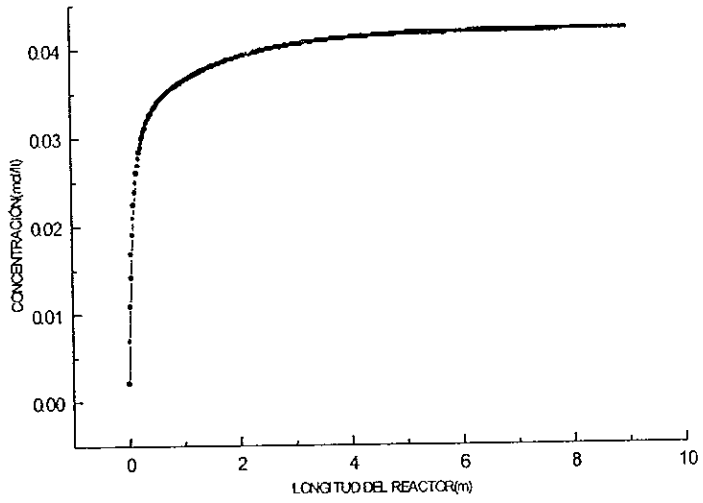
PERFIL DEL 2trans-BUTENO



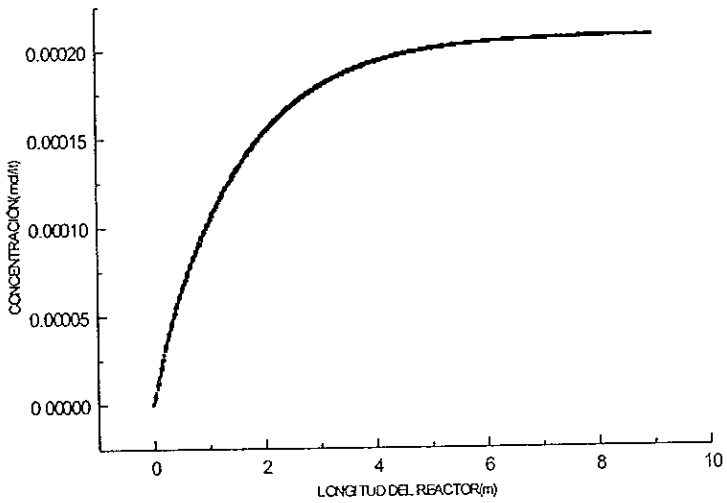




PERFIL DEL 2,3-DIMETILHEXANO



PERFIL DEL C<sub>12</sub>H<sub>26</sub>(ASA)



**APÉNDICE 8.2 Análisis típico de la carga a reacción.**

COMPONENTE	% VOLUMEN
PROPANO	2.7
PROPILENO	0.0
ISOBUTANO	41.9
N-BUTANO	18.7
1-BUTENO	7.9
ISOBUTENO	1.5
2-TRANS BUTENO	16.2
2-CIS BUTENO	11.2
AMILENOS	0.0
BUTADIENO	0.0

## APÉNDICE 8.3 DATOS DE LAS CORRIENTES DE ALIMENTACIÓN

CORRIENTE	1 REAL(PUNTUAL)	2 REAL(PUNTUAL)
	OLEFINAS	ISOBUTANO
EQUIPO:	A ME-202	A ME-202
FASE	LIQUIDO	LIQUIDO
COMPONENTES		
FLUJO MASA KG/HR		
ÁCIDO FLUORHIDRICO	0.000000	286.000000
PROPANO	0.000000	4235.000000
ISOBUTENO	925.999900	0.000000
1-BUTENO	1555.000000	0.000000
2C-BUTENO	1944.000000	0.000000
2T-BUTENO	2407.000000	0.000000
ISOBUTANO	6645.000000	93835.990000
N-BUTANO	5035.000000	14994.000000
2,3-DIMETILHEXANO	0.000000	32.000000
2,3,4-TRIMETILPENTANO	0.000000	538.000000
2,2,4-TRIMETILPENTANO	0.000000	538.000000
ASA	0.000000	0.000000
AGUA	0.000000	0.000000
Flujo Total KMOL/HR	322.718000	1992.430000
Flujo Total KG/HR	18512.000000	1.144590E+05
Flujo Total PIE /HR	32.548540	208.564600
Temperatura °C	30.800010	30.800010
Presión BAR	13.240000	13.500000
Entalpia MMKCAL/HR	-8.017284	-71.996810

