



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

SIMULACION Y PROPUESTA DE MEJORAS
A LA PLANTA HIDRODESULFURADORA
DE NAFTAS DE LA REFINERIA DE TULA,
HIDALGO

T E S I S
Que para obtener el Título de
INGENIERO QUIMICO
p r e s e n t a

Arturo Mauricio Cervantes Peredo



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN
MEXICO, D. F.

1993



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está 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.

INDICE

CAPITULO 1. INTRODUCCION	1.1
CAPITULO 2. GENERALIDADES	2.1
A. Antecedentes	2.2
B. Diseño de Procesos	2.2
C. Simulación de procesos	2.5
D. Enfoques de los sistemas de simulación	2.8
E. Enfoque basado en las ecuaciones	2.8
F. Enfoque modular	2.9
CAPITULO 3. SIMULADOR ASPEN PLUS	3.1
A. Introducción	3.2
B. Generalidades	3.3
C. Modelos	3.6
D. Ecuaciones para el cálculo de propiedades	3.8
E. Bancos de datos	3.10
F. Algoritmos de convergencia	3.11
G. Soporte computacional	3.12
H. Interfase con el usuario	3.13
CAPITULO 4. PROCESOS DE HIDRODESULFURACION	4.1
A. Introducción	4.2
B. Cargas a hidrodesulfuradoras	4.4
C. Reacciones	4.5
D. Catalizador	4.7
E. Cinética	4.10
CAPITULO 5. PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS DE TULA, HIDALGO	5.1
A. Generalidades	5.2
B. Especificaciones de las alimentaciones	5.3
C. Descripción del proceso	5.4

CAPITULO 6. SIMULACION DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS	6.1
A. Pasos a seguir en una simulación	6.2
1. Definición del problema	6.2
2. Selección de unidades	6.3
3. Selección de componentes	6.4
4. Elección de los modelos termodinámicos	6.5
5. Especificación de la topología del proceso	6.7
6. Determinación de las corrientes de corte	6.9
7. Definición de las corrientes de alimentación y de corte	6.9
8. Elección del modelo a utilizar para cada operación unitaria	6.10
9. Especificación de los parámetros para cada modelo	6.11
10. Selección de los métodos de convergencia	6.13
B. Programa de entrada para la simulación	6.20
C. Resultados de la simulación	6.27
CAPITULO 7. ANALISIS DE TRABAJO PERDIDO Y PROPUESTA DE MEJORAS DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS	7.1
A. Trabajo perdido	7.2
B. Cálculo de trabajo perdido	7.4
C. Trabajo perdido en proceso actual	7.6
D. Modificaciones al proceso	7.8
E. Simulación del proceso modificado	7.11
F. Análisis de las propuestas	7.22
CAPITULO 8. CONCLUSIONES	8.1
A. Simulación de la planta hidrodesulfuradora de naftas	8.2
B. Propuesta de mejoras	8.3
C. Trabajos futuros	8.5
BIBLIOGRAFIA	B.1

NOMENCLATURA

a_1 y a_2 : fracciones de compuestos con azufre
 c_{s_2} : concentración de compuestos con azufre
Ef: eficiencia de Carnot
He: entalpía de la corriente de entrada
Hs: entalpía de la corriente de salida
H-ToS: entalpía de la corriente menos temperatura ambiente por entropía de la corriente
 k_1 , k_2 y k_3 : constantes de rapidez de reacción
 K_{ar} : constante de adsorción para aromáticos
 K_{HS} : constante de adsorción del ácido sulfhídrico
 K_T : constante de adsorción del tiofeno
me: flujo de la corriente de entrada
ms: flujo de la corriente de salida
 P_{ar} : presión parcial de aromáticos
 P_{HS} : presión parcial del ácido sulfhídrico
PM prom: peso molecular promedio de la mezcla
 P_T : presión parcial del tiofeno
Q: calor
R: reflujo
 r_{HS} : rapidez de reacción de la hidrodesulfuración
Rmin: reflujo mínimo
Se: entropía de la corriente de entrada
Ss: entropía de la corriente de salida
Tf: temperatura de fuente térmica
To: temperatura ambiente
W: trabajo mecánico
We: trabajo equivalente
Wemin: trabajo equivalente mínimo
Wp: trabajo perdido

Notación para componentes:

H2: hidrógeno	H2S: ácido sulfhídrico
CH4: metano	C2H6: etano
C3H8: propano	i-C4H10: isobutano
C4H10-1: butano normal	2MC4: 2-metil butano
22DMC3: 2,2-dimetil propano	n-C5H12: pentano normal
22DMC4: 2,2-dimetil butano	3MC5: 3-metil pentano
2MC5: 2-metil pentano	n-C6H14: hexano normal
n-C7H16: heptano normal	n-C8H18: octano normal
n-C9H20: nonano normal	n-C10H22: decano normal
n-C11H24: undecano normal	MCC5: metil ciclopentano
CC6: ciclohexano	MCC6: metil ciclohexano
ETMERC: etil mercaptano	MEETSUL: sulfuro de metil etilo
DETSUL: sulfuro de dietilo	HEXANO+: hexano + pesados

CAPITULO 1

INTRODUCCION

La industria química mexicana, como es conocido, atraviesa actualmente una etapa de reconversión, en donde los procesos existentes requieren ser modificados para poder lograr un nivel de competitividad adecuado a nivel internacional. Esta reconversión de procesos, que debe ser planeada y organizada, es indudablemente tarea del ingeniero químico y en especial del ingeniero de procesos.

Ante esta perspectiva, el ingeniero de procesos requiere actualmente de herramientas modernas que le permitan realizar su trabajo de forma eficiente. Los simuladores de proceso comerciales resultan ser una de estas herramientas, ya que mediante su utilización adecuada, reducen el tiempo de trabajo y permiten llegar a los resultados deseados fácilmente.

El presente trabajo constituye un ejemplo de cómo los simuladores de proceso comerciales, especialmente Aspen Plus, representan una herramienta poderosa para el ingeniero de procesos en la resolución de problemas de la industria, no sin antes recalcar los principios y los aspectos generales de la simulación y del simulador Aspen Plus.

El capítulo 2 contiene aspectos generales sobre ingeniería de procesos y simulación. En él, se explican las etapas del diseño de procesos, se definen algunos conceptos básicos sobre simulación, y se hace un resumen de los diferentes enfoques que existen actualmente en la simulación de procesos en estado estacionario, recalcando los fundamentos del enfoque modular secuencial.

Debido a que el simulador de procesos Aspen Plus constituyó una herramienta fundamental en el presente trabajo, en el capítulo 3 se hace una descripción del mismo, explicándose cada

una de sus partes principales. Este capítulo se puede utilizar, junto con el anterior, como guía general en la utilización del simulador Aspen Plus.

En el capítulo 4 se presenta una descripción general de los procesos de hidrodesulfuración, la cual sirve para recalcar la importancia de este tipo de procesos y proporcionar las bases para la realización de la simulación.

El capítulo 5 es la descripción del proceso de la hidrodesulfuradora de naftas de la refinería Miguel Hidalgo. En él, se describe el proceso actual en su totalidad para lograr un mejor entendimiento de éste.

La simulación del proceso de hidrodesulfuración de naftas de la refinería de Tula se encuentra en el capítulo 6, en donde se presentan los pasos a seguir en la realización de una simulación tomando como ejemplo el presente trabajo. El capítulo también incluye los resultados de la simulación en aspen Plus, así como una comparación entre éstos y los datos de diseño de la planta.

En el capítulo 7 se hace un análisis de trabajo perdido en el proceso actual, para a partir de estos resultados proponer las mejoras al proceso y volver a realizar el mismo análisis con el proceso modificado. en la parte final del capítulo se hace un estudio económico de las mejoras, comparando el consumo de servicios auxiliares entre el proceso actual y el modificado.

Por último, en el capítulo 8 se analizan los resultados obtenidos tanto en la simulación, como en la propuesta de mejoras y se presentan las conclusiones derivadas de éste análisis.

CAPITULO 2

GENERALIDADES

A. ANTECEDENTES

La ingeniería de procesos surge a partir de la segunda mitad de este siglo como resultado de la implementación de nuevas técnicas y procedimientos de cálculo, que permitieron abandonar el enfoque empírico para dar lugar al científico. De esta forma se reordenaron los conocimientos y se fijaron las pautas para el diseño de nuevos procesos.

En la actualidad, se puede decir, que la ingeniería de procesos se encarga de la planeación, diseño, operación y control de cualquier operación unitaria o proceso químico.

Así como nace la ingeniería de procesos, también surgen las computadoras y son aplicadas a ésta como herramienta en el desarrollo de nuevas metodologías de cálculo. En sus inicios la computadora era utilizada para la solución de operaciones simples dentro de un proceso, pero en la actualidad el gran desarrollo de software hace posible su utilización en procesos complejos.

B. DISEÑO DE PROCESOS

La transformación de materia prima en producto se da gracias a la adecuada comprensión de las operaciones unitarias y de los fenómenos fundamentales que los rigen. Los procesos químicos, al estar compuestos por varias operaciones unitarias, requieren de un estudio detallado de combinaciones y secuencias que sean factibles tanto técnica como económicamente, por lo que es necesario llevar a cabo el diseño del proceso.

El diseño de procesos se puede dividir en tres subsistemas: síntesis, análisis y optimización. Ver figura 2.1.

Síntesis. A partir de una situación existente, estando presentes tanto una necesidad social como una oportunidad económica, se conciben una serie de ideas que involucran materias primas y una secuencia de operaciones que logren su transformación en los productos deseados.

En esta etapa se deciden las unidades de proceso requeridas y su interconexión, es decir, se proponen tanto la estructura, como los flujos de materia y energía, necesarios para obtener los productos deseados.

Análisis. Una vez elegida cierta estructura de proceso, la siguiente etapa es la evaluación tanto de su viabilidad técnica como económica. A partir de la estructura de proceso propuesta, se establecen sus bases de diseño y la estrategia de diseño, la cual incluye la estimación inicial de los valores para las variables de diseño no fijadas. También se procede a elegir los métodos de cálculo y criterios de convergencia adecuados para desarrollar el balance de materia y energía.

Con los resultados de éstos cálculos es posible hacer un estudio económico preliminar. En él se deben incluir aspectos como el capital requerido, la rentabilidad, los costos de operación, etc.

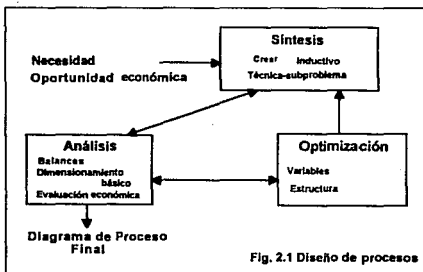
El análisis del proceso consiste en descomponer el sistema propuesto en la etapa de síntesis en varios subsistemas, definiendo las relaciones entre cada uno de ellos. Es importante saber

descomponer el sistema ya que, al estar formado de muchos elementos, se puede llegar a generar un número grande de subsistemas, lo cual hace casi imposible su manejo.

Optimización. A partir de la información obtenida en las etapas de síntesis y análisis, se establece una estrategia de optimización, aplicada a una función objetivo.

La optimización se puede llevar a cabo tanto en la estructura del proceso como en los parámetros de éste. Cuando se evalúan los datos de la etapa de análisis, usualmente se descubre que ciertos niveles en las condiciones de operación pueden influir profundamente en el dimensionamiento del equipo, en su operación, etc., por lo tanto, se conserva la estructura propuesta en la etapa de síntesis y únicamente se varían los parámetros de diseño y operación.

En algunas ocasiones se puede decidir alterar el número y tipo de equipos, así como su interconexión, a fin de mejorar el proceso propuesto o porque el anterior arreglo resulta muy costoso.



C. SIMULACION DE PROCESOS

La simulación de procesos es la representación matemática de un proceso mediante modelos adecuados, bajo ciertas restricciones definidas anteriormente. La simulación de un proceso puede ser dinámica o en estado estacionario. La primera se refiere a la consideración de situaciones de arranque y paro, y fluctuaciones en las corrientes de alimentación y proceso.

La simulación en estado estacionario se enfoca al estudio del comportamiento de un proceso contemplando situaciones dentro de los límites considerados como normales en su diseño y operación. Su tarea principal es el cálculo detallado del balance de masa y energía del proceso, en base al cual se realizará el dimensionamiento de equipo y la evaluación económica.

Un sistema de simulación es un programa de computadora que, utilizando información sobre un proceso químico a nivel de detalle de diagrama de flujo, es capaz de realizar análisis útiles en su operación y diseño. La ventaja de utilizar sistemas de simulación en el diseño de procesos es el considerable ahorro de tiempo y recursos de ingeniería, es decir, se pueden considerar mayores alternativas de diseño y el proceso creado puede ser más eficiente.

Un sistema de simulación aborda la solución de dos tipos de problemas: 1) Problema de simulación; en este caso, las variables asociadas a las corrientes de alimentación y los parámetros de funcionamiento de cierto equipo son especificados y los perfiles de las variables dependientes y/o la información de las corrientes de salida son calculadas. Se enfoca al estudio del comportamiento de un proceso ya conocido. 2) Problema de simulación controlada o diseño; algunos de los parámetros de equipo deberán ser ajustados con el objeto

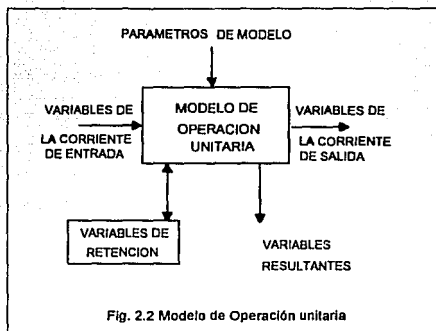
de satisfacer las especificaciones de diseño, por tanto, el número de variables a ser ajustadas será igual al número de especificaciones de diseño impuestas.

Para que el sistema de simulación proporcione esta importante función es necesario que disponga de los siguientes elementos: modelos, algoritmos, soporte computacional (software y hardware) y una interfase con el usuario.

Los modelos de un proceso químico usados por un sistema de simulación son relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, correlaciones de propiedades, relaciones de conexión y restricciones de diseño y control. Los modelos toman la forma de ecuaciones diferenciales y algebraicas, que describen los fenómenos que ocurren en el proceso.

El más importante requerimiento del modelo es que sea apropiado a su uso en términos de rigurosidad, descripción, nivel de detalle, precisión, validez y generalidad, es decir, lo realmente importante en un modelo es su capacidad descriptiva de la realidad. El núcleo de un sistema de simulación está constituido por los modelos de las operaciones unitarias, cuya estructura general es la mostrada en la figura 2.2.

Las variables de las corrientes de entrada y los parámetros del modelo, es aquella información que es necesaria para el funcionamiento del modelo y queda determinada por el número de grados de libertad de la operación unitaria. Las variables de las corrientes de salida son aquellas características y propiedades de las corrientes, que nos proporciona el modelo a partir de la solución de las ecuaciones diferenciales y algebraicas, como son: presión, composición, flujo, entalpía, fracción de vapor, etc.



Las variables resultantes son también generadas de la solución de ecuaciones, pero éstas se refieren a características de la operación unitaria como son: potencia de una bomba, carga térmica de un intercambiador, etc. Por último las variables internas o de retención son aquellas que utiliza el modelo para calcular las resultantes y las de salida.

Los algoritmos operan sobre los modelos para producir los resultados deseados. Estos incluyen la solución de ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales y programación no lineal y deben de ser eficientes y tan generales como sea posible.

El soporte computacional incluye todos los recursos necesarios para implementar los algoritmos en una computadora. Se incluyen dentro de esta categoría: programas, lenguajes de programación, estructuras de datos, interfases con el sistema de archivos y arquitectura del sistema.

La interfase con el usuario incluye el protocolo de acceso al sistema, el lenguaje de entrada para el usuario, la documentación para el uso del sistema y los protocolos para la interacción con otros programas.

D. ENFOQUE DE LOS SISTEMAS DE SIMULACION

El problema matemático más importante en la simulación de proceso es la solución de grandes sistemas de ecuaciones. Prácticamente, cualquiera que sea la orientación adoptada, el número y tipo de ecuaciones que describen el proceso son iguales; la diferencia estriba en la forma de manejar y resolver estos sistemas.

Es así como las diferentes formas de explotar los recursos para la solución de ecuaciones, conduce a diferentes orientaciones en la simulación.

- 1) Enfoque basado en las ecuaciones.
- 2) Enfoque modular. Secuencial y simultánea.

E. ENFOQUE BASADO EN LAS ECUACIONES

En el enfoque basado en las ecuaciones un proceso químico es modelado mediante la reunión de todas las ecuaciones que lo describen como son: operaciones unitarias, corrientes de conexión y especificaciones de diseño; y son resueltas simultáneamente como un gran sistema de ecuaciones no lineales. Los simuladores con enfoque hacia las ecuaciones

requieren de procedimientos que generen y representen las ecuaciones que describen el proceso por completo.

El enfoque orientado a las ecuaciones es bastante flexible ya que toda la información es manejada a nivel de proceso en forma de ecuaciones y variables, por lo que no existen problemas de flujo de información.

A pesar de que los métodos enfocados a las ecuaciones prometen una rápida convergencia y una formulación más natural del problema de diseño, aún no han sido aplicados en forma eficiente en los simuladores comerciales por presentar varias desventajas: 1) Este enfoque es muy rígido en cuanto a la elección del sistema de ecuaciones que se deben resolver, siendo muy frecuente la aparición de inconsistencias termodinámicas, lo cual impide la solución del sistema, o bien, conduce a soluciones inexistentes. 2) Para su operación requiere de estimados iniciales razonables, los cuales son prácticamente imposibles de obtener sin realizar un recorrido secuencial a través del proceso.

F. ENFOQUE MODULAR

En el enfoque modular un proceso químico es representado por la unión de un conjunto de módulos, cada uno describiendo un cierto tipo de operación unitaria. Los cálculos involucrados en la solución de los sistemas de ecuaciones no lineales que describen el proceso pueden ser comprendidos tanto a nivel de diagrama de flujo, como a nivel de cada módulo.

En los cálculos a nivel módulo, las ecuaciones son resueltas con el objeto de determinar los valores de las variables de salida, a partir de los valores conocidos de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de equipo. Por otro lado, a nivel de diagrama de flujo, se resuelven las ecuaciones que describen la conexión entre cada módulo y las especificaciones de diseño.

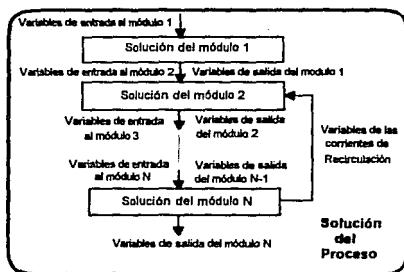


Fig. 2.3 Enfoque modular

En este enfoque los valores de las variables de las corrientes de salida de un módulo, sirven como valores de entrada al siguiente.

Existen dos tendencias dentro del enfoque modular: el enfoque modular simultáneo y el enfoque modular secuencial.

Enfoque modular secuencial

En este enfoque se resuelven los módulos unitarios siguiendo la secuencia de flujo del proceso, por lo que el esquema de cálculo está fijado por la topología del proceso.

La solución de los diferentes módulos se lleva a cabo considerándolos como un problema de simulación, sin embargo, cuando se llega a una corriente de recirculación sus variables son supuestos y se inicia un ciclo iterativo en el que se emplean diferentes tipos de algoritmos para su convergencia.

Los valores de salida de un módulo se transfieren como valores de entrada al siguiente, siguiendo el flujo del proceso. Los datos de las corrientes de entrada y los parámetros de equipo se transfieren directamente al módulo que los requiera.

Las especificaciones de diseño no pueden ser introducidas directamente, por lo que este tipo de problemas deben ser resueltos mediante una simulación iterativa, en la cual el proceso es simulado en forma repetitiva hasta que las especificaciones de diseño son satisfechas.

A pesar de la eficiencia de los cálculos a nivel de módulo unitario, el esquema de cálculo a nivel de proceso, puede ser ineficiente debido a la presencia de múltiples recirculaciones.

La forma en que un simulador secuencial maneja este tipo de problemas es suponiendo valores iniciales para las corrientes de recirculación, que se convierten en corrientes de corte, e iterando sobre estos valores hasta obtener la convergencia entre los valores supuestos y los valores calculados, dentro de cierta tolerancia. Cada iteración implica la ejecución secuencial

de todos los módulos unitarios comenzando en que tiene como entrada la corriente de corte y terminando en este mismo.

Los valores de la corriente de corte son mejorados al terminar cada iteración mediante el uso de métodos de convergencia que resuelven ecuaciones de la forma:

$$Y(K) = F(K+1) - F(K) = \text{tolerancia}$$

En donde $F(K)$ es el valor supuesto de la corriente de corte, $F(K+1)$ es el valor calculado de la corriente después de haber realizado una iteración completa y $Y(K)$ la diferencia entre ambas que debe alcanzar un valor igual a la tolerancia para dicha corriente.

De esta forma, los valores de $F(K+1)$ son corregidos por el método de convergencia igualando la tolerancia a cero.

Cuando existen múltiples corrientes de corte, todas ellas se deben de hacer converger en un mismo bloque, o por separado. El problema se complica por el hecho de que las especificaciones de diseño son tratadas como ciclos de recirculación adicionales.

Otro factor que afecta la eficiencia de este enfoque es la presencia múltiples ciclos anidados. Los ciclos de control, con los que se logra la convergencia de las especificaciones de diseño, son los que se encuentran en la parte más externa. Inmediatamente, dentro de los ciclos de control se encuentran los ciclos necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de corte y dentro de los ciclos de corte están los ciclos propios de cada operación unitaria.

Existe aún un tercer problema, que tiene que ver con las actuales perspectivas que existen en la simulación de procesos, y se refiere a implementar la optimización del proceso como otra tarea del simulador. Al emplear el enfoque modular secuencial, la optimización se implementa agregando otro ciclo iterativo externo, lo que acrecenta el problema de convergencia.

A pesar de las anteriores desventajas, los simuladores modulares secuenciales son actualmente los más utilizados para aplicaciones comerciales, y puesto que existen demasiados recursos invertidos en su desarrollo no se prevé abandonar su uso por lo menos al corto plazo.

Enfoque modular simultáneo

Bajo este enfoque las ecuaciones de las corrientes de conexión y las especificaciones de diseño se hacen converger simultáneamente y se utilizan dos tipos de modelos: simples y rigurosos.

Los modelos rigurosos son usados para determinar parámetros que posteriormente serán usados por los modelos simples. Estos últimos son modelos aproximados que requieren una menor cantidad de recursos computacionales para su solución. Una vez resuelto el modelo simple se obtienen valores aproximados de todas las variables de las corrientes, con los que se verifica la convergencia; de no obtenerse, se pueden cambiar los parámetros de los modelos aproximados o llamar nuevamente a los modelos riguroso para obtener valores más precisos

CAPITULO 3

SIMULADOR ASPEN PLUS

A. INTRODUCCION

A principios de la década de los sesenta la compañía Monsanto, reuniendo algunos modelos de operaciones unitarias, crea el primer sistema de simulación de procesos capaz de llevar a cabo rutinas de simulación y cálculo de propiedades. Es así, como en 1966 surge FLOWTRAN "Flowsheet Translator" (traductor de diagramas de proceso), el cual se ofrece como servicio al público tres años más tarde.

En 1976, FLOWTRAN es seleccionado por el Instituto Tecnológico de Massachusetts y licenciado a éste para servir de base en el desarrollo de ASPEN "Advanced System for Process Engineering" (Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos). Su desarrollo fue financiado por el departamento de Energía de Estados Unidos para su utilización en la industria de combustibles fósiles y carbón.

Los simuladores anteriores a ASPEN fueron desarrollados para procesos específicos y para corrientes líquido-vapor, el concepto ASPEN se creó para dar servicio a una gran variedad de industrias y permitir la utilización de sólidos como el carbón natural. El sistema se diseñó para tener una gran flexibilidad en su manejo, ya que permite la introducción de nuevos modelos y tipos de procesos.

Después de ser puesta a prueba la primera versión de Aspen, en más de cincuenta compañías, surge en 1983 ASPEN PLUS con más de 600 nuevas subrutinas; ésta es una nueva versión expandida, mejorada y soportada comercialmente, con mayor calidad, eficiencia y facilidad en su uso.

A partir de 1983, se han creado nuevas versiones de ASPEN PLUS; la versión que se utilizó para la realización de este trabajo es la 8.5-4 adquirida por la Facultad de Química en febrero de 1993.

B. GENERALIDADES

Aspen Plus es un simulador que utiliza el enfoque modular secuencial, por lo que está compuesto por las mismas partes descritas en el capítulo anterior. Lo que hace diferente a Aspen con respecto a otros simuladores comerciales es que estos últimos utilizan arreglos predimensionados para almacenar las variables de un proceso, por lo que aunque resultan útiles para algunos problemas específicos, no tienen ninguna versatilidad.

Por su parte, Aspen utiliza otra forma de almacenamiento de variables llamada estructura plex capaz de almacenar un número ilimitado de variables. Las estructuras plex son arreglos unidimensionales de longitud indefinida en donde no solo se almacenan datos sino también los identificadores de estos, de ésta forma se tiene un arreglo en donde el primer elemento es un identificador y el que le sigue un valor, alternados en número ilimitado.

Este tipo de estructuras hacen que Aspen sea uno de los simuladores más versátiles, ya que le permite almacenar gran cantidad de información, manejar diferentes fases en una misma corriente (sólido-líquido-vapor) e introducir nuevos modelos fácilmente.

En la figura 3.1 se puede observar la forma en que trabaja Aspen Plus, así como el flujo de información en el sistema.

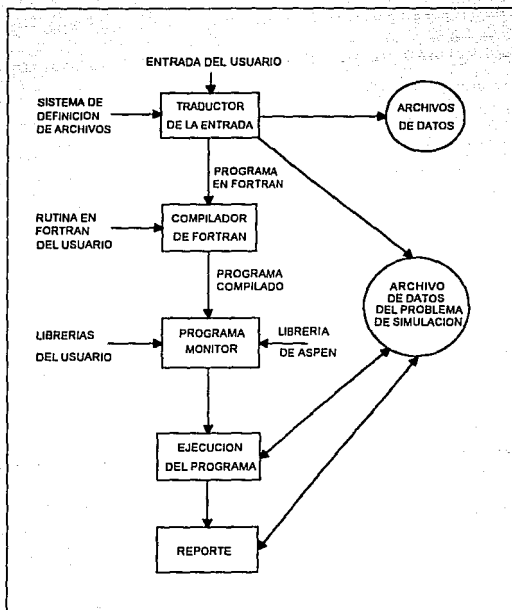


Fig. 3.1 Flujo de información en Aspen Plus.

El usuario proporciona la información del proceso a simular por medio de un archivo en ASCII (input), el cual se encuentra en un lenguaje y formato especial. Un traductor crea un programa en FORTRAN a partir de esta información para después ser compilado. Es importante resaltar que el usuario puede suministrar información directamente en FORTRAN, por lo que ASPEN permite crear al usuario sus propios modelos.

Una vez que el programa ha sido compilado el simulador crea la secuencia de cálculo, relaciona los modelos de operaciones unitarias, genera las interconexiones entre operaciones, obtiene de las librerías la información necesaria, etc., es decir, genera la metodología de la simulación por medio de un programa monitor.

Creada la metodología se lleva a cabo la simulación del proceso, para después generar un reporte. Tanto la traducción del input, como la ejecución del programa y el reporte se introducen al archivo de datos de la simulación, en donde se registran los resultados así como los posibles problemas que puedan surgir durante la simulación y la traducción del input.

A continuación se describirán algunas de los aspectos más importantes del simulador, como son modelos de operaciones unitarias, ecuaciones para cálculo de propiedades, algoritmos de convergencia y bancos de datos.

C. MODELOS

Aspen Plus cuenta con una gran cantidad de modelos que son capaces de representar casi todas las operaciones unitarias que se llevan a cabo en cualquier planta de proceso, incluyendo procesos en los que se manejan sólidos. Una característica importante de todos estos modelos es que admiten la entrada de corrientes en cualquier estado físico, así como de corrientes de trabajo y calor. Cada modelo de operación unitaria tiene su propio lenguaje de entrada, pero en general la introducción de un modelo al simulador debe incluir el nombre reservado del modelo, el nombre del equipo a modelar, y sus parámetros característicos.

El nombre reservado del modelo es aquel con el que Aspen identifica a la operación unitaria a ser simulada; el nombre del equipo a modelar puede ser cualquier nombre proporcionado por el usuario para identificar dicho bloque con el diagrama de flujo de proceso; y por último, los parámetros característicos son aquellos que consumen los grados de libertad del equipo, como temperatura y presión de salida en un intercambiador.

En la tabla 3.1 se presentan los modelos existentes, los cuales incluyen tanto el modelado de procesos líquido-vapor, como el modelado de procesos con sólidos. Estos modelos no tienen ninguna limitación dimensional ya que pueden manejar cualquier número de componentes, alimentaciones, etapas, reacciones, etc. Es importante recalcar que el usuario puede introducir sus propios modelos de operaciones unitarias si dentro de los modelos existentes no existe ninguno capaz de representar la operación que se está llevando a cabo.

**TABLA 3.1 MODELOS DE OPERACIONES UNITARIAS
ASPEN PLUS**

NOMBRE	DESCRIPCION	NOMBRE	DESCRIPCION
MEZCLADORES Y SEPARADORES		REACTORES	
MIXER	MEZCLA DE CORRIENTES	RSTOIC	REACTOR ESTEQUIOMETRICO
FSPLIT	DIVISOR DE CORRIENTES	RYIELD	REACTOR CON CONVERSION
SSPLIT	DIVISOR DE SUBCORRIENTES	REQUIL	REACTOR AL EQUILIBRIO
SEP	SEPARADOR	RGIBBS	REACTOR AL EQUILIBRIO(GIBBS)
SEP2	SEPARADOR CON DOS FASES	RCSTR	TANQUE CONTINUO
CAMBIADORES Y FLASHES		RPLUG	REACTOR TUBULAR
HEATER	ENFRIADOR/CALENTADOR	RBATCH	REACTOR BATCH
FLASH2	FLASH A DOS FASES	BOMBAS Y COMPRESORES	
FLASH3	FLASH A TRES FASES	PUMP	BOMBA/TURBINA HIDRAULICA
HEATX	CAMBIADOR PROCESO/PROCESO	COMPR	COMPRESOR/TURBINA
MHEATX	CAMBIADOR DE MULTICORRIENTES	MCOMPR	COMPRESOR/TURBINA MULTIETAPA
DESTILACION CORTA		MANEJO DE SOLIDOS	
DSTWU	DESTILACION CORTA-DISEÑO	CRUSHER	TRITURADOR
DISTL	DESTILACION CORTA-APROX	SCREEN	SEPARADOR DE PARTICULAS
SCFRAC	DESTILACION CORTA-COMPLEJA	FABFL	FILTRO DE BOLSA
DESTILACION RIGUROSA		CYCLONE	CICLON
RADFRAC	DESTILACION RIGUROSA	VSCRUB	SEPARADOR VENTURI
MULTIFRAC	DESTILACION RIGUROSA	ESP	PRECIPITADOR ELECTROSTATICO
	COLUMNAS COMPLEJAS	HYCYC	CICLON HIDRAULICO
EXTRACT	EXTRACCION LIQ-LIQ.	CFUGE	CENTRIFUGA
ABSBR	ABSORBEDOR/AGOTADOR	FILTER	FILTRO
MANEJO DE CORRIENTES		SWASH	LAVADOR DE UNA ETAPA
DUPL	DUPLICADOR DE CORRIENTES	CCD	LAVADOR DE VARIAS ETAPAS
MULT	MULTIPLICADOR DE CORRIENTES		

La información más específica sobre cada uno de estos modelos se encuentra en los capítulos 10 al 16 de la guía del usuario de Aspen Plus.

D. ECUACIONES PARA CALCULO DE PROPIEDADES

Aspen Plus cuenta con varios tipos de modelos termodinámicos para el cálculo de propiedades, los cuales van desde el ideal, hasta modelos para sustancias específicas como las aminas.

Los modelos termodinámicos son la clave para obtener buenos resultados en una simulación. Aspen Plus calcula todas las propiedades termodinámicas y de transporte requeridas para simular todos los modelos de operaciones unitarias y dimensionar equipos.

Es posible utilizar modelos con coeficientes de actividad calculados por diferentes métodos, por lo que se cuenta con una gran gama de opciones al combinar ecuaciones de estado con modelos de coeficientes de actividad. Gracias a esto es posible definir el modelo preciso para cada operación unitaria a simular.

En la tabla 3.2 se pueden observar los modelos existentes para el cálculo de propiedades. En el capítulo 5 de la guía del usuario de Aspen Plus se encuentra información más detallada sobre cada uno de estos modelos.

**TABLA 3.2 MODELOS TERMODINAMICOS
ASPEN PLUS**

CLAVE	MODELO TERMODINAMICO	CLAVE	MODELO TERMODINAMICO
SYSOP0	IDEAL/LEY DE RAULT	MODELOS ESPECIALES	
	ESTADOS CORRESPONDIENTES	SYSOP12	TABLAS DE VAPOR. ASME.
SYSOP1	CHAO-SEADER	AMNES	KEINT-EISENBERG
SYSOP2	GRAYSON-STREED	APISOUR	METODO API
	ECUACIONES DE ESTADO	SYSOP15S	NRTL/CORRELACION ASME
SYSOP3	REDLICH-KWONG-SOAVE	SYSOP15	NRTL/REDLICH-KWONG-SOAVE/ CORRELACION ASME
SYSOP4	PENG-ROBINSON	SYSOP15M	NRTL/REDLICH-KWONG-SOAVE/ TABLAS ASME
SYSOP5	BWR-LEE-STARLING	SYSOP16S	PITZER/CORRELACION ASME
SYSOP6	REDLICH-KWONG-ASPEN	SYSOP16	PITZER/REDLICH-KWONG/ CORRELACION ASME
SYSOP14	PERTURBED-HARD-CHAIN	SYSOP16B	PITZER/REDLICH-KWONG/ TABLAS ASME
SYSOP17	LEE-KESLER-PLOCKER		
SYSOP18	REDLICH-KWONG-UNIFAC		
MODELOS CON COEFICIENTES DE ACTIVIDAD			
	UNIFAC		WILSON
SYSOP7	REDLICH-KWONG	SYSOP8	REDLICH-KWONG
SYSOP7A	REDLICH-KWONG/LEY DE HENRY	SYSOP8A	REDLICH-KWONG/LEY DE HENRY
SYSOP7B	NOTHNAGEL	SYSOP8B	NOTHNAGEL
SYSOP7C	NOTHNAGEL/LEY DE HENRY	SYSOP8C	NOTHNAGEL/LEY DE HENRY
SYSOP7D	HAYDEN-O'CONNELL	SYSOP8D	HAYDEN-O'CONNELL
SYSOP7E	HAYDEN-O'CONNELL/LEY DE HENRY	SYSOP8E	HAYDEN-O'CONNELL/LEY DE HENRY
SYSOP7L	LIQUIDOLIQUIDO/REDLICH-KWONG		
	VAN LAAR		NRTL
SYSOP9	REDLICH-KWONG	SYSOP10	REDLICH-KWONG
SYSOP9A	REDLICH KWONG/LEY DE HENRY	SYSOP10A	REDLICH-KWONG/LEY DE HENRY
SYSOP9B	NOTHNAGEL	SYSOP10B	NOTHNAGEL
SYSOP9C	NOTHNAGEL/LEY DE HENRY	SYSOP10C	NOTHNAGEL/LEY DE HENRY
SYSOP9D	HAYDEN-O'CONNELL	SYSOP10D	HAYDEN-O'CONNELL
SYSOP9E	HAYDEN-O'CONNELL/LEY DE HENRY	SYSOP10E	HAYDEN-O'CONNELL/LEY DE HENRY
	UNIQUAC		
SYSOP11	REDLICH-KWONG		
SYSOP11A	REDLICH-KWONG/LEY DE HENRY		
SYSOP11B	NOTHNAGEL		
SYSOP11C	NOTHNAGEL/LEY DE HENRY		
SYSOP11D	HAYDEN-O'CONNELL		
SYSOP11E	HAYDEN-O'CONNELL/LEY DE HENRY		

E. BANCOS DE DATOS

Aspen Plus cuenta con 6 bancos de datos para el cálculo de propiedades de los compuestos que se utilicen en la simulación. En ellos se encuentran los parámetros de los diferentes modelos termodinámicos y de transporte de Aspen como presión y temperatura crítica, constantes de Antoine, parámetros de la UNIFAC, etc. Existen compuestos que no tienen reportado en los bancos de datos todos los parámetros, en tales casos el usuario puede suministrarlos o inclusive crear su propio banco de datos.

Los bancos de datos existentes en Aspen Plus son los siguientes: ASPENPCD, DIPPRPCD, COMBUST, SOLIDS, BINARY Y AQUEOUS

ASPENPCD es el banco principal de sustancias puras, en el se encuentran 472 sustancias y no requiere especificarse en la simulación, ya que el sistema lo toma como default.

DIPPRPCD es un banco licenciado a Aspen Tech. por "The National Bureau of Standards" y desarrollado por Instituto Americano de Ingenieros Químicos(AICHE). Este banco contiene 766 componentes puros y se espera que en un futuro contenga 1500. En este caso si es necesario especificar si se desea utilizar el banco de datos en la simulación.

COMBUST es un banco de datos especial para el cálculo de propiedades en la fase gas a altas temperaturas. Contiene información para 59 compuestos que se encuentran típicamente en los productos de combustión.

En BINARY se encuentran las constantes de Henry para 49 compuestos en solución acuosa, en caso de no existir valores para algún compuesto el usuario pueda proporcionarlos fácilmente.

AQUEOUS contiene los parámetros para el cálculo de propiedades de especies iónicas y moleculares en solución acuosa. En el se encuentran 262 componentes.

SOLIDS es el banco de datos para compuestos sólidos, el cual contiene 121 componentes puros.

Los parámetros que contienen todos estos bancos de datos se encuentran en el apéndice B de la guía del usuario de Aspen Plus.

F. ALGORITMOS DE CONVERGENCIA

Aspen-Plus, como ya se mencionó, utiliza algoritmos de simulación modular secuencial, en donde a partir de las corrientes de alimentación y los parámetros suministrados se van calculando secuencialmente las diferentes operaciones unitarias que conforman el proceso. Así mismo, cuenta con rutinas para detectar los ciclos de recirculación, seleccionar corrientes de corte, generar bloques de convergencia y definir la secuencia de cálculo.

Las secuencias de convergencia para las especificaciones de diseño son generadas automáticamente, utilizándose el método de la secante para una sola especificación o el de

Broyden para dos o más especificaciones simultáneas. También es posible que el usuario introduzca el método de convergencia.

En lo que se refiere a los ciclos internos, necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de recirculación se pueden utilizar varios métodos aplicables a varias corrientes simultáneamente. Entre estos métodos se encuentran: sustitución directa, Broyden, Wegstein y Newton.

Para la convergencia de los diferentes modelos de operaciones unitarias es posible también utilizar diferentes métodos como Newton, Wegstein y Broyden.

El tener diferentes opciones de convergencia, hacen de Aspen un simulador muy versátil que permite la solución de cualquier tipo de problema iterativo.

G. SOPORTE COMPUTACIONAL

El soporte físico (hardware) que requiere el Aspen Plus versión 8.5, debe adquirirse por cuenta propia y es el siguiente:

1) Computadora personal con procesador 386 ó 486 compatible con IBM; 2) 640 KB de memoria base; 3) 8-10 MB de memoria extendida; 4) Un coprocesador matemático 803087 ó equivalente; 5) Un puerto paralelo; 6) Un mínimo de 70 MB de espacio en disco duro; y 7) Un ratón para utilizar el sistema gráfico.

El soporte lógico (software) está formado por dos partes: el sistema operativo y los programas que constituyen el simulador. El sistema operativo debe ser DOS versión 3.3 o mayor y debe configurarse para manejar al menos 50 archivos. Los programas que conforman el simulador pueden agruparse en tres paquetes:

- Aspen Plus para computadoras 386, con todas las rutinas que se requieren para llevar a cabo la simulación.
- Model Manager, interfase con el usuario, que es un sistema gráfico que permite introducir fácilmente todos los datos para la ejecución de la simulación.
- Programas y compiladores anexos, como NDP-FORTRAN, Phar Lap 386/ASM / 386/LINK y el DOS extender.

H. INTERFASE CON EL USUARIO

Como se mencionó en el capítulo anterior la interfase con el usuario incluye el lenguaje por medio del cual la persona describe su problema, los reportes de resultados, la documentación para el uso del sistema y los protocolos para la interacción con otros programas.

El lenguaje de entrada incluye la información necesaria para llevar a cabo la simulación, la cual se encuentra en el diagrama de flujo del proceso. En Aspen Plus esta información puede ser suministrada en dos formas diferentes, la primera es mediante la realización de un programa en caracteres ASCII (input) que puede realizarse en cualquier editor o procesador de palabras.

En la segunda opción se pueden introducir los datos por medio de gráficas y formatos ya hechos, en los que se le pide al usuario la información necesaria; esto es posible gracias a la utilización de Model Manager.

Los reportes de resultados también pueden ser obtenidos de las mismas dos formas, por medio del Model Manager o en archivos de caracteres ASCII. Es posible generar gráficos y tablas que pueden ser editados o impresos de manera directa o por medio de casi cualquier procesador de palabras, hoja de cálculo o sistema CAD.

La documentación para el uso del sistema se encuentra agrupada en varios manuales, los cuales van desde los básicos hasta los expertos. A continuación se enlistan los diferentes manuales:

- ModelManager and Aspen Plus, Installation and reference for the PC: explica como instalar el simulador y como configurar la PC para su utilización.
- Aspen Plus User Guide: contiene la información necesaria para aprender a utilizar el Aspen Plus para procesos líquido-vapor típicos.
- Aspen Plus Electrolytes Manual: es un suplemento de la guía del usuario para el modelado de procesos en donde intervienen electrolitos en solución acuosa y no acuosa.
- Aspen Plus Solids Manual: en el se encuentra la descripción de corrientes y operaciones unitarias en donde se manejan sólidos.

- Aspen Plus Interactive Simulation: describe las propiedades y virtudes de la simulación interactiva y la forma de utilizarla.

- Aspen Plus Data Regression Manual: es una guía completa para el uso del sistema de regresión lineal de Aspen Plus.