## APÉNDICE 8.4 DATOS DE LAS CORRIENTES DE ALIMENTACIÓN(DISEÑO)

CORRIENTE	1 DISEÑO	2 DISEÑO
	BUTILENOS	ISOBUTANO
EQUIPO	A ME-202	A ME-202
FASE	LIQUIDO	LIQUIDO
Temperatura °C	37.800000	37.800000
Presión BAR	14.220000	13.530000
Fracción Vapor	0.000000	0.000000
Flujo Molar KMOL/HR	351.511000	1642.709000
Flujo Masa KG/HR	20152.398000	94361.791000
Flujo Volumétrico PIE /HR	36.102000	174.886000
Entalpia MMKCAL/HR	-8.532000	-58.904000
Flujo Masa KG/HR		
ACIDO FLUORHIDRICO	0.000000	239.500000
ETANO	0.000000	0.000000
PROPILENO	0.000000	0.000000
PROPANO	0.000000	3510.500000
ISOBUTANO	8676.399000	77322.297000
N-BUTANO	3663.000000	12363.299000
ISOBUTENO	1421.000000	0.000000
1-BUTENO	1244.000000	0.000000
2C-BUTENO	1776.000000	0.000000
2T-BUTENO	3368.000000	0.000000
2M1-BUTENO	0.000000	0.000000
2M2-BUTENO	0.000000	0.000000
1-PENTENO	0.000000	0.000000
2-PENTENO	0.000000	0.000000
2T-PENTENO	0.000000	0.000000
2,3-DIMETILHEXANO	0.000000	26.200000
2,2,4-TRIMETILPENTANO	2.000000	450.000000
2,3,4-TRIMETILPENTANO	2.000000	450.000000
ASA	0.000000	0.000000
AGUA	0.000000	0.000000

APÉNDICE 8.4 DATOS DE LAS CORRIENTES DE ALIMENTACIÓN(DISEÑO)  
(CONTINUACIÓN)

CORRIENTE	11 DISEÑO	12 DISEÑO
	HF DE TORRE	HF DEL ACUM. DE
EQUIPO	REPAS.DA-203	FRACC. DA-204
FASE	VAPOR	LIQUIDO
Temperatura °C	146.100000	43.300000
Presión BAR	10.340000	9.420000
Fracción Vapor	1.000000	0.000000
Flujo Molar KMOL/HR	73.983000	48.935000
Flujo Masa KG/HR	2560.200000	1011.900000
Flujo Volumétrico PIE /HR	249.410000	1.152000
Entalpia MMKCAL/HR	-3.746000	-3.233000
Flujo Masa KG/HR		
ACIDO FLUORHIDRICO	894.400000	951.800000
ETANO	0.000000	0.000000
PROPILENO	0.000000	0.000000
PROPANO	43.500000	59.600000
ISOBUTANO	1348.300000	0.500000
N-BUTANO	216.100000	0.000000
ISOBUTENO	0.000000	0.000000
1-BUTENO	0.000000	0.000000
2C-BUTENO	0.000000	0.000000
2T-BUTENO	0.000000	0.000000
2M1-BUTENO	0.000000	0.000000
2M2-BUTENO	0.000000	0.000000
1-PENTENO	0.000000	0.000000
2-PENTENO	0.000000	0.000000
2T-PENTENO	0.000000	0.000000
2,3-DIMETILHEXANO	1.400000	0.000000
2,2,4-TRIMETILPENTANO	8.500000	0.000000
2,3,4-TRIMETILPENTANO	8.500000	0.000000
ASA	19.700000	0.000000
AGUA	19.800000	0.000000