- Aspen plus Costing Manual: en el se encuentra la descripción del uso de los sistemas de costos, así como su simulación y reporte.

- ModelManager Getting Started and Tutorials for the PC: inicia al usuario en el uso de Model Manager a través de tutoriales.

- Aspen Plus Guide to Physical Properties: guía a los usuarios avanzados en el cálculo y uso de propiedades.

- Aspen Plus Notes on Interfaces and User Models: describe la forma en que el usuario debe introducir sus propios modelos y subrutinas.

- Aspen Plus Stream Libraries and Insert Libraries: describe como usar la biblioteca de corrientes para almacenar información entre diferentes corridas de una misma simulación.

Aspen Plus cuenta con protocolos para su interacción con otros programas como son bases de datos, hojas de cálculo y sistemas CAD/CAM.

CAPITULO 4

PROCESOS DE HIDRODESULFURACION

A. INTRODUCCION

El desarrollo de la tecnología en refinación del petróleo ha provocado que el hidroprocesamiento de las fracciones del petróleo sea tan factible como el cracking y la reformación. En este tipo de procesos se hace reaccionar catalíticamente a los hidrocarburos con hidrógeno.

Existen básicamente dos tipos de hidroprocesamiento: el hidrocracking y la hidrodesulfuración. En el primero de éstos se hacen reaccionar hidrocarburos pesados con hidrógeno, dando como resultado combustibles refinados de menor peso molecular y mayor relación H/C. En la hidrodesulfuración, por su parte, se provoca la reacción de compuestos azufrados con hidrógeno, dando como resultado la formación del compuesto desulfurado.

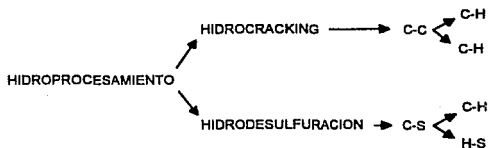


Fig. 4.1 Hidroprocesamiento

En la reacción de hidrodesulfuración se forma como subproducto ácido sulfhídrico, como resultado de la eliminación de azufre del compuesto orgánico. La reacción típica de hidrodesulfuración es la siguiente:



El procesamiento catalítico con hidrógeno de fracciones ligeras del petróleo para remover azufre se lleva a cabo con diferentes finalidades. Las dos principales son: 1) dar un pretratamiento a las carga de las reformadoras catalíticas para evitar el envenenamiento del catalizador de platino por causa del azufre y 2) tratar a las gasolinas producidas mediante el cracking catalítico dando como resultado productos estabilizados y sin presencia de azufre.

La hidrosulfuración de fracciones más pesados da como resultado la obtención de productos como diesel, gas avión y aceites para calentamiento.

Actualmente, aunada a éstas finalidades económicas, se encuentra la protección al medio ambiente. Esto se debe a que la causa principal de contaminación del aire por SO_2 es la combustión de hidrocarburos azufrados presentes en gasolina y diesel. Los procesos de hidrosulfuración permiten disminuir la concentración de azufre en los combustibles por lo que resultan de gran importancia en el combate a la contaminación, sobre todo en países como México en donde el petróleo tiene una alta concentración de compuestos de azufre.

B. CARGAS A HIDRODESULFURADORAS

La carga de una hidrodesulfuradora puede variar desde fracciones ligeras hasta fracciones pesadas como aceites residuales. Dependiendo del tipo de carga se tienen diferentes condiciones de operación, así como consumo de hidrógeno y vida del catalizador. Las cargas típicas a hidrodesulfurar, así como sus puntos de ebullición se muestran en la tabla 4.1.

Carga	Rango de ebullición, °C
Fraciones ligeras	
Gasolinas ligeras	<80
Naftas	80-160
Gasavión	150-230
Gasoleo	170-370
Fraciones pesadas	
Aceite residual	>350

Tabla 4.1 Cargas a hidrodesulfuradoras

Los compuestos que por lo general se encuentran en las cargas a hidrodesulfurar se encuentran en la figura 4.2. Los compuestos se encuentran ordenados de mayor a menor reactividad, los compuestos más pesados se encuentran en mayor proporción en las fracciones pesadas y viceversa.





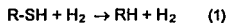
Clase de compuesto	Estructura
Tioles	RSH
Disulfuros	RSSR'
Sulfuros	RSR'
Tiofeno	
Benzotiofenos	
Dibenzotiofenos	
Benzonaftotiofenos	

Fig. 4.2 Compuestos con azufre característicos

C. REACCIONES

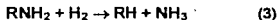
Existen varias reacciones que se llevan a cabo en los reactores de hidrodesulfuración, la principal es la reacción en la que se rompen los enlaces C-S para dar como resultado un enlace C-H y al formación de ácido sulfhídrico:



Bajo condiciones de reacción industriales se llevan a cabo reacciones de hidrogenólisis provocando el rompimiento de enlaces C-C, la más común de éstas reacciones es la de hidrocracking:



Otra reacción común de hidrogenólisis es la hidrogenación:



Este último tipo de reacciones son útiles ya que remueven el nitrógeno de los combustibles lo cual es en ocasiones necesario antes de llevar a cabo la reformación por hidrocracking ya que el nitrógeno envenena al catalizador de este tipo de procesos.

La hidrogenación de compuestos no saturados también se lleva a cabo durante la hidrosulfuración y su velocidad de reacción es comparable aunque ligeramente menor.



Las reacciones (2) y (4) son de gran importancia económica ya que consumen hidrógeno sin remover azufre. Si la temperatura es relativamente alta también es posible que se efectúen reacciones de cracking térmico causando la reducción de peso molecular de las mezclas.

Las fracciones pesadas del petróleo contienen también compuestos organometálicos principalmente de Vanadio y Níquel que reaccionan para dar sulfuros sólidos que se acumulan en el reactor y terminan por bloquear los poros del catalizador, envenenándolo.

Las reacciones de coquificación también se llevan a cabo durante la hidrodesulfuración, sobre todo cuando se tratan fracciones pesadas. El coque también bloquea los poros del catalizador, pero a diferencia de los sulfuros metálicos éste puede ser quemado, como en el cracking catalítico, regenerándose así el catalizador.

D. CATALIZADOR

Los catalizadores que se utilizan en la hidrodesulfuración son aquellos desarrollados antes de la segunda guerra mundial en Alemania, utilizados para la hidrogenación de derivados líquidos del carbón. Se trata de óxidos de cobalto y molibdeno soportados por una base de alúmina. Los catalizadores industriales contienen entre 10 y 20% de Co y Mo, aunque también se llega a utilizar Ni y W en su lugar. En contraste al platino utilizado en la reformación, estos catalizadores tiene la característica de tener actividad para la hidrogenación en presencia de altas concentraciones de compuestos azufrados, aunque su actividad es mucho menor a aquellos que contienen Pt.

Los catalizadores utilizados generalmente se encuentran en forma de partículas o comprimidos porosos de dimensiones entre 1.5 a 3 mm. Tanto la forma como el tamaño de partícula son de gran importancia, sobre todo en las fracciones pesadas, ya que la difusión al interior de la partícula tiene gran importancia en las velocidades de reacción.

En el procesamiento de fracciones ligeras del petróleo el hidrógeno y los hidrocarburos (como gas o líquido) se ponen en contacto en flujo paralelo a través de un reactor de lecho

empacado, por el cual fluyen de arriba hacia abajo. En la figura 4.3 se muestra un diagrama simplificado de los procesos de hidrodesulfuración.

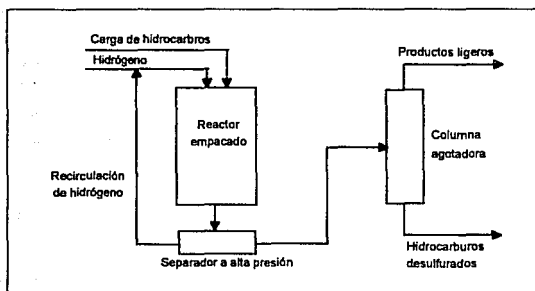


Fig. 4.3 Proceso típico de hidrodesulfuración

Los productos del reactor pasan a un tanque a alta presión donde el hidrógeno que no reaccionó se separa de los hidrocarburos para posteriormente separar los productos ligeros formados durante la reacción del producto desulfurado.

La temperatura de operación en el reactor aumenta con el tiempo de operación para minimizar los efectos de la coquificación. El coque es periódicamente quemado para regenerar el catalizador el cual tiene una vida útil que depende de la fracción a tratar. El costo del catalizador en el procesamiento de fracciones ligeras contribuye tan solo a un 10%[a] de los costos de operación por lo que existe poco estímulo para el desarrollo de nuevos

catalizadores. Por el contrario, en el procesamiento de fracciones pesadas el costo es significativo, por lo cual se desarrollan continuamente nuevas tecnologías, aunque esto resulta complicado ya que se tienen reactores con tres fases: hidrógeno (gas), hidrocarburos (líquido) y catalizador (sólido).

En la tabla 4.2 se resumen las diferencias en las condiciones de operación en el tratamiento de las fracciones, ligeras o pesadas.

Condiciones de proceso	Fraciones ligeras	Fraciones pesadas
Temperatura reactor (C)	300-400	340-425
Presión reactor (atm)	35-70	55-170
LHSV*	2-10	0.2-1
Recirculación de H ₂ (std ft ³ /bbl)	300-2000	2000-10000
Vida del catalizador (años)	10	1/2-1

$$LHSV = (\text{volumen de la alimentación}) / (\text{volumen de catalizador} \cdot \text{hora})$$

Tabla 4.2 Condiciones de operación en la hidrodesulfuración

En el procesamiento de fracciones pesadas las condiciones de proceso son más severas debido a que contienen compuestos de azufre menos reactivos y mayor concentración de compuestos organometálicos, es por esto que los depósitos de coque y sulfuros metálicos se forman rápidamente e impiden la regeneración del catalizador.

E. CINÉTICA

Aunque se han realizado gran cantidad de estudios sobre la cinética de la hidrodesulfuración en amplios rangos de temperatura y presión, incluyendo los efectos de todos los reactivos y productos, todavía no se ha llegado a resultados definitivos.

Se han reportado resultados parciales de la hidrodesulfuración del tiofeno sin influencia del transporte de masa utilizando Co-Mo Al_2O_3 como catalizador, con aproximadamente 3% de Co y 7% de Mo. La temperatura de éstos experimentos se mantuvo entre 235 y 265 °C y la presión cercana a la atmosférica; las concentraciones de tiofeno y H_2S se variaron, aunque la presión parcial del hidrógeno se mantuvo constante. La hidrodesulfuración quedó representada por una ecuación del tipo Langmuir-Hinshelwood, con la forma siguiente (Satterfield y Roberts [1]):

$$r_{hds} = \frac{kP_T P_{H_2}}{(1 + K_T P_T + K_{H_2S} P_{H_2S})^2} \quad (5)$$

donde k es la constante de rapidez de reacción, P_T es la presión parcial del tiofeno, P_{H_2} la presión parcial del hidrógeno, P_{H_2S} la presión parcial del ácido sulfhídrico y K_T y K_{H_2S} son constantes de adsorción.

Como resultado de éstos experimentos se llegó a la conclusión de que el ácido sulfhídrico inhibe las reacciones de hidrodesulfuración y que éstas dependen en gran medida de la presión parcial del hidrógeno.

A partir de otros experimentos realizados por Frye y Mosby [2] se comprobó que la velocidad de reacción dependía en primer orden con respecto a la presión parcial del hidrógeno y los compuestos sulfurados y que además se veía afectada por la adsorción de compuestos aromáticos en el catalizador, por lo que se llegó a la siguiente ecuación:

$$r_{hds} = \frac{kP_S P_{H_2}}{(1 + K_M P_M + K_{H_2S} P_{H_2S})^2} \quad (6)$$

donde P_S es la presión parcial de los compuestos azufrados y P_M la presión parcial de los compuestos aromáticos.

Los valores de las constantes de rapidez y de adsorción dependen de la fracción de petróleo que se esté hidrodesulfurando, del catalizador utilizado y del tipo de reactor, por lo que deben ser evaluadas bajo condiciones de operación en la industria.

Se han hecho simplificaciones a estas ecuaciones considerando a las presiones parciales del hidrógeno y del ácido sulfhídrico como constantes. La presión parcial del hidrógeno se puede considerar constante, si tomamos en cuenta que se tiene gran cantidad de hidrógeno en comparación con lo que reacciona (reacciona tan solo 10% o menos de la carga total al reactor). Por su parte, la presión parcial del ácido sulfhídrico es casi la misma a lo largo del reactor, sobretodo en fracciones ligeras, ya que se tiene una concentración muy baja en comparación a los otros compuestos (generalmente menor al 1% en mol).

De esta forma se puede escribir una ecuación simplificada para la rapidez de reacción de la hidrodesulfuración [3]:

$$r_{hds} = a_1 k_1 C_a + a_2 k_2 C_a \quad (7)$$

donde a_1 es la fracción de compuestos azufrados que reaccionan fácilmente, a_2 la fracción de compuestos azufrados que casi no reaccionan, k_1 y k_2 las constantes de velocidad de reacción y c_s la concentración total de compuestos con azufre.

De ésta forma se tienen velocidades de reacción de primer orden con respecto a la concentración de compuestos azufrados. Si se conocen los compuestos que contiene la fracción es posible establecer un término para cada uno de ellos. Para fracciones ligeras del petróleo el término a_2 es muy pequeño, mientras que para fracciones pesadas sucede lo contrario. Los valores de éstas constantes deben ser evaluados en la práctica a nivel industrial ya que, como se mencionó anteriormente, dependen de la carga al reactor, el catalizador y el tipo de reactor.

Se sabe que mientras más pesado sea el compuesto ha hidrodesulfurar su rapidez de reacción es menor y que la rapidez de reacción de los compuestos aromáticos es menor a la de los no aromáticos.

La ecuación simplificada (7) fue la utilizada durante el modelado del reactor cinético del presente trabajo, en el capítulo 6 se hablará del ajuste de los parámetros.

[a] Gates, Bruce C. et al. "Chemistry of Catalytic Processes." New York: Mc. Graw Hill, 1979. 489 pp.

[1] Satterfield, C. N. and G.W. Roberts, Am. Inst. Chem. Eng. J., 14, 159 (1968)

[2] Frye, C.G., and J.F. Mosby, Chem. Eng. Prog., 63(9), 66(1967)

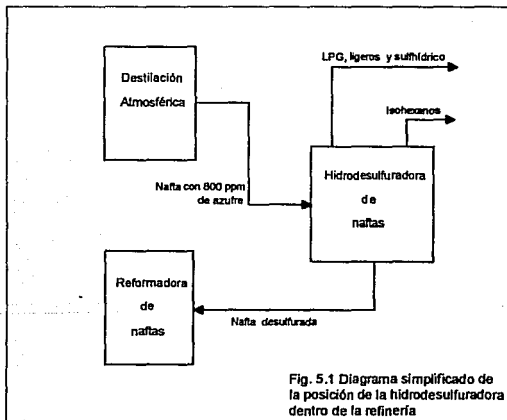
[3] Cecil, R.R., F.Z. Meyer and E.N. Carl. Trabajo presentado en la reunión del Am. Inst. Chem. Eng. L.A., 1968.

CAPITULO 5

PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS DE TULA , HIDALGO

A. GENERALIDADES

La función de la planta hidrodesulfuradora de naftas de la refinería Miguel Hidalgo es la de preparar la carga a la reformadora, mediante la eliminación de azufre de las naftas ligeras provenientes de la destilación primaria; obteniéndose como subproductos LPG, isohexanos y otros compuestos más ligeros ricos en ácido sulfhídrico. En la figura 5.1 se muestra el diagrama simplificado.



La capacidad de diseño de la planta es de 36,500 BPD con una capacidad mínima de 60% la de diseño y un factor de servicio de 0.9.

B. ESPECIFICACIONES DE LAS ALIMENTACIONES

Se tienen únicamente dos alimentaciones a la planta hidrodesulfuradora, una de ellas es la reposición de hidrógeno procedente de la planta reformadora y la otra una mezcla de naftas ligeras y de despunte provenientes de la destilación primaria.

El hidrógeno proveniente de la reformadora con un flujo de 3 MMSCFD tiene la siguiente composición:

Componente	% en mol
Hidrógeno	76.74
Ac. Sulfhídrico	0.0
Metano	8.35
Etano	7.04
Propano	4.32
i-butano	0.98
n-butano	1.16
i-pentanos	0.50
n-pentano	0.27
Isohexanos	0.32
n-hexano+	0.32

La naftas procedentes de la destilación atmosférica contienen 800 ppm de azufre, su flujo es de 36,500 BPD y su composición es la siguiente:

Componente	% en mol
Hidrógeno	0.0
Ac. Sulfídrico	0.0
Propano	0.27
i-butano	0.53
n-butano	2.34
i-pentano	1.06
n-pentano	3.31
isohexanos	7.13
n-hexano+	84.44

C. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

La planta hidrodesulfuradora puede dividirse en dos secciones: sección de reacción y sección de estabilización y fraccionamiento. El objetivo de la sección de reacción es la eliminación de compuestos con azufre, mediante la reacción de hidrogenación, en un reactor catalítico de lecho fijo. En la sección de estabilización y fraccionamiento se efectúa la separación de los butanos e isohexanos de los hexanos y más pesados. La descripción puede seguirse en la fig. 5.1.

Sección de reacción.

La alimentación de naftas se recibe en un tanque acumulador para ser bombeada por medio de la bomba de alimentación GA-401 hacia dos trenes de cambiadores de calor en paralelo,

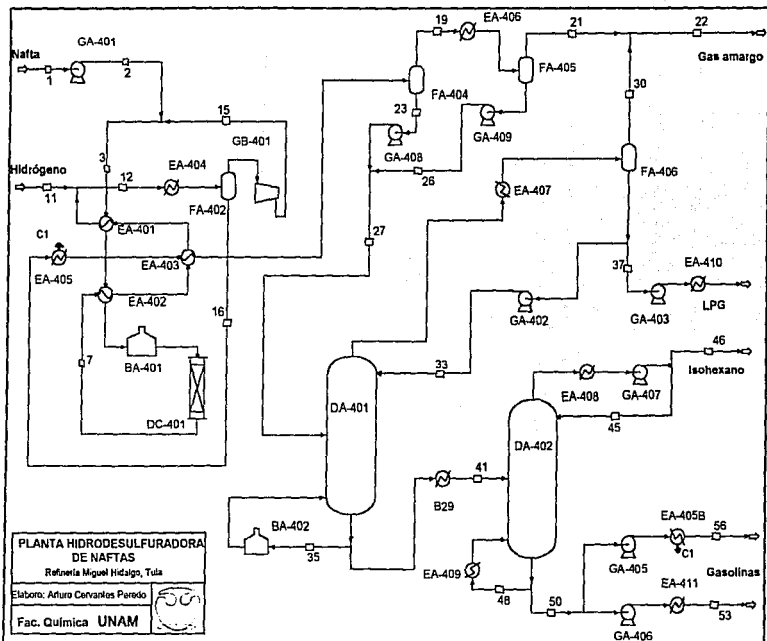


Fig. 5.1 Diagrama de flujo de la planta hidrosulfuradora de naftas de la refinería Miguel Hidalgo

previa inyección de la corriente de recirculación de hidrógeno proveniente del compresor GB-401. Los trenes de cambiadores EA-401 y EA-402 utilizan el efluente del reactor para precalentar la carga.

La carga precalentada, se pasa al calentador BA-401 con el objeto de suministrarle el calor requerido para el proceso hasta alcanzar la temperatura necesaria en el reactor (665 °F). La carga totalmente vaporizada pasa a través del reactor DC-401 en el cual se efectúan las reacciones de hidrogenación. Dichas reacciones son exotérmicas por lo que el efluente del reactor tiene una temperatura de 680 °F.

El efluente del reactor intercambia calor con la carga, en los cambiadores EA-402 y EA-401 y con el líquido procedente del tanque separador de producto desulfurado FA-402 en el cambiador EA-403. A la corriente de salida de los cambiadores EA-401, se le une la corriente de reposición de hidrógeno, proveniente de la reformadora para posteriormente enfriar ésta mezcla con agua en el cambiador EA-404 hasta una temperatura de 110 °F.

La mezcla líquido-vapor formada en el cambiador se lleva al tanque separador de producto desulfurado FA-402. En éste la mezcla se separa en dos fases, una gaseosa (hidrógeno principalmente) que se recircula por medio del compresor GB-401 para mezclarse con la carga de naftas y otra líquida que se envía a la sección de estabilización y fraccionamiento.

Sección de estabilización y fraccionamiento.

La fase líquida procedente del tanque separador de producto desulfurado se precalienta en los cambiadores EA-405 y EA-403 al calentarse con los fondos de la torre deshisohexanizadora y con el efluente del reactor respectivamente. Al líquido así

precalentado se le reduce la presión y a causa de ésto se efectúa la separación de hidrocarburos ligeros e hidrógeno de los pesados en el primer tanque separador de carga a la desbutanizadora FA-404. La corriente gaseosa se pasa a través del enfriador de gas amargo EA-406 con el fin de condensar y recuperar los hidrocarburos presentes en la mezcla.

El efluente del enfriador de gas amargo pasa al segundo tanque separador de carga a la desbutanizadora FA-405, donde se efectúa la separación de la fase gaseosa de la líquida. La fase gaseosa constituida por gas amargo se envía a la planta de tratamiento con dietanolamina(DEA).

La fase líquida proveniente de los tanques separadores se envían mediante las bombas GA-408 y GA-409 hacia la torre desbutanizadora DA-401 alimentándose, después de unirse, en el plato 15 de la torre. La torre desbutanizadora tiene por objeto separar los hidrocarburos ligeros y butanos de los hexanos y pesados y consta de 28 platos. Por los domos sale el destilado en forma de vapor el cual se condensa parcialmente al pasar a través del condensador EA-407. La separación se lleva a cabo en el acumulador de reflujo FA-406.

El vapor formado por gas amargo se une a la corriente que sale del segundo tanque separador de carga y se envía a la planta de tratamiento con DEA. El condensado se divide en dos corrientes, una es enviada mediante la bomba GA-403 a la planta de tratamiento con DEA pasando primero a través del enfriador de domos EA-410. La otra corriente se envía como reflujo hacia la torre mediante la bomba GA-402.

Los fondos de la torre desbutanizadora, conteniendo principalmente isohexano, hexano e hidrocarburos pesados se divide en dos corrientes, una de ellas se envía a la planta

reformadora con objeto de llevar a cabo una recuperación de calor en la misma (80% del calor requerido en el reboiler).

Esta corriente a su vez se divide en dos: una de ella se envía a los serpentines de la sección de convección de la planta reformadora donde se vaporiza parcialmente para posteriormente pasar a través del calentador de fondos (BA-402) de la torre debutanizadora en donde se le suministra el calor restante. La otra corriente es enviada a un economizador donde es vaporizada parcialmente y regresada a la hidrodeshulfuradora para mezclarse con el efluente del calentador de fondos.

La otra parte de la corriente de fondos se envía a la torre desisohexanizadora DA-402, previa disminución de presión. En ésta torre se efectúa la separación de pentanos e isohexanos de los hidrocarburos pesados y consta de 32 platos. Los primeros salen por el domo de la torre condensándose totalmente al pasar a través del condensador EA-408.

El condensado pasa a través del acumulador de la torre para posteriormente ser bombeado por medio de la bomba GA-407. Una parte de esta corriente se envía como reflujo a la torre y otra se envía como carga a la planta fraccionadora.

De la corriente que sale por fondos de la torre desisohexanizadora, constituida por una mezcla de hexano y más pesados, parte se recircula a través del rehervidor de fondos EA-409 y parte se pasa a un tanque de balance donde su efluente se bifurca: una corriente es enviada mediante la bomba GA-405 hacia la planta reformadora, pasando primero por el cambiador EA-405 (mostrado como EA-405B). La corriente restante se enfría mediante el cambiador EA-411 y se envía a límites de batería como producto.

CAPITULO 6

SIMULACION DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS

A. PASOS A SEGUIR EN UNA SIMULACION

El desarrollo de una simulación implica el seguimiento de un procedimiento básico que, aunque referido a Aspen Plus en éste capítulo, puede extrapolarse a cualquier simulador modular. Este procedimiento básico consta de los siguientes puntos:

1. Definición del problema
2. Selección de unidades
3. Selección de componentes
4. Elección del(los) modelos termodinámicos
5. Especificación de la topología del proceso
6. Determinación de las corrientes de corte
7. Definición de las corrientes de alimentación y de corte
8. Elección del modelo a utilizar para cada operación unitaria
9. Especificación de los parámetros de cada modelo
10. Selección de los métodos de convergencia para las corrientes de corte

1. DEFINICION DEL PROBLEMA

El primer paso para la realización de una simulación es definir sus alcances y sus límites, ya que es muy frecuente que el proceso a simular no se encuentre como una entidad independiente, sino que tenga flujos de materia y/o energía interconectados con otros procesos, de forma que al alterar el proceso en cuestión se alteren los demás.

La planta a simular en este trabajo se encuentra interconectada a la planta reformadora de naftas por una sola corriente que recupera calor de la segunda planta, por lo que no se propondrán mejoras sobre esta corriente.

Todos los equipos son simulados independientemente para poder tener un mejor análisis y control de la simulación del proceso. El modelado del reactor no fue realizado para la optimización del reactor en sí, sino para la representación del proceso.

2. SELECCION DE UNIDADES

Las unidades a utilizarse en una simulación deben ser, por facilidad de manejo, aquellas en las que se dispone la mayor parte de la información del proceso a simular. Aspen plus cuenta con tres sistemas de unidades: internacional, de ingeniería y métrico. Además es posible definir las unidades a utilizar para una variable específica.

Se pueden especificar unidades distintas para la entrada y salida de información, es decir, puede suministrarse como parámetro una temperatura en °C y obtener el resultado en °F. Por omisión Aspen Plus utiliza unidades de ingeniería tanto para la entrada como para la salida de información. Para el presente trabajo, las unidades seleccionadas fueron las de ingeniería ya que se disponía de la información en éstas unidades.

3. SELECCION DE COMPONENTES

La selección de los componentes implica la especificación de todos los compuestos que van a estar presentes en la simulación de un proceso. Para esto es necesario considerar tanto los compuestos de las corrientes de entrada al proceso, como aquellos que se forman en las reacciones.

Aspen plus permite la introducción de componentes totalmente caracterizados o la creación de pseudocomponentes para fracciones del petróleo a partir de una TBP. (Una TBP es una curva o tabla en la que se representan datos de por ciento de vaporización de la fracción problema contra temperatura de ebullición.)

En este punto además de la especificación de los componentes, también es necesario seleccionar la base de datos en la que se encuentran los parámetros para el cálculo de propiedades de dichos componentes.

En este caso, la selección de componentes fue un tanto complicada. Por tratarse de una fracción del petróleo, lo recomendable para caracterizar a la mezcla es utilizar pseudocomponentes creados a partir de la introducción de datos de una TBP de ésta.

Por otro lado, Aspen no permite la reacción de pseudocomponentes por lo que su utilización resulta imposible al tener que simular un reactor. Es por ésta razón que se procedió a obtener una mezcla con componentes totalmente caracterizados que se asemejara lo más posible a lo que se tiene en la realidad.

Se sabe que las naftas están formadas por una gran cantidad de compuestos que van desde los C3 hasta los C10 y C11 y que además en este caso es necesario representar a los compuestos con azufre. Dentro de los compuestos no azufrados es necesario identificar completamente a los butanos, pentanos e isohexanos ya que se tienen separaciones específicas de éstos dentro del proceso.

Dentro de los compuestos ligeros se tienen: **hidrógeno, ácido sulfhídrico** (como producto de reacción), **metano, etano, propano, isobutano, n-butano, 2 metil butano, 2,2 dimetil propano, n-propano, 2,2 dimetil butano, 3 metil pentano, y 2 metil pentano.**

En el caso del hexano y más pesados no es necesaria la identificación exacta ya que durante todo el proceso se mantienen como una sola fracción. Estos intervienen en las reacciones de cracking dentro del reactor, pero no importa lo que son sino lo que forman, que son compuestos más ligeros que se encuentran completamente caracterizados. Dentro de ésta fracción únicamente es necesario saber que también existen compuestos aromáticos y azufrados, los cuales son importantes por las reacciones que se llevan a cabo.

Dentro de los componentes pesados no aromáticos y no azufrados se consideraron como fracción de la corriente de alimentación al **n-hexano, metil ciclopentano, n-heptano, n-octano, n-nonano, n-decano y n-undecano** y como producto de la reacción de hidrogenación de los aromáticos al **ciclohexano y metilciclohexano.**

Representando a los aromáticos se tomaron al **benceno** y al **tolueno** cuyas fracciones dentro de la alimentación eran conocidas y correspondían al 90% de los aromáticos totales.

Dentro de los compuestos con azufre era necesario representar tanto a los compuestos lineales como a los cíclicos, los cuales son más difíciles de reaccionar. Para esto se seleccionaron como lineales al **etilmercaptano**, **metil-etil sulfuro** y **dietyl sulfuro** y como cíclico al **tiofeno**. Estos fueron seleccionados en base a que por tratarse de una nafta ligera, ésta sólo contiene compuestos azufrados de bajo peso molecular y de fácil reacción.

4. ELECCION DE LOS MODELOS TERMODINAMICOS

Como ya se mencionó anteriormente, la selección del(los) modelo(s) termodinámico(s) a utilizarse dentro de la simulación es de gran importancia para obtener resultados confiables. Los modelos termodinámicos disponibles en Aspen se pueden consultar en el capítulo 2.

Los modelos termodinámicos seleccionados para ésta simulación fueron dos: Grayson-Streed (SYSOP2) y Redlich-Kwong-Aspen (SYSOP6). El primero se seleccionó debido a que se trata de un sistema de hidrocarburos con presencia de hidrógeno en algunos de sus equipos que se adapta muy bien a los rangos de funcionalidad de ésta ecuación diseñada especialmente para este tipo de sistemas. Esta selección se hizo también mediante una comparación entre las diferentes ecuaciones de estado y los datos de diseño.

Así por ejemplo, se tiene que la recirculación de hidrógeno de diseño es de 1525 lbmol/hr, y se obtuvo para Grayson-Streed un valor de 1539, mientras que para Peng-Robinson y Redlich-Kwong-Aspen se obtuvieron valores de 1405 y 1467 respectivamente.

El segundo modelo fue elegido ya que en muchos equipos no se tiene presencia de hidrógeno, por lo que la utilización de modelos específicos no es necesaria. La ecuación de

Redlich-Kwong es aplicable a mezclas tanto no polares como ligeramente polares (incluso polares con la utilización parámetros de interacción binaria). En este caso al tener presencia de ácido sulfhídrico la utilización de ésta ecuación recomendable.

5. ESPECIFICACIÓN DE LA TOPOLOGIA DEL PROCESO

Para especificar la topología de un proceso es necesario identificar primero todos los bloques a simular, los bloques no son necesariamente los equipos mostrados en un diagrama de procesos ya que se deben incluir también divisores y mezcladores de flujo.

Una vez identificados y nombrados todos los bloques se procede a la identificación de corrientes, para lo cual es necesario nombrar diferente a cada una, incluyendo todas aunque no cambien de composición. A partir de esta información se puede generar un diagrama de bloques como el mostrado en la figura 6.1.

Posteriormente se procedió a introducir la topología del proceso, que consiste en indicar con el nombre de cada bloque que corrientes entran y salen de cada uno de ellos. En Aspen plus se realiza de la siguiente forma:

BLOCK (nombre del bloque) IN=(corrientes que entran) OUT=(corrientes que salen)

En sección B de este capítulo se incluye el listado del input utilizado para la realización de este trabajo el cual incluye la topología del proceso.

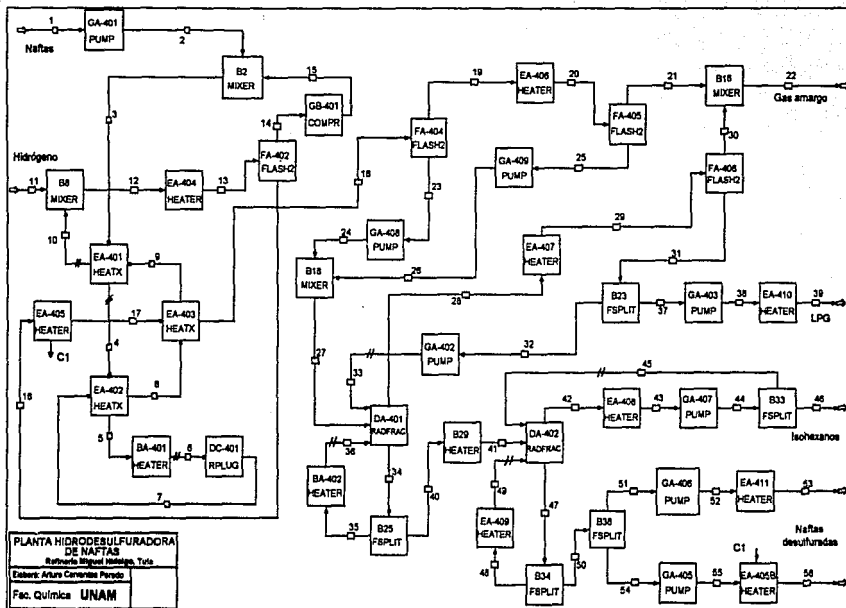


Fig. 6.1 Diagrama de bloques de la simulación.

6. DETERMINACION DE LAS CORRIENTES DE CORTE

Las corrientes de corte, como se mencionó anteriormente, son aquellas que es necesario hacer converger debido a que se tienen recirculaciones en el proceso.

Las corrientes de corte pueden ser suministradas por el usuario de Aspen o pueden ser encontradas automáticamente por el simulador (por el método de Motard-Westerberg). Lo más recomendable es que el usuario las proporcione ya que al tener el conocimiento del comportamiento del proceso puede seleccionar el conjunto de corrientes de corte más adecuado para romper todos los ciclos. En caso que el simulador las seleccione, sólo lo hace en base a criterios matemáticos, no toma en cuenta al proceso.

Las corrientes seleccionadas para este trabajo son: 4, 6 y 10 para la convergencia de los ciclos que producen la recirculación de hidrógeno (ciclo de materia) y los ciclos de energía formados en los intercambiadores EA-401 a 403 (Bloque CV1); 33 y 36 para la convergencia de los ciclos formados por el reflujo y la corriente que va al reboiler de la torre debutanizadora (Bloque CV2); y 45 y 49 (Bloque CV3) para los ciclos presentes en la torre desisohexanizadora (reflujo y corriente del reboiler).

7. DEFINICION DE LAS CORRIENTES DE ALIMENTACION Y DE CORTE

El siguiente paso en la realización de una simulación es la especificación de las corrientes de alimentación y de corte, es decir proporcionar flujo, composición y condiciones (presión y temperatura o fracción de vapor).

Para éste caso se tienen dos corrientes de alimentación, la de hidrógeno que tiene la misma composición indicada en el capítulo 4 y la de naftas cuya composición de compuestos ligeros es la mencionada en el mismo capítulo sólo que las fracciones de isopentanos e isohehexanos fueron obtenidas de los datos de diseño.

La composición de hexanos a undecanos fue calculada ajustando el peso molecular de la corriente proporcionada en el diagrama de flujo de proceso, mientras que la composición de compuestos con azufre fue calculada a partir del hecho de que se tienen 800 ppm de azufre en la alimentación. Por su parte las concentraciones de metil ciclopentano, benceno y tolueno fueron obtenidas de los datos de diseño restándolos del total de n-hexano+pesados.

8. ELECCION DEL MODELO A UTILIZAR PARA CADA OPERACION UNITARIA

La elección de los modelos a utilizar para representar cada una de las operaciones unitarias se hace en base al equipo en sí, en el capítulo dos se mencionaron los modelos con los que cuenta Aspen plus los cuales son capaces de reproducir cualquier tipo de operación unitaria.

Es importante señalar que la mayoría de las operaciones sólo pueden ser simuladas adecuadamente con un sólo modelo como un intercambiador de calor con servicio (heater), un flash de dos fases (flash2) o una bomba (pump). No es así en el caso de las columnas de destilación o los reactores.

Las columnas de destilación pueden ser simuladas con un condensador y reboiler acoplados al modelo o como equipos por separado según se desee. Por su parte, los reactores pueden ser simulados con varios modelos, obteniéndose los mismos resultados en la simulación. La elección del modelo del reactor depende de la información que se disponga y de la necesidad

de realizar posteriormente una optimización del equipo, ya que existen modelos como el estequiométrico o el de conversión que no permiten realizar una optimización profunda del equipo.

La figura 6.1 muestra cada uno de los modelos de Aspen plus utilizados en la representación de las diferentes operaciones unitarias de la planta hidrodesulfuradora. Como se puede observar las columnas de destilación fueron simuladas con el condensador y reboiler no integrados y se utilizó el modelo cinético para la simulación del reactor.

9. ESPECIFICACION DE LOS PARAMETROS PARA CADA MODELO.

Los parámetros a especificar en cada modelo de operación unitaria están determinados principalmente por los grados de libertad del equipo, así por ejemplo, para un calentador o enfriador es necesario especificar dos parámetros que pueden ser: temperatura y presión de salida, carga térmica, o fracción de vapor.

Para calentadores o enfriadores se acostumbra introducir como parámetros la presión de salida y la temperatura de salida o fracción de vapor, ya que en la mayoría de las veces los datos disponibles de cargas térmicas están sobrados. Cuando se trata de cambiadores que utilizan dos corrientes de proceso se pueden especificar las presiones de salida de ambas corrientes así como la temperatura o fracción de vapor de una de ellas.

En el caso de flashes lo recomendable es simularlos como adiabáticos ($Q=0$ y P) o isotérmicos (T y P), aunque también es útil especificar la fracción vapor en casos en los que se desea asegurar un flujo fijo de vapor o líquido.

Al especificar bombas y compresores es suficiente especificar la presión de salida del equipo, al igual que en el caso de mezcladores. Para divisores únicamente es necesario especificar la relación de flujos, aunque también se pueden especificar las presiones de salida.

Las torres de destilación son un equipo más difícil de especificar ya que se requiere especificar al menos: número de etapas, presión de operación (al menos en el primer plato), plato(s) de alimentación, flujos de salidas laterales y tipo de torre (con reboiler y condensador incluidos o por separado).

En el caso de reactores tubulares es necesario proporcionar diámetro, longitud, presión de salida, fase de la reacción, tipo (adiabático, isotérmico o con intercambio de calor), constantes de rapidez de reacción (energía de activación y factor preexponencial) y orden de las reacciones.

Los parámetros suministrados para la realización de esta simulación, son datos obtenidos a partir del diagrama de flujo de proceso y de la descripción del proceso, únicamente fue necesario ajustar los valores de la energía de activación y el factor preexponencial en el caso de la simulación del reactor.

Para ajustar las energías de activación de las diferentes reacciones se parte del siguiente hecho: algunos compuestos de azufre se descomponen a temperaturas tan bajas como 500 °F. El grado y la rapidez de la desulfuración se incrementa marcadamente cuando la temperatura aumenta. A 650 °F la rapidez de reacción es muy alta y se incrementa hasta la temperatura de 700 °F. La saturación de aromáticos se comporta de manera semejante a la reacción de hidrodessulfuración, con respecto a la temperatura, con la excepción de que el

incremento de la rapidez se mantiene a mayor temperatura. A éstas temperaturas la rapidez de las reacciones de hidrocracking es muy baja, pero a temperaturas cercanas a 750 °F la rapidez aumenta significativamente.

A este modelo de reactor, después de haber ajustado los parámetros se le hicieron pruebas variando la temperatura de entrada y la longitud del reactor dando los siguientes resultados: a un aumento de 10 grados en la temperatura de entrada el consumo de hidrógeno aumentó ligeramente debido a un aumento en la rapidez de reacción de las reacciones de hidrocracking y saturación; al disminuir la temperatura 10 grados el consumo de hidrógeno disminuyó pero ocurrió lo mismo con las reacciones de hidrosulfuración. Al aumentar la longitud del reactor aumentó el consumo de hidrógeno debido al aumento en el tiempo de residencia, mientras que al disminuirlo disminuyeron las conversiones de las reacciones tanto de hidrosulfuración como las de hidrocracking y saturación.

10. SELECCION DE LOS METODOS DE CONVERGENCIA

La selección de los métodos de convergencia debe hacerse en función de: 1) Valores iniciales de las corrientes de corte; 2) Equipos con problemas de convergencia dentro del ciclo(s); y 3) Orden y complejidad del ciclo(s).

Si se tienen muy buenos estimados para las corrientes de corte, lo recomendable es utilizar sustitución directa, como se puede observar en la convergencia del bloque CV3 (fig. 6.6). En este caso se tienen muy buenos estimados de las corrientes de corte, no existen equipos con problemas de convergencia y se trata de ciclos simples.

En el caso del bloque de convergencia CV1, (fig. 6.2 y 6.3) la sustitución directa no funciona debido a que se tienen ciclos que incluyen un gran número de equipos, incluyendo el flash que separa al hidrógeno de los hidrocarburos, el cual resulta ser un equipo crítico. En este caso el método que mejor funciona es Broyden aunque también puede utilizarse Wegstein, modificando los parámetros de convergencia (Wegstein con=Wegstein con parámetros modificados, Wegstein sin=Wegstein sin parámetros modificados). Al hablar de parámetros modificados debe entenderse un acotamiento del parámetro del método de Wegstein que acelera la convergencia con respecto al de sustitución directa.

En el bloque CV2, la torre desbutanizadora presentó serios problemas de convergencia, por lo que la utilización del método de Broyden no resulta adecuada (fig. 6.4 y 6.5). El método que mejor funciona es Wegstein con parámetros modificados ya que permite un mejor control de los valores de las corrientes de corte.

Como se observa, ningún método es mejor que los otros, su selección depende de los puntos anteriormente señaladas y además del tipo de problema por lo que no se pueden generalizar a cualquier proceso.

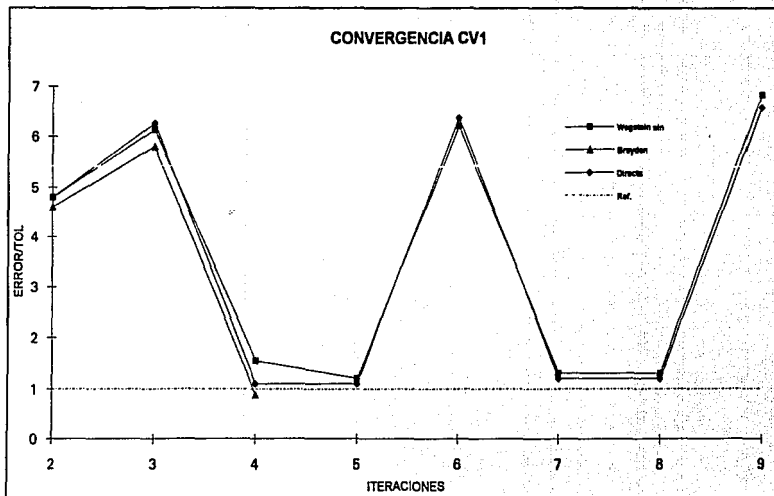


Fig. 6.2 Convergencia del bloque CV1

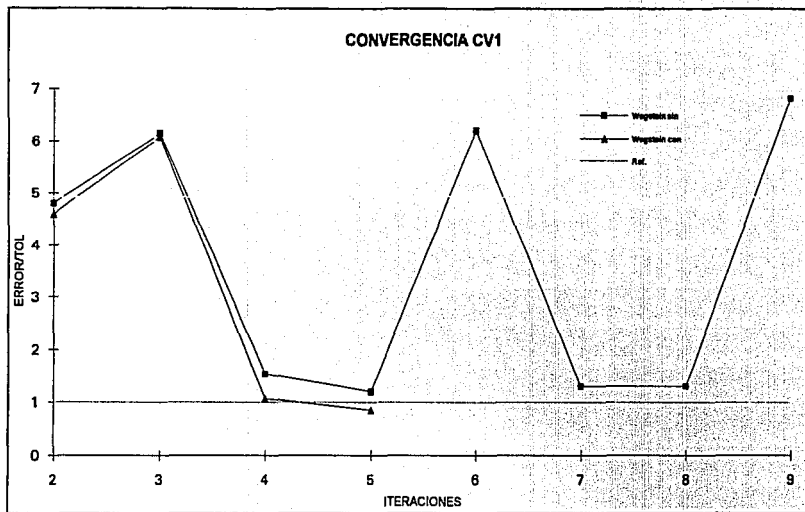
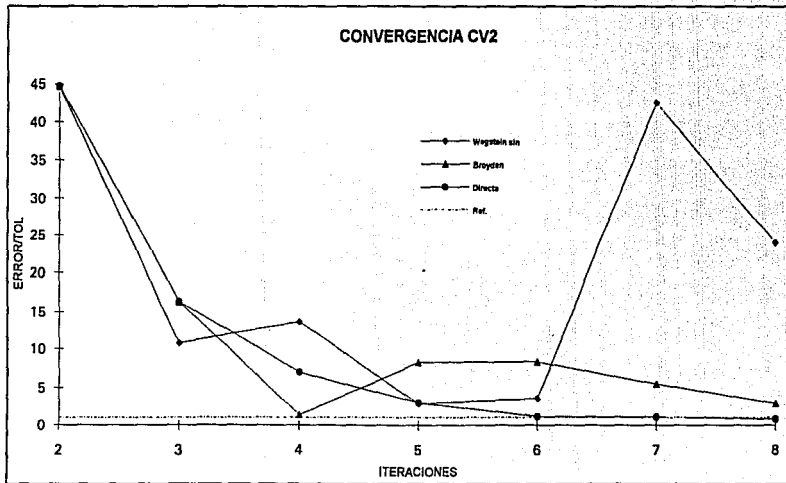


Fig. 6.3 Convergencia del bloque CV1 con el método de Wegstein



6.17

Fig. 6.4 Convergencia del bloque CV2

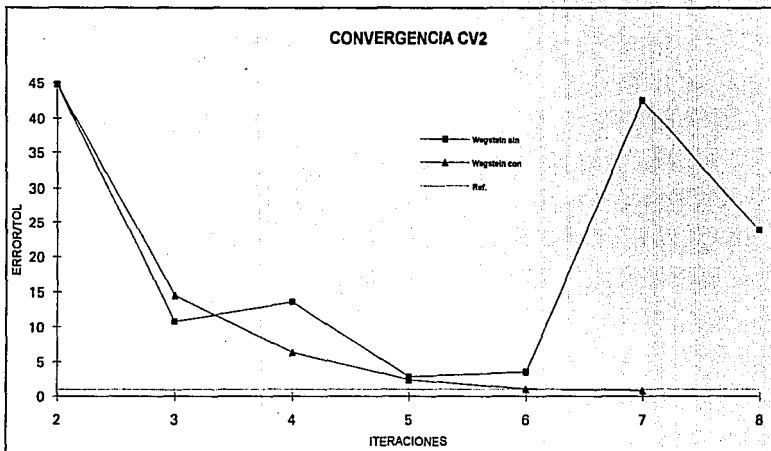


Fig. 6.5 Convergencia del bloque CV2 con el método de Wegstein

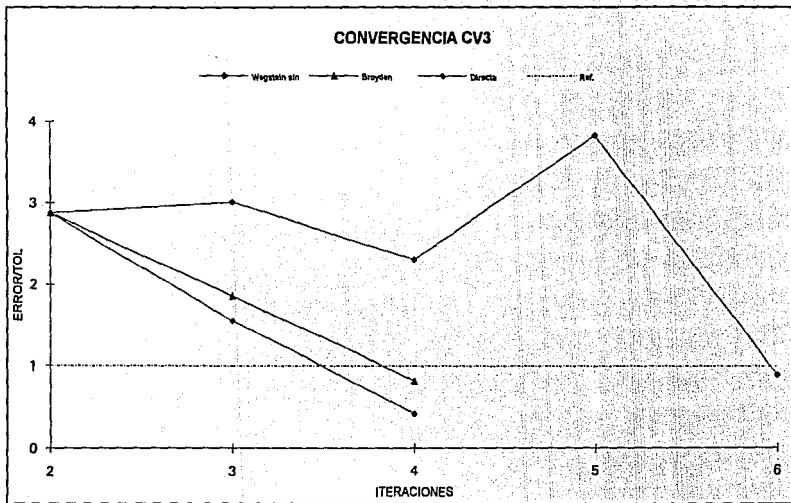


Fig. 6.6 Convergencia del bloque CV3

B. PROGRAMA DE ENTRADA PARA LA SIMULACION

TITLE "PLANTA HIDRODESULFURADORA U-400"

IN-UNITS ENG
OUT-UNITS ENG

CONVERGENCE CV1 BROYDEN
TEAR 10 / 6 / 4

CONVERGENCE CV2 WEGSTEIN
TEAR 36 / 33
PARAM QMIN=-0.05 QMAX=0.05

CONVERGENCE CV3 DIRECT
TEAR 45 / 49

CONV-ORDER CV1 CV2 CV3

PROPERTIES SYSOP8 / SYSOP2

DATABANKS ASPENPCD

PROP-SOURCES ASPENPCD

COMPONENTS H2 H2 H2 / H2S H2S H2S / CH4 CH4 CH4 / C2H6 C2H6 C2H6 /
C3H8 C3H8 C3H8 / C4H10-2 C4H10-2 C4H10-2 / C4H10-1 C4H10-1 C4H10-1 /
2MC4 C5H12-2 2MC4 / 22DMC3 C5H12-3 22DMC3 / C5H12-1 C5H12-1 C5H12-1 /
22DMC4 C6H14-4 22DMC4 / 3MC5 C6H14-3 3MC5 / 2MC5 C6H14-2 2MC5 /
C6H14-1 C6H14-1 C6H14-1 / C7H16-1 C7H16-1 C7H16-1 / C8H18-1 C8H18-1 C8H18-1 /
C9H20-6 C9H20-6 C9H20-6 / C9H20-1 C9H20-1 C9H20-1 / C10H22-1 C10H22-1 C10H22-1 /
C11H24 C11H24 C11H24 / MCC5 C6H12-2 MCC5 / CC6 C6H12-1 CC6 /
MCC6 C7H14-6 MCC6 / ETMERC C2H6S-1 ETMERC / MEETSUL C3H8S MEETSUL /
DETSUL C4H10S DETSUL / TIOFENO C4H4S TIOFENO / BENCENO C6H6 BENCENO /
TOLUENO C7H8 TOLUENO

FLWSHEET

BLOCK GA-401	IN=1	OUT=2
BLOCK B2	IN=2 15	OUT=3
BLOCK EA-401	IN=3 9	OUT=4 10
BLOCK EA-402	IN=4 7	OUT=5 8
BLOCK BA-401	IN=5	OUT=6
BLOCK DC-401	IN=6	OUT=7
BLOCK EA-403	IN=8 17	OUT=9 18
BLOCK B8	IN=10 11	OUT=12
BLOCK EA-404	IN=12	OUT=13
BLOCK FA-402	IN=13	OUT=14 16
BLOCK GB-401	IN=14	OUT=15
BLOCK EA-405	IN=16	OUT=17 C1
BLOCK EA-405B	IN=55 C1	OUT=56
BLOCK FA-404	IN=18	OUT=19 23
BLOCK EA-406	IN=19	OUT=20
BLOCK FA-405	IN=20	OUT=21 25
BLOCK B16	IN=21 30	OUT=22

BLOCK GA-408	IN=23	OUT=24
BLOCK B18	IN=24 26	OUT=27
BLOCK GA-409	IN=25	OUT=28
BLOCK DA-401	IN=33 27 38	OUT=28 34
BLOCK EA-407	IN=28	OUT=29
BLOCK FA-406	IN=29	OUT=30 31
BLOCK B23	IN=31	OUT=32 37
BLOCK GA-402	IN=32	OUT=33
BLOCK B25	IN=34	OUT=35 40
BLOCK BA-402	IN=35	OUT=36
BLOCK GA-403	IN=37	OUT=38
BLOCK EA-410	IN=38	OUT=39
BLOCK B29	IN=40	OUT=41
BLOCK DA-402	IN=45 41 49	OUT=42 47
BLOCK EA-408	IN=42	OUT=43
BLOCK GA-407	IN=43	OUT=44
BLOCK B33	IN=44	OUT=45 48
BLOCK B34	IN=47	OUT=48 50
BLOCK EA-409	IN=48	OUT=49
BLOCK B36	IN=50	OUT=51 54
BLOCK GA-406	IN=51	OUT=52
BLOCK EA-411	IN=52	OUT=53
BLOCK GA-405	IN=54	OUT=55

TEAR 45 / 49 / 10 / 6 / 4 / 36 / 33

;ALIMENTACIONES

STREAM 1 TEMP=100 PRES=51.3

MOLE-FLOW H2 0 / H2S 0 / CH4 0 / C2H6 0 / C3H8 9 / H10-2 17.5 /
 C4H10-1 178.34 / 2MC4 43 / 22DMC3 23.4 / C5H12-1 110.85 / 22DMC4 35.945 /
 3MC5 68.204 / 2MC5 136.77 / C6H14-1 101.695 / C7H16-1 177.966 /
 C8H18-1 991.526 / C9H20-6 5.54 / C9H20-1 655.478 / C10H22-1 406.78 /
 C11H24 203.39 / MCC5 205.24 / CC6 0 / MCC6 0 / ETMERC 2.696 /
 MEETSUL 1.63 / DETSUL 3.276 / TIOFENO 1.9 / BENCENO 19.5 /
 TOLUENO 79.723

STREAM 11 TEMP=146 PRES=406.3

MOLE-FLOW H2 234.57 / H2S 0 / CH4 25.62 / C2H6 21.51 / C3H8 13.21 /
 C4H10-2 2.99 / C4H10-1 3.56 / 2MC4 1 / 22DMC3 0.54 / C5H12-1 0.82 /
 22DMC4 0.33 / 3MC5 0.33 / 2MC5 0.33 / C6H14-1 0.4 / C7H16-1 0.3 /
 C8H18-1 0.2 / C9H20-6 0 / C9H20-1 0.09 / C10H22-1 0.0 / C11H24 0.0 /
 MCC5 0.0 / CC6 0.0 / MCC6 0.0 / ETMERC 0.0 / MEETSUL 0.0 /
 DETSUL 0.0 / TIOFENO 0.0 / BENCENO 0.0 / TOLUENO 0.0

; CORRIENTES DE CORTE

STREAM 10 TEMP=392.9366 PRES=384

MOLE-FLOW H2 1362.4701 / H2S 14.6275 / CH4 116.3412 / C2H6 44.4358 /
 C3H8 26.9912 / C4H10-2 26.9983 / C4H10-1 92.2326 / 2MC4 50.6298 /
 22DMC3 25.6228 / C5H12-1 120.4525 / 22DMC4 36.7558 / 3MC5 69.0775 /
 2MC5 138.7399 / C6H14-1 108.8438 / C7H16-1 175.0044 / C8H18-1 996.7455 /
 C9H20-6 0.0 / C9H20-1 656.1202 / C10H22-1 406.8757 / C11H24 193.3725 /
 MCC5 207.2224 / CC6 9.8840 / MCC6 36.1070 / ETMERC 0.0 /
 MEETSUL 0.0 / DETSUL 0.0 / TIOFENO 6.2001E-03 / BENCENO 9.8036 /
 TOLUENO 43.9458

STREAM 4 TEMP=278.6 PRES=480

MOLE-FLOW H2 1539.0376 / H2S 5.1317 / CH4 114.7118 / C2H6 33.2960 /
C3H8 19.6175 / C4H10-2 21.4583 / C4H10-1 86.7191 / 2MC4 45.0899 /
22DMC3 25.6228 / C5H12-1 114.4320 / 22DMC4 36.7558 / 3MC5 69.0775 /
2MC5 138.7399 / C6H14-1 102.8233 / C7H16-1 178.6240 / C8H18-1 992.9914 /
C9H20-6 5.5400 / C9H20-1 655.8582 / C10H22-1 406.8757 / C11H24 203.4091 /
MCC5 207.2224 / CC6 8.0342E-02 / MCC6 0.1514 / ETMERC 2.6960 /
MEETSUL 1.6300 / DETSUL 3.2760 / TIOFENO 1.9001 / BENCENO 19.6073 /
TOLUENO 79.9014

STREAM 6 TEMP=665 PRES=425

MOLE-FLOW H2 1539.0389 / H2S 5.1317 / CH4 114.7119 / C2H6 33.2960 /
C3H8 19.6175 / C4H10-2 21.4583 / C4H10-1 86.7191 / 2MC4 45.0899 /
22DMC3 25.6228 / C5H12-1 114.4320 / 22DMC4 36.7558 / 3MC5 69.0775 /
2MC5 138.7400 / C6H14-1 102.8233 / C7H16-1 178.6240 / C8H18-1 992.9914 /
C9H20-6 5.5400 / C9H20-1 655.8582 / C10H22-1 406.8757 / C11H24 203.4091 /
MCC5 207.2224 / CC6 8.0342E-02 / MCC6 0.1514 / ETMERC 2.6960 /
MEETSUL 1.6300 / DETSUL 3.2760 / TIOFENO 1.9001 / BENCENO 19.6073 /
TOLUENO 79.9014

STREAM 33 VFRAC=0 PRES=250.3

MOLE-FLOW H2 4.0516 / H2S 28.2887 / CH4 14.5641 / C2H6 73.2311 /
C3H8 18.7399 / C4H10-2 128.2805 / C4H10-1 410.5479 / 2MC4 0.4345 /
22DMC3 31.8845 / C5H12-1 0.1152 / 22DMC4 3.4826E-04 / 3MC5 1.9807E-05 /
2MC5 9.0078E-05 / C6H14-1 6.5369E-06 / C7H16-1 1.8121E-09 / C8H18-1 0.0 /
C9H20-6 0.0 / C9H20-1 0.0 / C10H22-1 0.0 / C11H24 0.0 / MCC5 1.0163E-05 /
CC6 7.6852E-08 / MCC6 4.6001E-10 / ETMERC 0.0 / MEETSUL 0.0 /
DETSUL 0.0 / TIOFENO 5.5246E-10 / BENCENO 5.1714E-07 /
TOLUENO 2.2621E-10

STREAM 36 VFRAC=.85 PRES=255.3

MOLE-FLOW H2 1.2576E-12 / H2S 8.1008E-05 / CH4 1.8535E-09 / C2H6 1.6408E-05 /
C3H8 8.8710E-03 / C4H10-2 0.9327 / C4H10-1 19.2633 / 2MC4 102.2998 /
22DMC3 36.4860 / C5H12-1 245.0920 / 22DMC4 76.2372 / 3MC5 144.7161 /
2MC5 289.2397 / C6H14-1 228.5383 / C7H16-1 370.3659 / C8H18-1 2112.2694 /
C9H20-6 0.0 / C9H20-1 1391.7577 / C10H22-1 863.2593 / C11H24 410.3654 /
MCC5 434.0989 / CC6 20.7652 / MCC6 76.2582 / ETMERC 0.0 /
MEETSUL 0.0 / DETSUL 0.0 / TIOFENO 1.2976E-02 / BENCENO 20.5050 /
TOLUENO 92.8205

STREAM 45 TEMP=157.6 PRES=40

MOLE-FLOW H2 0.0 / H2S 5.4090E-04 / CH4 1.2502E-08 / C2H6 1.0976E-04 /
C3H8 5.9188E-02 / C4H10-2 6.2334 / C4H10-1 128.8937 / 2MC4 682.4767 /
22DMC3 243.9301 / C5H12-1 1626.8514 / 22DMC4 472.9587 / 3MC5 376.4582 /
2MC5 1347.7760 / C6H14-1 48.6613 / C7H16-1 2.6312E-07 / C8H18-1 2335E-15 /
C9H20-6 0.0 / C9H20-1 4.4725E-23 / C10H22-1 1.6531E-31 / C11H24 0.0 /
MCC5 20.2857 / CC6 1.2152E-02 / MCC6 4.7249E-08 / ETMERC 0.0 /
MEETSUL 0.0 / DETSUL 0.0 / TIOFENO 5.0891E-04 / BENCENO 0.4133 /
TOLUENO 2.5429E-09

STREAM 49 VFRAC=.75 PRES=42.3

MOLE-FLOW H2 0.0 / H2S 4.3421E-14 / CH4 8.4618E-24 / C2H6 5.2868E-16 /
C3H8 1.6453E-10 / C4H10-2 1.6672E-06 / C4H10-1 1.7286E-04 /
2MC4 8.2879E-02 / 22DMC3 1.9148E-03 / C5H12-1 0.5980 / 22DMC4 1.7823 /
3MC5 28.5566 / 2MC5 28.3345 / C6H14-1 71.4372 / C7H16-1 119.5793 /
C8H18-1 681.9846 / C9H20-6 0.0 / C9H20-1 449.3543 / C10H22-1 278.7189 /

C11H24 132.4939 / MCC5 139.1767 / CC6 6.7038 / MCC6 24.8207 /
ETMERC 0.0 / MEETSUL 0.0 / DETSUL 0.0 / TIOFENO 4.1649E-03 /
BENCENO 6.6005 / TOLUENO 29.9686

DEAF-STREAMS HEAT C1

BLOCK GA-401 PUMP
PARAM PRES=515.3

BLOCK B2 MIXER
PARAM PRES=507.3

BLOCK EA-401 HEATX
PARAM T-COLD=215.6 PRES-HOT=364 PRES-COLD=480
FEEDS HOT=9 COLD=3
PRODUCTS HOT=10 COLD=4

BLOCK EA-402 HEATX
PARAM T-COLD=406 PRES-HOT=386.34 PRES-COLD=475
FEEDS HOT=7 COLD=4
PRODUCTS HOT=8 COLD=5

BLOCK BA-401 HEATER
PARAM TEMP=665 PRES=425

BLOCK DC-401 RPLUG
PARAM TYPE=ADIABATIC LENGTH=19.92 DIAM=10.58 PDROP=36.7 NPHASE=1
PHASE=V

STOIC 1 MIXED ETMERC -1 / H2 -1 / H2S 1 / C2H6 1
STOIC 2 MIXED MEETSUL -1 / H2 -2 / CH4 1 / C2H6 1 / H2S 1
STOIC 4 MIXED DETSUL -1 / H2 -2 / C2H6 2 / H2S 1
STOIC 5 MIXED TIOFENO -1 / H2 -4 / C4H10-1 1 / H2S 1
STOIC 6 MIXED BENCENO -1 / H2 -3 / CC6 1
STOIC 7 MIXED TOLUENO -1 / H2 -3 / MCC6 1
STOIC 9 MIXED C11H24 -1 / H2 -1 / C9H20-1 1 / C2H6 1
STOIC 10 MIXED C7H16-1 -1 / H2 -1 / C4H10-1 1 / C3H8 1
STOIC 11 MIXED C11H24 -1 / H2 -1 / C8H18-1 1 / C3H8 1
STOIC 12 MIXED C11H24 -1 / H2 -1 / C6H14-1 1 / C5H12-1 1
RATE-CON 1 110 13100
POWLAW-EXP 1 ETMERC 1 / H2 0
RATE-CON 2 110 14240
POWLAW-EXP 2 MEETSUL 1 / H2 0
RATE-CON 4 213 14120
POWLAW-EXP 4 DETSUL 1 / H2 0
RATE-CON 5 230.8 17575
POWLAW-EXP 5 TIOFENO 1 / H2 0
RATE-CON 6 167.3 21000
POWLAW-EXP 6 BENCENO 1 / H2 0
RATE-CON 7 180.182 21500
POWLAW-EXP 7 TOLUENO 1 / H2 0
RATE-CON 9 160 35000
POWLAW-EXP 9 C11H24 1 / H2 0
RATE-CON 10 334.5 30500
POWLAW-EXP 10 C7H16-1 1 / H2 0
RATE-CON 11 247.8 30000

POWLAW-EXP 11 C11H24 1 / H2 0
RATE-CON 12 254.8 29000
POWLAW-EXP 12 C11H24 1 / H2 0

BLOCK EA-403 HEATX
PARAM T-COLD=300 PRES-HOT=370 PRES-COLD=96
FEEDS HOT=8 COLD=17
PRODUCTS HOT=9 COLD=18

BLOCK B8 MIXER
PARAM PRES=349.3

BLOCK EA-404 HEATER
PARAM TEMP=110 PRES=352

BLOCK FA-402 FLASH2
PROPERTIES SYSOP2
PARAM TEMP=110 PRES=352

BLOCK GB-401 COMP
PROPERTIES SYSOP2
PARAM TYPE=POLYTROPIC PRES=515.3

BLOCK EA-405 HEATER
PARAM TEMP=203 PRES=330.4

BLOCK EA-405B HEATER
PARAM TEMP=103 PRES=315

BLOCK FA-404 FLASH2
PARAM TEMP=300 PRES=96

BLOCK EA-406 HEATER
PARAM TEMP=100 PRES=85.3

BLOCK FA-405 FLASH2
PARAM TEMP=100 PRES=85.3

BLOCK B16 MIXER
PARAM PRES=80

BLOCK GA-408 PUMP
PARAM PRES=291.3

BLOCK B18 MIXER
PARAM PRES=285

BLOCK GA-409 PUMP
PARAM PRES=291.3

BLOCK DA-401 RADFRAC
PARAM NSTAGE=28
FEEDS 33 1 / 27 15 / 36 28 ON-STAGE
PRODUCTS 28 1 V / 34 28 L
P-SPEC 1 250.49 / 2 250.68 / 13 252.8 / 14 282.67 / 16 253.38 / 27 255.3 / 28 255.3
COL-SPECS Q1=0 QN=0 MOLE-RDV=1

T-EST 1 188.5 / 2 204.77 / 13 251.63 / 14 282.67 / 15 351.67 / 16 359.24 /
27 466.82 / 28 497.31
L-EST 1 1073 / 2 1130 / 13 898.7 / 14 618.1 / 15 6437 / 16 6763 / 27 8821 / 28 .102E+5
V-EST 1 971 / 2 1235 / 13 1182 / 14 1031 / 15 780.1 / 16 3169 / 27 5280 / 28 5553

BLOCK EA-407 HEATER
PARAM VFRAC=0.029163 PRES=250.3

BLOCK FA-406 FLASH2
PARAM VFRAC=0.029163 PRES=250.3

BLOCK B23 FSPLIT
MOLE-FLOW 37 133.57

BLOCK GA-402 PUMP
PARAM PRES=250.3

BLOCK B25 FSPLIT
MOLE-FLOW 40 3268

BLOCK BA-402 HEATER
PARAM VFRAC=0.85 PRES=255.3

BLOCK GA-403 PUMP
PARAM PRES=305

BLOCK EA-410 HEATER
PARAM TEMP=100 PRES=296.3

BLOCK B29 HEATER
PARAM TEMP=343 PRES=42

BLOCK DA-402 RADFRAC
PARAM NSTAGE=32
FEEDS 45 1 / 41 25 / 49 32 ON-STAGE
PRODUCTS 42 1 V / 47 32 L
P-SPEC 1 37 / 28 42.3
COL-SPECS Q1=0 QN=0 MOLE-RDV=1
T-EST 1 176 / 25 310 / 32 323

BLOCK EA-408 HEATER
PARAM VFRAC=0 PRES=37

BLOCK GA-407 PUMP
PARAM PRES=40

BLOCK B33 FSPLIT
MOLE-FLOW 45 4955

BLOCK B34 FSPLIT
MOLE-FLOW 48 2000

BLOCK EA-409 HEATER
PARAM VFRAC=.75 PRES=42.3

BLOCK B36 FSPLIT
MOLE-FLOW 54 2700

BLOCK GA-406 PUMP
PARAM PRES=81.3

BLOCK EA-411 HEATER
PARAM TEMP=100 PRES=40

BLOCK GA-405 PUMP
PARAM PRES=326.3

RUN-CONTROL MAX-TIME=5000

Nota: Para correr este programa es necesaria la introducción de estimados de composición para la torre DA-401. Si se requiere de esta información, favor de dirigirse al Departamento de Ingeniería Química de la Facultad Química.

C. RESULTADOS DE LA SIMULACION

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la simulación de la planta hidrodesulfuradora de naftas. En la tabla 6.1 se encuentran los valores de las corrientes obtenidas por medio de la simulación, la cual corresponde al diagrama de bloques presentado en la figura 6.1.

En la tabla 6.2 se puede encontrar la comparación entre los resultados de la simulación y los valores de las corrientes reportadas en el diagrama de flujo de proceso.

Como puede observarse en esta comparación, los promedios de los errores obtenidos no sobrepasa el 2.5% en variables globales, mientras que en flujos por componente el de mayor error es el ácido sulfhídrico. El error es grande debido a que no se utilizó un valor apropiado para los parámetros de interacción binaria entre el H_2S y los pesados, los cuales se debieron de haber ajustado previamente. Aunque el error es grande, en todas las corrientes se tienen flujos relativamente pequeños en comparación al flujo total, siendo la diferencia entre el valor real y el de la simulación, para el H_2S , de no más de 2.5 lbmol/hr.

A partir de estas comparaciones, puede observarse que los resultados de la simulación del proceso son lo suficientemente confiables para proceder a proponer las mejoras del proceso, las cuales se incluyen en el siguiente capítulo.

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	1	10	11	12	13	14	15
Fase:	LIQUID	MIXED	VAPOR	MIXED	MIXED	VAPOR	VAPOR
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	1,362.60	234.57	1,597.17	1,597.17	1,539.31	1,539.31
H2S	0.00	14.63	0.00	14.63	14.63	5.13	5.13
CH4	0.00	116.35	25.62	141.97	141.97	114.73	114.73
C2H6	0.00	44.44	21.51	65.95	65.95	33.30	33.30
C3H8	9.00	26.98	13.21	40.19	40.19	10.62	10.62
i-C4H10	17.50	27.01	2.99	30.00	30.00	3.96	3.96
C4H10-1	78.34	92.23	3.56	95.79	95.79	8.38	8.38
2MC4	43.00	50.64	1.00	51.64	51.64	2.09	2.09
22DMC3	23.40	25.62	0.54	26.16	26.16	2.22	2.22
n-C5H12	110.85	120.44	0.82	121.26	121.26	3.58	3.58
22DMC4	35.95	36.76	0.33	37.09	37.09	0.81	0.81
3MC5	68.20	69.08	0.33	69.41	69.41	0.87	0.87
2MC5	136.77	138.74	0.33	139.07	139.07	1.97	1.97
n-C6H14	101.70	108.83	0.40	109.23	109.23	1.13	1.13
n-C7H16	177.97	175.01	0.30	175.31	175.31	0.66	0.66
n-C8H18	991.53	996.74	0.20	996.94	996.94	1.47	1.47
n-C9H20	655.48	656.12	0.09	656.21	656.21	0.38	0.38
n-C10H22	406.78	406.88	0.00	406.88	406.88	0.10	0.10
n-C11H24	203.39	193.39	0.00	193.39	193.39	0.02	0.02
MCC5	205.24	207.22	0.00	207.22	207.22	1.98	1.98
CC6	0.00	9.89	0.00	9.89	9.89	0.08	0.08
MCC6	0.00	36.11	0.00	36.11	36.11	0.15	0.15
ETMERC	2.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	1.63	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	3.28	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	1.90	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
BENCENO	19.50	9.80	0.00	9.80	9.80	0.11	0.11
TOLUENO	79.72	43.94	0.00	43.94	43.94	0.18	0.18
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	3,379.35	4,969.46	305.80	5,275.26	5,275.26	1,733.24	1,733.24
LB/HR	3.81E+05	3.90E+05	2,848.47	3.92E+05	3.92E+05	8,799.89	8,799.89
VARIABLES:							
TEMP F	100.00	215.60	146.00	214.45	110.00	110.00	194.25
PRES PSI	51.30	364.00	406.30	349.30	352.00	352.00	515.30
FRAC VAP	0.00	0.31	1.00	0.35	0.33	1.00	1.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-894.37	-835.74	-949.88	-836.56	-897.80	-783.91	-655.96
BTU/HR	-3.41E+08	-3.26E+08	-2.71E+06	-3.28E+08	-3.52E+08	-6.90E+06	-5.77E+06
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.71	-1.61	-1.59	-1.61	-1.71	-1.82	-1.78
H-ToS	8.64E+06	1.09E+07	-2.70E+05	1.05E+07	7.85E+06	1.70E+06	2.55E+06
DENS. LB/FT3	37.28	9.37	0.58	7.97	9.90	0.29	0.37
PM prom.	112.68	78.38	9.31	74.38	74.38	5.08	5.08

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	16	17	18	19	2	20	21
Fase:	LIQUID	LIQUID	MIXED	VAPOR	LIQUID	MIXED	VAPOR
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	57.85	57.85	57.85	50.97	0.00	50.97	50.65
H2S	9.50	9.50	9.50	4.37	0.00	4.37	3.31
CH4	27.24	27.24	27.24	20.46	0.00	20.46	19.75
C2H6	32.65	32.65	32.65	17.49	0.00	17.49	14.68
C3H8	29.58	29.58	29.58	10.83	9.00	10.83	8.66
i-C4H10	26.04	26.04	26.04	6.76	17.50	6.76	2.77
C4H10-1	87.41	87.41	87.41	19.84	78.34	19.84	6.58
2M4	49.55	49.55	49.55	7.45	43.00	7.45	1.27
22DMC3	23.94	23.94	23.94	4.65	23.40	4.65	1.26
n-C5H12	117.68	117.68	117.68	15.84	110.85	15.84	2.17
22DMC4	36.27	36.27	36.27	3.75	35.95	3.75	0.35
3MCS	68.53	68.53	68.53	5.73	68.20	5.73	0.34
2MCS	137.10	137.10	137.10	12.16	136.77	12.16	0.81
n-C6H14	108.10	108.10	108.10	8.26	101.70	8.26	0.41
n-C7H16	174.65	174.65	174.65	7.58	177.97	7.58	0.13
n-C8H18	995.48	995.48	995.48	24.35	991.53	24.35	0.15
n-C9H20	655.83	655.83	655.83	9.01	655.48	9.01	0.02
n-C10H22	406.78	406.78	406.78	3.10	406.78	3.10	0.00
n-C11H24	193.37	193.37	193.37	0.83	203.39	0.83	0.00
MCC5	205.24	205.24	205.24	14.73	205.24	14.73	0.69
CC6	9.81	9.81	9.81	0.61	0.00	0.61	0.02
MCC6	35.96	35.96	35.96	1.47	0.00	1.47	0.03
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	2.70	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	1.63	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	3.28	0.00	0.00
TIOFENO	0.01	0.01	0.01	0.00	1.90	0.00	0.00
BENCENO	9.69	9.69	9.69	0.67	19.50	0.67	0.03
TOLUENO	43.76	43.76	43.76	1.66	79.72	1.66	0.02
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	3,542.02	3,542.02	3,542.02	252.54	3,379.35	252.54	112.11
LB/HR	3.84E+05	3.84E+05	3.84E+05	14.628.00	3.81E+05	14,628.00	2,414.32
VARIABLES:							
TEMP F	110.00	203.00	300.00	300.00	102.57	100.00	100.00
PRES PSI	352.00	330.40	103.88	96.00	515.30	85.30	85.30
FRAC VAP	0.00	0.00	0.07	1.00	0.00	0.44	1.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-900.41	-851.22	-788.80	-733.39	-891.45	-952.73	-1,037.54
BTU/HR	-3.45E+08	-3.27E+08	-3.03E+08	-1.07E+07	-3.39E+08	-1.39E+07	-2.50E+06
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.71	-1.62	-1.53	-1.30	-1.71	-1.63	-1.28
H-ToS	6.16E+06	7.90E+06	1.34E+07	-5.37E+05	9.53E+06	-1.18E+06	-8.44E+05
DENS. LB/FT3	41.83	34.62	12.06	0.72	37.46	1.80	0.31
PM prom.	108.29	108.29	108.29	57.92	112.66	57.92	21.54

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	22	23	24	25	26	27	28
Fase:	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	57.18	6.88	6.88	0.31	0.31	7.20	11.25
H2S	4.83	5.13	5.13	1.06	1.06	6.19	34.48
CH4	24.84	6.78	6.78	0.71	0.71	7.49	22.05
C2H6	20.58	15.16	15.16	2.81	2.81	17.97	91.20
C3H8	9.99	18.74	18.74	4.17	4.17	22.91	141.66
I-C4H10	4.45	19.28	19.28	3.99	3.99	23.27	151.12
C4H10-1	10.64	67.57	67.57	13.26	13.26	80.82	482.29
2MC4	1.28	42.10	42.10	6.18	6.18	48.28	0.52
22DMC3	1.49	19.29	19.29	3.39	3.39	22.68	37.40
n-C6H12	2.17	101.84	101.84	13.67	13.67	115.51	0.14
22DMC4	0.35	32.53	32.53	3.39	3.39	35.92	0.00
3MC5	0.34	62.81	62.81	5.38	5.38	68.19	0.00
2MC5	0.81	124.94	124.94	11.35	11.35	136.29	0.00
n-C6H14	0.41	99.84	99.84	7.85	7.85	107.69	0.00
n-C7H16	0.13	167.07	167.07	7.45	7.45	174.52	0.00
n-C8H18	0.15	971.13	971.13	24.20	24.20	995.33	0.00
n-C9H20	0.02	646.82	646.82	8.99	8.99	655.81	0.00
n-C10H22	0.00	403.68	403.68	3.10	3.10	406.78	0.00
n-C11H24	0.00	192.54	192.54	0.83	0.83	193.37	0.00
MCC5	0.69	190.51	190.51	14.04	14.04	204.55	0.00
CC6	0.02	9.20	9.20	0.59	0.59	9.78	0.00
MCC6	0.03	34.49	34.49	1.45	1.45	35.93	0.00
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
BENCENO	0.03	9.02	9.02	0.65	0.65	9.66	0.00
TOLUENO	0.02	42.10	42.10	1.64	1.64	43.74	0.00
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	140.46	3,289.48	3,289.48	140.43	140.43	3,429.91	972.11
LB/HR	3,236.26	3.69E+05	3.69E+05	12,214.00	12,214.00	3.81E+05	50,103.00
VARIABLES:							
TEMP F	95.86	300.00	301.89	100.00	103.65	295.96	188.42
PRES PSI	80.00	96.00	291.30	85.30	291.30	285.00	250.49
FRAC VAP	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-1,044.80	-790.19	-788.76	-935.97	-933.44	-793.40	-934.27
BTU/HR	-3.38E+06	-2.92E+08	-2.91E+08	-1.14E+07	-1.14E+07	-3.02E+08	-4.68E+07
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.28	-1.54	-1.54	-1.69	-1.69	-1.55	-1.46
H-ToS	-1.16E+06	1.40E+07	1.44E+07	-3.31E+05	-3.17E+05	1.39E+07	-7.66E+06
DENS. LB/FT3	0.31	31.80	32.07	38.45	38.50	32.17	2.44
PM prom.	23.04	112.16	112.16	86.98	86.98	111.13	51.54

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	29	3	30	31	32	33	34
Fase:	MIXED	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	11.25	1,539.31	6.53	4.72	4.05	4.05	0.00
H2S	34.48	5.13	1.53	32.95	28.29	28.29	0.00
CH4	22.05	114.73	5.09	16.97	14.56	14.56	0.00
C2H6	91.20	33.30	5.90	85.31	73.23	73.23	0.00
C3H8	141.66	19.62	3.33	138.33	118.75	118.75	0.01
I-C4H10	151.12	21.46	1.69	149.44	128.29	128.29	1.37
C4H10-1	482.29	86.72	4.06	478.23	410.55	410.55	26.36
2MC4	0.52	45.09	0.00	0.51	0.44	0.44	150.50
22DMC3	37.40	25.62	0.24	37.17	31.91	31.91	53.66
n-C5H12	0.14	114.43	0.00	0.14	0.12	0.12	360.58
22DMC4	0.00	36.76	0.00	0.00	0.00	0.00	112.16
3MC5	0.00	69.08	0.00	0.00	0.00	0.00	212.91
2MC5	0.00	138.74	0.00	0.00	0.00	0.00	425.53
n-C6H14	0.00	102.82	0.00	0.00	0.00	0.00	336.22
n-C7H16	0.00	178.62	0.00	0.00	0.00	0.00	544.88
n-C8H18	0.00	992.99	0.00	0.00	0.00	0.00	3,107.55
n-C8H20	0.00	655.86	0.00	0.00	0.00	0.00	2,047.54
n-C10H22	0.00	406.88	0.00	0.00	0.00	0.00	1,270.02
n-C11H24	0.00	203.41	0.00	0.00	0.00	0.00	603.73
MCC5	0.00	207.22	0.00	0.00	0.00	0.00	638.64
CC6	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	30.55
MCC6	0.00	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	112.19
ETMERC	0.00	2.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	1.63	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	3.28	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.00	1.90	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
BENCENO	0.00	19.61	0.00	0.00	0.00	0.00	30.17
TOLUENO	0.00	79.90	0.00	0.00	0.00	0.00	136.56
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	972.11	5,112.59	28.35	943.76	810.19	810.19	10,203.00
LB/HR	50,103.00	3.90E+05	821.94	49,281.00	42,306.00	42,306.00	1.17E+06
VARIABLES:							
TEMP F	100.81	109.48	100.81	100.81	100.81	100.81	497.28
PRES PSI	250.30	507.30	250.30	250.30	250.30	250.30	255.30
FRAC VAP	0.03	0.31	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-1,102.65	-886.13	-1,066.13	-1,103.26	-1,103.26	-1,103.26	-642.01
BTU/HR	-5.52E+07	-3.45E+08	-8.76E+05	-5.44E+07	-4.67E+07	-4.67E+07	-7.48E+08
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.73	-1.71	-1.37	-1.73	-1.73	-1.73	-1.38
H-ToS	-8.79E+06	1.18E+07	-2.71E+05	-8.52E+06	-7.31E+06	-7.31E+06	1.13E+08
DENS. LB/FT3	22.33	13.16	1.33	30.29	30.29	30.29	22.36
PM prom.	51.54	76.19	28.99	52.22	52.22	52.22	114.25

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	35	36	37	38	39	4	40
Fase:	LIQUID	MIXED	LIQUID	LIQUID	LIQUID	MIXED	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.67	0.67	0.67	1,539.31	0.00
H2S	0.00	0.00	4.66	4.66	4.66	5.13	0.00
CH4	0.00	0.00	2.40	2.40	2.40	114.73	0.00
C2H6	0.00	0.00	12.07	12.07	12.07	33.30	0.00
C3H8	0.01	0.01	19.58	19.58	19.58	19.62	0.00
I-C4H10	0.93	0.93	21.15	21.15	21.15	21.46	0.44
C4H10-1	19.27	19.27	67.68	67.68	67.68	88.72	9.08
2MC4	102.29	102.29	0.07	0.07	0.07	45.09	48.20
22DMC3	36.47	36.47	5.26	5.26	5.26	25.62	17.19
n-C5H12	245.09	245.09	0.02	0.02	0.02	114.43	115.49
22DMC4	76.24	76.24	0.00	0.00	0.00	36.76	35.92
3MC5	144.71	144.71	0.00	0.00	0.00	69.08	68.19
2MC5	289.23	289.23	0.00	0.00	0.00	138.74	136.29
n-C6H14	228.53	228.53	0.00	0.00	0.00	102.82	107.69
n-C7H16	370.36	370.36	0.00	0.00	0.00	178.62	174.52
n-C8H18	2,112.22	2,112.22	0.00	0.00	0.00	992.99	995.33
n-C9H20	1,391.73	1,391.73	0.00	0.00	0.00	655.86	655.82
n-C10H22	863.24	863.24	0.00	0.00	0.00	406.88	406.78
n-C11H24	410.36	410.36	0.00	0.00	0.00	203.41	193.37
MCC5	434.09	434.09	0.00	0.00	0.00	207.22	204.55
CC6	20.76	20.76	0.00	0.00	0.00	0.08	9.78
MCC6	76.25	76.25	0.00	0.00	0.00	0.15	35.93
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.70	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.63	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.28	0.00
TIOFENO	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	1.90	0.01
BENCENO	20.50	20.50	0.00	0.00	0.00	19.61	9.66
TOLUENO	92.82	92.82	0.00	0.00	0.00	79.90	43.74
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	6,935.13	6,935.13	133.57	133.57	133.57	5,112.59	3,268.00
LB/HR	7.92E+05	7.92E+05	6,974.72	6,974.72	6,974.72	3.90E+05	3.73E+05
VARIABLES:							
TEMP F	497.28	529.81	100.81	102.30	100.00	249.55	497.28
PRES PSI	255.30	255.30	250.30	305.00	296.30	480.00	255.30
FRAC VAP	0.00	0.85	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-642.01	-563.04	-1,103.26	-1,102.32	-1,103.79	-800.80	-642.01
BTU/HR	-5.09E+08	-4.46E+08	-7.69E+06	-7.69E+06	-7.70E+06	-3.12E+08	-2.40E+08
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.38	-1.30	-1.73	-1.73	-1.74	-1.57	-1.38
H-ToS	7.71E+07	1.05E+08	-1.21E+06	-1.20E+06	-1.20E+06	1.69E+07	3.63E+07
DENS. LB/FT3	22.38	4.84	30.29	30.31	30.42	10.25	22.38
PM prom.	114.25	114.25	52.22	52.22	52.22	76.19	114.25

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	41	42	43	44	45	46	47
Fase:	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H2S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CH4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	0.00	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.00
i-C4H10	0.44	6.67	6.67	6.67	6.23	0.44	0.00
C4H10-1	9.08	137.98	137.98	137.98	128.90	9.08	0.00
2MC4	48.20	730.57	730.57	730.57	682.49	48.08	0.20
2ZDMC3	17.19	261.11	261.11	261.11	243.92	17.18	0.00
n-CSH12	115.49	1,741.49	1,741.49	1,741.49	1,626.88	114.62	1.47
2ZDMC4	35.92	506.29	506.29	506.29	472.97	33.32	4.38
3MCS	68.19	402.95	402.95	402.95	376.43	28.52	70.23
2MCS	136.29	1,442.69	1,442.69	1,442.69	1,347.74	94.95	69.68
n-C6H14	107.69	52.09	52.09	52.09	48.66	3.43	175.70
n-C7H16	174.52	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	294.10
n-C8H18	995.33	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1,677.32
n-C9H20	655.82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1,105.17
n-C10H22	406.78	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	685.50
n-C11H24	193.37	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	325.86
MCC5	204.55	21.72	21.72	21.72	20.29	1.43	342.30
CC6	9.78	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	16.49
MCC6	35.93	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	60.55
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
BENCENO	9.66	0.44	0.44	0.44	0.41	0.03	16.23
TOLUENO	43.74	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	73.71
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	3,268.00	5,304.09	5,304.09	5,304.09	4,955.00	349.09	4,918.91
LB/HR	3.73E+05	4.15E+05	4.15E+05	4.15E+05	3.87E+05	27,290.00	5.83E+05
VARIABLES:							
TEMP F	343.00	172.08	157.58	157.60	157.60	157.60	324.53
PRES PSI	42.00	37.00	37.00	40.00	40.00	40.00	42.30
FRAC VAP	0.63	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-688.75	-850.03	-994.07	-994.05	-994.05	-994.05	-762.31
BTU/HR	-2.57E+08	-3.52E+08	-4.12E+08	-4.12E+08	-3.85E+08	-2.71E+07	-4.45E+08
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.42	-1.48	-1.71	-1.71	-1.71	-1.71	-1.53
H-ToS	2.71E+07	-2.28E+07	-3.12E+07	-3.12E+07	-2.92E+07	-2.06E+06	3.34E+07
DENS. LB/FT3	0.95	0.46	33.39	33.39	33.39	33.39	31.55
PM prom.	114.25	78.18	78.18	78.18	78.18	78.18	118.56

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	48	49	5	50	51	52	53
Fase:	LIQUID	MIXED	MIXED	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	1,539.17	0.00	0.00	0.00	0.00
H2S	0.00	0.00	5.13	0.00	0.00	0.00	0.00
CH4	0.00	0.00	114.72	0.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	0.00	0.00	33.30	0.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	0.00	0.00	19.62	0.00	0.00	0.00	0.00
i-C4H10	0.00	0.00	21.46	0.00	0.00	0.00	0.00
C4H10-T	0.00	0.00	96.72	0.00	0.00	0.00	0.00
2MCF	0.09	0.08	45.09	0.12	0.07	0.07	0.07
22DMC3	0.00	0.00	25.62	0.00	0.00	0.00	0.00
n-CSH12	0.60	0.60	114.43	0.82	0.07	0.07	0.07
22DMC4	1.78	1.78	36.76	2.60	0.20	0.20	0.20
3MCS	28.55	28.55	69.08	41.67	3.13	3.13	3.13
2MCS	28.33	28.33	138.74	41.35	3.10	3.10	3.10
n-C8H14	71.44	71.44	102.82	104.26	7.82	7.82	7.82
n-C7H16	119.58	119.58	172.62	174.52	13.09	13.09	13.09
n-C8H18	681.99	681.99	992.99	995.33	74.65	74.65	74.65
n-C9H20	449.36	449.36	655.86	656.81	49.18	49.18	49.18
n-C10H22	278.72	278.72	408.88	408.78	30.51	30.51	30.51
n-C11H24	132.49	132.49	203.41	193.37	14.50	14.50	14.50
MCC5	139.18	139.18	207.22	200.12	15.23	15.23	15.23
CC6	6.70	6.70	0.09	9.79	0.73	0.73	0.73
MCC8	24.62	24.62	0.15	35.93	2.69	2.69	2.69
ETMERC	0.00	0.00	2.70	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	1.63	0.00	0.00	0.00	0.00
DIETSUL	0.00	0.00	3.28	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.00	0.00	1.90	0.01	0.00	0.06	0.00
BENCENO	6.60	6.60	19.61	9.63	0.72	0.72	0.72
TOLUENO	29.97	29.97	79.90	43.74	3.28	3.28	3.28
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	2,000.00	2,000.00	5,112.43	2,916.91	2,781.91	2,181.91	2,181.91
LB/HR	2.37E+05	2.37E+05	3.90E+05	3.48E+05	25,955.00	25,955.00	25,955.00
VARIABLES:							
TEMP F	324.53	382.00	520.00	324.53	324.53	325.13	1000.00
PRES PSI	42.30	42.30	475.00	42.30	42.30	81.30	40.00
FRAC VAP	0.00	0.75	0.92	0.00	0.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-792.31	-652.97	-548.42	-792.31	-792.31	-791.89	-892.84
BTU/HR	-1.81E+08	-1.55E+08	-2.14E+08	-2.54E+08	-1.98E+07	-1.98E+07	-2.32E+07
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.53	-1.39	-1.28	-1.53	-1.53	-1.53	-1.72
HI-ToS	1.38E+07	2.22E+07	5.36E+07	1.98E+07	1.49E+08	1.49E+08	8.10E+05
DENS. LB/FT3	31.55	0.83	4.49	31.56	31.55	31.80	37.40
PM prom.	118.56	118.56	76.19	118.56	118.56	118.56	118.56

Tabla 6.1 Resultados de la simulación

No. Corriente:	54	55	56	6	7	8	9
Fase:	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR	VAPOR	VAPOR	MIXED
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.00	1,539.17	1,362.60	1,362.60	1,362.60
H2S	0.00	0.00	0.00	5.13	14.63	14.63	14.63
CH4	0.00	0.00	0.00	114.72	116.35	116.35	116.35
C2H6	0.00	0.00	0.00	33.30	44.44	44.44	44.44
C3H8	0.00	0.00	0.00	19.62	26.98	26.98	26.98
i-C4H10	0.00	0.00	0.00	21.46	27.01	27.01	27.01
C4H10-1	0.00	0.00	0.00	86.72	92.23	92.23	92.23
2MC4	0.11	0.11	0.11	45.09	50.64	50.64	50.64
22DMC3	0.00	0.00	0.00	25.62	25.62	25.62	25.62
n-C5H12	0.81	0.81	0.81	114.43	120.44	120.44	120.44
22DMC4	2.41	2.41	2.41	36.76	36.76	36.76	36.76
3MC5	38.55	38.55	38.55	69.08	69.08	69.08	69.08
2MC5	38.25	38.25	38.25	138.74	138.74	138.74	138.74
n-C6H14	96.44	96.44	96.44	102.82	108.83	108.83	108.83
n-C7H16	161.43	161.43	161.43	178.62	175.01	175.01	175.01
n-C8H18	920.68	920.68	920.68	992.99	996.74	996.74	996.74
n-C9H20	606.63	606.63	606.63	655.86	656.12	656.12	656.12
n-C10H22	378.27	378.27	378.27	408.88	406.88	406.88	406.88
n-C11H24	178.87	178.87	178.87	203.41	193.39	193.39	193.39
MCC5	187.89	187.89	187.89	207.22	207.22	207.22	207.22
CC6	9.05	9.05	9.05	8.0386-02	9.89	9.89	9.89
MCC8	33.24	33.24	33.24	0.15	36.11	36.11	36.11
ETMERC	0.00	0.00	0.00	2.70	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	1.63	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	3.28	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.01	0.01	0.01	1.90	0.01	0.01	0.01
BENCENO	8.91	8.91	8.91	19.61	9.80	9.80	9.80
TOLUENO	40.46	40.46	40.46	79.90	43.94	43.94	43.94
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	2,700.00	2,700.00	2,700.00	5,112.43	4,969.46	4,969.46	4,969.46
LB/HR	3.20E+05	3.20E+05	3.20E+05	3.90E+05	3.90E+05	3.90E+05	3.90E+05
VARIABLES:							
TEMP F	324.53	327.35	232.58	665.00	682.34	406.00	334.57
PRES PSI	42.30	326.30	315.00	425.00	388.30	386.34	370.00
FRAC VAP	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00	0.47	0.37
ENTALPIA:							
BTU/LB	-762.31	-760.20	-819.14	-435.80	-435.80	-688.18	-750.41
BTU/HR	-2.44E+08	-2.43E+08	-2.62E+08	-1.70E+08	-1.70E+08	-2.68E+08	-2.92E+08
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.53	-1.53	-1.61	-1.17	-1.16	-1.42	-1.49
H-ToS	1.83E+07	1.89E+07	1.37E+07	7.43E+07	7.32E+07	2.86E+07	1.99E+07
DENS. LB/FT3	31.55	31.96	34.67	2.97	2.72	6.12	7.33
PM prom.	118.56	118.56	118.56	76.19	78.38	78.38	78.38

**TABLA 6.2. ANALISIS DE RESULTADOS
OBTENIDOS EN LA SIMULACION**

PROMEDIOS	
DATO	% ERROR
FLUJOS COMPONENTES	
H2	3.71
H2S	15.95
METANO	6.21
ETANO	13.34
PROPANO	3.77
I-BUTANO	4.17
BUTANO	4.42
I-PENTANO	10.48
PENTANO	6.85
ISOHEXANO	11.28
HEXANO+	4.61
PROM. COMPONENTES	7.71
TEMPERATURA	2.52
PRESION	1.19
PESO MOLECULAR	1.50
FRACCION DE VAPOR	1.46
FLUJO TOTAL	1.84

NOTAS: TODOS LOS FLUJOS COMPARADOS ESTAN LBMOL/HR
TEMPERATURAS EN GRADOS FARENHEIT
PRESIONES EN PSIA

CAPITULO 7

ANALISIS DE TRABAJO PERDIDO Y PROPUESTA DE MEJORAS DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTAS

A. TRABAJO PERDIDO

Para poder proponer las mejoras a la planta hidrodesulfuradora de naftas es necesario llevar a cabo un análisis termodinámico del proceso, ya que esto permite detectar los problemas existentes en cada uno de los equipos y en el proceso global. En esta primera sección se presentan las bases para poder efectuar este análisis.

Un proceso se puede definir como un sistema en donde existen entradas y salidas de materia y un intercambio de energía a través de sus fronteras, en forma de calor(Q) y/o trabajo(W) (fig. 7.1). Para que el proceso se lleve a cabo, se requiere una cierta cantidad de energía, sin embargo, el intercambio de energía a través de las fronteras del sistema es siempre mayor que el mínimo necesario. Al excedente de energía se le conoce como trabajo perdido.

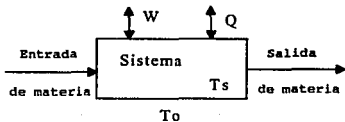


Figura 7.1

El análisis termodinámico de un proceso tiene como finalidad determinar la cantidad de trabajo perdido para posteriormente comparar dos o más procesos equivalentes y seleccionar, desde el punto de vista energético, el que haga un uso más eficiente de la energía. En un proceso específico, se hace un análisis termodinámico y se estudian las posibilidades de disminuir la energía en exceso mediante modificaciones a la estructura y condiciones del proceso.

Para realizar el análisis termodinámico del proceso es necesario determinar la cantidad de trabajo perdido en cada una de las operaciones unitaria, incluyendo mezcladores y divisores de corrientes, para así identificar los equipos o las zonas del proceso en donde existe una mayor cantidad de trabajo perdido.

Ya que se han identificado los equipos o puntos del proceso en donde existen cantidades considerables de trabajo perdido, se proponen modificaciones locales o al proceso en su conjunto. Las posibilidades de modificación son muy amplias, y no son proporcionadas por la termodinámica pero se tienen ciertas reglas básicas para la disminución del trabajo perdido, las cuales se enlistan a continuación.

Reactores:

1. Operar cerca de la curva de equilibrio.
2. Minimizar el uso de diluentes y productos de desecho.
3. Maximizar conversiones.

Separaciones:

1. Localizar correctamente el plato de alimentación de columnas.
2. Considerar el precalentamiento de la alimentación.
3. Considerar la utilización de reboilers y condensadores intermedios para mezclas con amplio rango de ebullición.
4. Utilizar R/R_{min} entre 1.05 y 1.10 para separaciones difíciles.
5. Considerar bombas de calor para mezclas con pequeño rango de ebullición.

Transferencia de calor:

1. Minimizar LMTD.
2. Minimizar el uso de servicios auxiliares.
3. Aumentar la presión a la cual se genera vapor.
4. Integración térmica de procesos.
5. Instalar equipos recuperadores de calor.

Flujo de fluidos:

1. Aumentar factor de potencia en equipos de compresión y bombeo.
2. Operar equipos de bombeo cerca de su punto de mayor eficiencia.
3. Reemplazar válvulas de expansión con turbinas.
3. Minimizar caída de presión.

Mezclado:

1. Evitar mezclar corrientes a diferentes condiciones.

B. CALCULO DE TRABAJO PERDIDO

En esta sección se presentan las relaciones básicas para el cálculo del trabajo perdido, no se deducen las ecuaciones y sólo se mencionan los fundamentos principales sobre los que se sustentan.

El balance de energía para un proceso a régimen permanente se puede expresar de la siguiente forma:

$$W + Q = \sum H_s m_s - \sum H_e m_e \quad (1)$$

en donde sólo se consideran las dos principales manifestaciones de energía de un proceso químico: trabajo y calor. Sin embargo, el calor no es una forma de energía comparable con el trabajo mecánico ya que la transformación del primero en el segundo no se puede llevar a cabo por completo debido a las restricciones impuestas por la segunda ley de la termodinámica. Una manera adecuada de transformar el calor en trabajo es mediante la eficiencia de Carnot:

$$E_f = (1 - T_o/T_f) \quad (2)$$

en donde T_o es la temperatura ambiente y T_f la temperatura de fuente térmica que suministra el calor Q . De esta manera, un trabajo mecánico equivalente (W_e) para todo el sistema, al que contribuyen el trabajo mecánico y el calor, se puede expresar como:

$$W_e = W + Q \quad (E_f) \quad (3)$$

Además se puede demostrar, mediante la conjunción de la primera y segunda leyes de la termodinámica, que el trabajo mínimo equivalente (W_{emin}) o trabajo reversible de un proceso, está regido por la siguiente ecuación:

$$W_{emin} = \sum (H_s - T_o S_s) m_s - \sum (H_c - T_o S_c) m_c \quad (4)$$

El trabajo mínimo equivalente es la cantidad mínima de energía que el proceso requiere o, en el caso contrario, la máxima cantidad disponible que un proceso puede proporcionar.

Como se ha mencionado, todos los procesos intercambian con los alrededores más energía que la expresada por W_{emin} ; este exceso de energía es el trabajo perdido W_p . La expresión matemática que define al trabajo perdido está en función de la generación de entropía en el sistema:

$$W_p = T_o \Delta S \quad (5)$$

en donde:

$$\Delta S = \sum S_s m_s - \sum S_c m_c - Q/T_f \quad (6)$$

que representa la irreversibilidad del proceso.

El trabajo equivalente (W_e) está compuesto entonces por dos términos: el trabajo reversible o trabajo equivalente mínimo (W_{emin}) y el trabajo perdido (W_p), de manera que se puede establecer que:

$$W_e = W_{emin} + W_p \quad (7)$$

Con estas relaciones es posible determinar el trabajo perdido de un sistema, conociendo las propiedades de las corrientes. El nivel del análisis termodinámico depende de lo que elijamos como sistema, ya que este puede ser todo el proceso o una operación unitaria.

C. TRABAJO PERDIDO EN PROCESO ACTUAL

En el presente trabajo el cálculo de trabajo perdido se realizó a través del simulador de procesos Aspen plus ya que éste permite extraer, mediante una subrutina en fortran, las variables necesarias para el cálculo a partir de los resultados obtenidos en la simulación. De esta forma, al realizar modificaciones al proceso, automáticamente se obtienen los nuevos valores de trabajo perdido para cada uno de los equipos.

Las ecuaciones utilizadas son las descritas en la sección anterior, y fueron incluidas dentro de la misma subrutina de Fortran.

En la tabla 7.1 se encuentran los valores de trabajo perdido en el proceso que actualmente se encuentra operando, en ella se resumen los resultados del cálculo tanto parciales como globales, indicándose en cada caso el equipo y las corrientes que entran y salen de cada uno de ellos.

TRABAJO PERDIDO EN PROCESO ACTUAL

	Equipo	Corrientes de entrada	Corrientes de salida	Cambio de Entalpia (BTU/HR)	Cambio de Entropia (BTU/HR-R)	Calor (BTU/HR)	Trabajo Equivalente (BTU/HR)	Trabajo Eq. Min. (BTU/HR)	Entropia Generada (BTU/HR-R)	Trabajo Perdido (BTU/HR)
BOMBA	GA-401	1	2	1,113,100	425	0	1,113,000	685,338	425	228,010
MEZCLADOR	B2	2,15	3	0	564	0	0	-302,325	564	302,700
CAMBIADOR	EA-401	3,9	4,10	258	7,154	0	0	-3,834,018	7,154	3,838,800
CAMBIADOR	EA-402	4,7	5,8	-23	15,063	0	0	-8,073,791	15,063	8,084,100
CALENTADOR	BA-401	5	6	43,867,000	42,874	43,867,000	25,183,000	20,886,536	8,059	4,324,800
CAMBIADOR	EA-403	6,17	9,18	30	5,888	0	0	-3,156,045	5,888	3,160,000
MEZCLADOR	B8	10,11	12	-58	346	0	0	-185,353	346	185,590
ENFRIADOR	EA-404	12	13	-24,025,000	-39,888	-24,025,000	-1,082,900	-2,646,104	2,864	1,537,000
FLASH	FA-402	13	14,16	0	0	0	0	0	0	0
COMPRESOR	GB-401	14	15	1,125,900	512	0	1,125,900	651,221	512	275,000
CAMBIADOR	EA-405	16,55	17,56	1	6,449	0	0	-3,456,556	6,449	3,460,900
FLASH	FA-404	18	19,23	5	0	5	2	0	0	0
ENFRIADOR	EA-406	19	20	-3,208,500	-4,790	-3,208,500	-105,970	-641,221	991	532,060
FLASH	FA-405	20	21,25	0	0	0	0	0	0	0
MEZCLADOR	B16	21,30	22	0	85	0	0	-45,645	85	45,702
BOMBA	GA-408	23	24	526,480	143	0	526,470	449,703	143	76,864
MEZCLADOR	B18	24,26	27	43	424	0	0	-227,387	32	227,670
BOMBA	GA-409	25	26	30,919	32	0	30,818	13,588	32	17,351
TORRE	DA-401	27,33,36	28,34	0	11,136	0	0	-5,968,696	11,136	5,976,200
ENFRIADOR	EA-407	28	29	-8,436,300	-13,625	-8,436,300	-380,240	-1,133,300	1,388	743,800
FLASH	FA-408	29	30,31	0	0	0	0	0	0	0
DIVISOR	B23	31	32,37	0	0	0	0	0	0	0
BOMBA	GA-402	32	33	201	0	0	0	12	0	-12
DIVISOR	B25	34	35,40	0	0	0	0	0	0	0
REHÉRVICO	BA-402	35	38	62,572,000	64,243	62,573,000	35,922,000	28,137,752	14,581	7,826,100
BOMBA	GA-403	37	38	6,587	8	0	6,567	2,520	8	4,051
ENFRIADOR	EA-410	38	39	-10,260	-18	-10,260	-339	-807	1	457
ENFRIADOR	B29	40	41	-17,451,000	-15,368	-17,451,000	-576,370	-9,214,824	16,078	8,628,700
TORRE	DA-402	41,45,49	42,47	0	17,777	0	0	-9,528,472	17,777	9,540,300
ENFRIADOR	EA-408	42	43	-59,728,000	-95,551	-59,726,000	-2,691,600	-8,510,664	10,724	5,755,000
BOMBA	GA-407	43	44	6,609	3	0	6,609	7,120	3	1,491
DIVISOR	B33	44	45,46	-87	0	0	0	-53	0	53
DIVISOR	B34	47	48,50	0	0	0	0	0	0	0
REHÉRVICO	EA-409	49	49	25,929,000	32,248	25,929,000	11,715,000	8,644,072	5,764	3,093,100
DIVISOR	B36	50	51,54	0	0	0	0	0	0	0
BOMBA	GA-406	51	52	11,021	6	0	11,021	7,544	6	3,481
ENFRIADOR	EA-411	52	53	-3,401,400	-5,063	-3,401,400	-112,340	-687,625	1,068	571,800
BOMBA	GA-405	54	55	677,260	188	0	677,240	576,647	188	100,730
TOTAL										68,541,798

77

Tabla 7.1 Trabajo perdido en proceso actual

D. MODIFICACIONES AL PROCESO

A partir de la tabla 7.1, se puede observar que los valores mayores de trabajo perdido se encuentran principalmente en dos áreas del proceso:

- 1) Tren de intercambio anterior al reactor, incluyendo calentador BA-401 y enfriador EA-404.
- 2) Torre desisohexanizadora.

Aunque el calentador a fuego directo (BA-402) de la torre desbutanizadora tiene una gran cantidad de trabajo perdido, en la realidad solo suministra el 10% del calor reportado ya que el resto se recupera de la planta reformadora de naftas(ver descripción del proceso, pag. 5.4). Es por esta razón que no se proponen mejoras sobre este sistema.

Las modificaciones planteadas se pueden observar en la fig. 7.1 y son las siguientes:

- 1) Reconexión de la reposición de hidrógeno: Este cambio se plantea ya que la reposición de hidrógeno tiene una temperatura mayor a la de salida del enfriador EA-404, por lo que se está enfriando y posteriormente calentando. El nuevo punto de entrada es después del calentador de fuego directo BA-401 ya que en este punto se tiene la presión suficientemente baja para poder inyectarse. Al encontrarse las dos corrientes a tan diferentes temperaturas, el trabajo perdido del mezclador aumenta, pero el global disminuye, disminuyendo la carga del enfriador EA-404.
- 2) Precaentamiento de la alimentación de nafta a partir de un enfriador interetapa propuesto en la torre desisohexanizadora: Al precalentar la mezcla de alimentación se reduce el LMTD del tren de intercambio formado por los cambiadores EA-401 al 403, con lo cual se reduce el

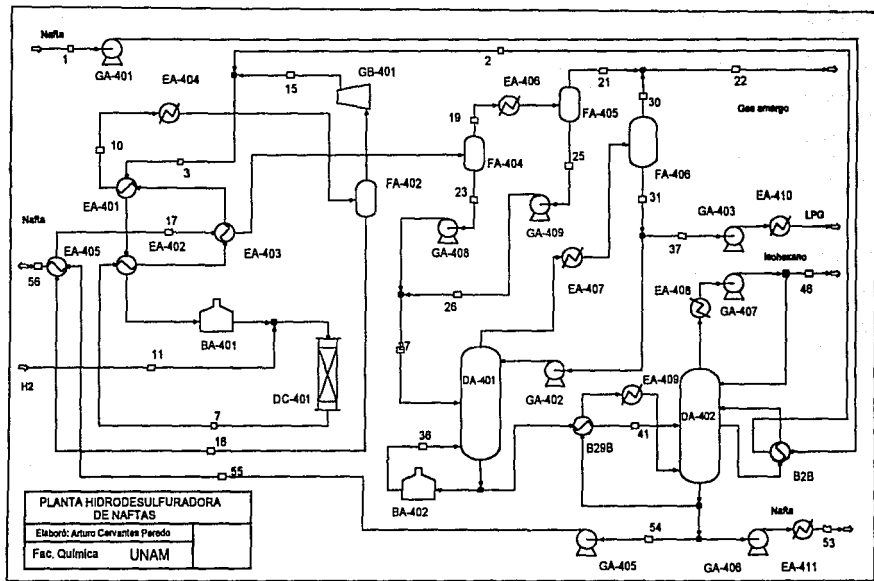


Fig. 7.1 Diagrama de flujo que incluye mejoras propuestas

ESTA TESIS NO DEBE
 SAIR DE LA BIBLIOTECA

trabajo perdido en este tren. Al mismo tiempo se provoca una disminución del consumo de combustóleo en el calentador de fuego directo BA-401. Como resultado de la disminución del LMTD el área de intercambio de calor aumenta.

3) Preenfriamiento de la mezcla de alimentación a la torre DA-402 con los fondos de la misma torre: se propone la introducción de un intercambiador en el que se enfría la carga a la torre cediendo calor a la corriente que entra al reboiler de la misma torre. De esta forma se reduce el consumo de vapor en el reboiler y se permite una mejor operación de la torre, ya que anteriormente se alimentaba a una temperatura superior en 30 °F a la del fondo de la columna.

4) Aumento en la presión de operación de la torre desisohexanizadora: al aumentar la presión de la torre desisohexanizadora en 7 psia se provoca una disminución en la carga del condensador EA-408, provocando una disminución en el consumo de agua de enfriamiento. El aumento en el consumo de vapor es insignificante debido a la modificación anterior.

5) Introducción de un enfriador interetapa en la torre desisohexanizadora: con la implementación de esta modificación se permite recuperar calor de la torre a una temperatura mayor a la que se encuentra el condensador, de esta forma se puede utilizar este calor dentro del proceso. Se propone precalentar la carga de alimentación y colocar el interenfriador en la etapa 15 de la torre debido a que se tienen los niveles adecuados de temperatura para el intercambio de calor.

E. SIMULACION DEL PROCESO MODIFICADO

La simulación del proceso modificado fue realizada a partir de la simulación del proceso original, únicamente se añadieron los módulos necesarios para la implementación de las modificaciones. Esto se puede observar en la figura 7.2.

Se introdujeron los módulos B2B y B29B para simular el precalentador de la alimentación y el enfriador de la alimentación a la torre DA-402 respectivamente. Se eliminó el bloque b29 y se introdujo la corriente de calor C2, la cual simula el intercambio de calor con el interenfriador de la torre.

Los resultados de esta simulación se presenta en las tablas 7.2, las cuales incluyen las corrientes que fue necesario añadir para la implantación de las mejoras.

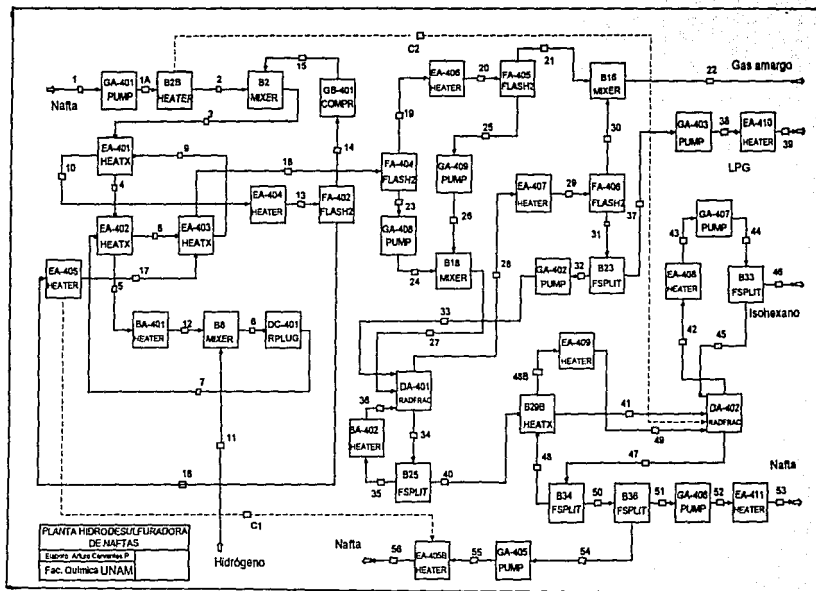


Fig. 7.2 Diagrama de bloques del proceso modificado

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	1	10	11	12	13	14	15
Fase:	LIQUID	MIXED	VAPOR	VAPOR	MIXED	VAPOR	VAPOR
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	1,349.68	234.57	1,293.57	1,349.68	1,291.84	1,291.84
H2S	0.00	13.82	0.00	4.32	13.82	4.31	4.31
CH4	0.00	123.59	25.62	96.46	123.59	96.34	96.34
C2H6	0.00	60.63	21.51	28.00	60.63	27.96	27.96
C3H8	9.00	38.47	13.21	17.92	38.47	8.91	8.91
I-C4H10	17.50	29.36	2.99	20.83	29.36	3.32	3.32
C4H10-1	78.34	94.42	3.56	85.38	94.42	7.03	7.03
2MC4	43.00	51.30	1.00	44.76	51.30	1.75	1.75
22DMC3	23.40	25.80	0.54	25.27	25.80	1.87	1.87
n-C5H12	110.85	120.65	0.82	113.86	120.65	3.01	3.01
22DMC4	35.95	36.96	0.33	36.63	36.96	0.88	0.88
3MC5	68.20	69.27	0.33	68.94	69.27	0.73	0.73
2MC5	136.77	138.75	0.33	138.43	138.75	1.65	1.65
n-C6H14	101.70	109.01	0.40	102.64	109.01	0.95	0.95
n-C7H16	177.97	175.22	0.30	178.52	175.22	0.55	0.55
n-C8H18	991.53	996.68	0.20	992.76	996.68	1.23	1.23
n-C9H20	655.48	656.15	0.09	655.80	656.15	0.32	0.32
n-C10H22	406.78	406.86	0.00	406.86	406.86	0.08	0.08
n-C11H24	203.39	193.45	0.00	203.41	193.45	0.02	0.02
MCC5	205.24	206.90	0.00	206.91	206.90	1.66	1.66
CC6	0.00	9.82	0.00	0.07	9.82	0.07	0.07
MCC6	0.00	35.90	0.00	0.13	35.90	0.13	0.13
ETMERC	2.70	0.00	0.00	2.70	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	1.63	0.00	0.00	1.63	0.00	0.00	0.00
DETSUL	3.28	0.00	0.00	3.28	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	1.90	0.01	0.00	1.90	0.01	0.00	0.00
BENCENO	19.50	9.84	0.00	19.59	9.84	0.09	0.09
TOLUENO	79.72	44.10	0.00	79.87	44.10	0.15	0.15
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	3,379.35	4,996.64	305.80	4,835.94	4,996.64	1,454.66	1,454.66
LB/HR	3.81E+05	3.91E+05	2,848.47	3.88E+05	3.91E+05	7,386.31	7,386.31
VARIABLES:							
TEMP F	100.00	215.60	146.00	672.00	110.00	110.00	182.59
PRES PSI	51.30	364.00	425.00	425.00	352.00	352.00	490.00
FRAC VAP	0.00	0.31	1.00	1.00	0.29	1.00	1.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-894.37	-837.03	-950.07	-433.67	-898.16	-784.04	-674.04
BTU/HR	-3.41E+08	-3.27E+08	-2.71E+06	-1.68E+08	-3.51E+08	-5.79E+06	-4.98E+06
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.71	-1.61	-1.60	-1.17	-1.71	-1.82	-1.77
H-ToS	8.63E+06	1.03E+07	-2.56E+05	7.47E+07	7.60E+06	1.42E+06	2.04E+06
DENS. LB/FT3	37.28	9.36	0.60	3.15	11.26	0.29	0.36
PM prom.	112.66	78.24	9.31	80.26	78.24	5.08	5.08

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	16	17	18	19	1A	2	20
Fase:	LIQUID	LIQUID	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID	MIXED
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	57.85	57.85	57.85	50.96	0.00	0.00	50.96
H2S	9.50	9.50	9.50	4.37	0.00	0.00	4.37
CH4	27.25	27.25	27.25	20.47	0.00	0.00	20.47
C2H6	32.66	32.66	32.66	17.49	0.00	0.00	17.49
C3H8	29.56	29.56	29.56	10.83	0.00	0.00	10.83
i-C4H10	26.04	26.04	26.04	6.76	17.50	17.50	6.76
C4H10-1	87.39	87.39	87.39	19.84	78.34	78.34	19.84
2MC4	49.55	49.55	49.55	7.45	43.00	43.00	7.45
22DMC3	23.94	23.94	23.94	4.65	23.40	23.40	4.65
n-C5H12	117.64	117.64	117.64	15.83	110.85	110.85	15.83
22DMC4	36.27	36.27	36.27	3.75	35.95	35.95	3.75
3MC5	68.53	68.53	68.53	5.73	68.20	68.20	5.73
2MC5	137.10	137.10	137.10	12.16	136.77	136.77	12.16
n-C6H14	108.06	108.06	108.06	8.26	101.70	101.70	8.26
n-C7H16	174.67	174.67	174.67	7.58	177.97	177.97	7.58
n-C8H18	995.45	995.45	995.45	24.35	991.53	991.53	24.35
n-C9H20	655.83	655.83	655.83	9.01	655.46	655.46	9.01
n-C10H22	406.78	406.78	406.78	3.10	406.78	406.78	3.10
n-C11H24	193.44	193.44	193.44	0.83	203.39	203.39	0.83
MCC5	205.24	205.24	205.24	14.73	205.24	205.24	14.73
CC6	9.75	9.75	9.75	0.61	0.00	0.00	0.61
MCC6	35.77	35.77	35.77	1.47	0.00	0.00	1.47
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	2.70	2.70	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	1.63	1.63	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	3.28	3.28	0.00
TIOFENO	0.01	0.01	0.01	0.00	1.90	1.90	0.00
BENCENO	9.75	9.75	9.75	0.68	19.50	19.50	0.68
TOLUENO	43.95	43.95	43.95	1.67	79.72	79.72	1.67
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	3,541.98	3,541.98	3,541.98	252.53	3,379.35	3,379.35	252.53
LB/HR	3.84E+05	3.84E+05	3.84E+05	14,627.00	3.81E+05	3.81E+05	14,627.00
VARIABLES:							
TEMP F	110.00	203.00	300.00	300.00	102.59	200.00	100.00
PRES PSI	352.00	330.40	96.00	96.00	520.00	515.50	85.30
FRAC VAP	0.00	0.00	0.07	1.00	0.00	0.00	0.44
ENTALPIA:							
BTU/LB	-900.35	-851.16	-787.97	-733.34	-891.42	-838.60	-952.67
BTU/HR	-3.45E+08	-3.26E+08	-3.02E+08	-1.07E+07	-3.39E+08	-3.19E+08	-1.39E+07
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.71	-1.62	-1.53	-1.30	-1.71	-1.62	-1.63
H-ToS	6.18E+06	7.90E+06	1.34E+07	-5.37E+05	9.54E+06	1.20E+07	-1.17E+06
DENS. LB/FT3	41.84	34.62	12.06	0.72	37.47	35.35	1.80
PM prom.	108.29	108.29	108.29	57.92	112.66	112.66	57.92

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	21	22	23	24	25	26	27
Fase:	VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	50.85	57.18	6.88	6.88	0.31	0.31	7.20
H2S	3.31	4.84	5.14	5.14	1.06	1.06	6.19
CH4	19.76	24.85	6.79	6.79	0.71	0.71	7.49
C2H6	14.69	20.59	15.17	15.17	2.81	2.81	17.98
C3H8	6.66	9.99	18.73	18.73	4.16	4.16	22.90
I-C4H10	2.77	4.45	19.28	19.28	3.99	3.99	23.27
C4H10-1	6.58	10.64	67.55	67.55	13.25	13.25	80.80
2MC4	1.27	1.28	42.10	42.10	6.18	6.18	48.27
22DMC3	1.26	1.49	19.29	19.29	3.39	3.39	22.68
n-C5H12	2.17	2.17	101.81	101.81	13.66	13.66	115.47
22DMC4	0.35	0.35	32.53	32.53	3.39	3.39	35.92
3MC5	0.34	0.34	62.81	62.81	5.38	5.38	68.19
2MC5	0.81	0.81	124.94	124.94	11.35	11.35	136.29
n-C6H14	0.41	0.41	99.80	99.80	7.85	7.85	107.65
n-C7H16	0.13	0.13	167.09	167.09	7.45	7.45	174.54
n-C8H18	0.15	0.15	971.10	971.10	24.20	24.20	995.30
n-C9H20	0.02	0.02	646.82	646.82	8.99	8.99	655.81
n-C10H22	0.00	0.00	403.68	403.68	3.10	3.10	406.78
n-C11H24	0.00	0.00	192.61	192.61	0.83	0.83	193.44
MCC5	0.69	0.69	190.51	190.51	14.04	14.04	204.55
CC6	0.02	0.02	9.15	9.15	0.59	0.59	9.73
MCC6	0.03	0.03	34.30	34.30	1.44	1.44	35.74
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01
BENCENO	0.03	0.03	9.07	9.07	0.65	0.65	9.72
TOLUENO	0.02	0.02	42.28	42.28	1.64	1.64	43.93
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	112.12	140.49	3,289.45	3,289.45	140.41	140.41	3,428.86
LB/HR	2,414.68	3,24E+03	3.69E+05	3.69E+05	12,213.00	1.22E+04	3.81E+05
VARIABLES:							
TEMP F	100.00	95.86	300.00	301.89	100.00	103.65	295.86
PRES PSI	85.30	80.00	96.00	291.30	85.30	291.30	285.00
FRAC VAP	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-1,037.57	-1,044.83	-790.14	-788.71	-935.89	-933.35	-793.34
BTU/HR	-2.51E+06	-3.39E+06	-2.92E+08	-2.91E+08	-1.14E+07	-1.14E+07	-3.02E+08
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.28	-1.28	-1.54	-1.54	-1.69	-1.69	-1.55
H-ToS	-8.45E+05	-1.16E+06	1.40E+07	1.44E+07	-3.30E+05	-3.16E+05	1.39E+07
DENS. LB/FT3	0.31	0.31	31.80	32.07	36.45	36.50	32.17
PM prom.	21.54	23.04	112.16	112.16	86.98	86.98	111.13

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	28	29	3	30	31	32	33
Fase:	VAPOR	MIXED	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	11.25	11.25	1,291.84	6.53	4.72	4.05	4.05
H2S	34.52	34.52	4.31	1.53	33.00	28.33	28.33
CH4	22.07	22.07	96.34	5.09	16.98	14.58	14.58
C2H6	91.28	91.28	27.96	5.90	85.38	73.30	73.30
C3H8	141.71	141.71	17.91	3.33	138.38	118.80	118.81
I-C4H10	151.22	151.22	20.82	1.69	149.53	128.38	128.38
C4H10-1	482.48	482.48	85.37	4.06	478.42	410.74	410.76
2MC4	0.52	0.52	44.75	0.00	0.51	0.44	0.44
22DMC3	37.39	37.39	25.27	0.24	37.16	31.90	31.90
n-C5H12	0.14	0.14	113.86	0.00	0.14	0.12	0.12
22DMC4	0.00	0.00	36.63	0.00	0.00	0.00	0.00
3MC5	0.00	0.00	68.94	0.00	0.00	0.00	0.00
2MC5	0.00	0.00	138.42	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C6H14	0.00	0.00	102.84	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C7H16	0.00	0.00	178.52	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C8H18	0.00	0.00	992.76	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C9H20	0.00	0.00	655.80	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C10H22	0.00	0.00	406.86	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C11H24	0.00	0.00	203.41	0.00	0.00	0.00	0.00
MCC5	0.00	0.00	206.90	0.00	0.00	0.00	0.00
CC6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
MCC6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00
ETMERC	0.00	0.00	2.70	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	1.63	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	3.28	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.00	0.00	1.90	0.00	0.00	0.00	0.00
BENCENO	0.00	0.00	19.59	0.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENO	0.00	0.00	79.87	0.00	0.00	0.00	0.00
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	972.57	972.57	4,834.00	28.36	944.21	810.64	810.68
LB/HR	50,125.00	5.01E+04	3.88E+05	822.40	49,303.00	42,328.00	4.23E+04
VARIABLES:							
TEMP F	188.41	100.80	197.32	100.80	100.80	100.80	100.80
PRES PSI	250.49	250.30	480.00	250.30	250.30	250.30	250.30
FRAC VAP	1.00	0.03	0.28	1.00	0.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTULB	-934.27	-1,102.65	-835.47	-1,066.13	-1,103.26	-1,103.26	-1,103.26
BTU/HR	-4.68E+07	-5.53E+07	-3.24E+08	-8.77E+05	-5.44E+07	-4.67E+07	-4.67E+07
ENTROPIA:							
BTULB-R	-1.46	-1.73	-1.62	-1.37	-1.73	-1.73	-1.73
H-ToS	-7.67E+06	-8.79E+06	1.37E+07	-2.71E+05	-8.52E+06	-7.32E+06	-7.32E+06
DENS. LB/FT3	2.44	22.33	12.62	1.33	30.29	30.29	30.29
PM prom.	51.54	51.54	80.29	29.00	52.22	52.22	52.22

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	34	35	36	37	38	39	4
Fase:	LIQUID	LIQUID	MIXED	LIQUID	LIQUID	LIQUID	MIXED
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.00	0.67	0.67	0.67	1,293.57
H2S	0.00	0.00	0.00	4.67	4.67	4.67	4.32
CH4	0.00	0.00	0.00	2.40	2.40	2.40	96.46
C2H6	0.00	0.00	0.00	12.08	12.08	12.08	28.00
C3H8	0.01	0.01	0.01	19.58	19.58	19.58	17.92
i-C4H10	1.37	0.93	0.93	21.15	21.15	21.15	20.83
C4H10-1	28.38	19.29	19.29	67.68	67.68	67.68	85.38
2MC4	150.49	102.29	102.30	0.07	0.07	0.07	44.76
22DMC3	53.66	36.48	36.48	5.26	5.26	5.26	25.27
n-C5H12	360.48	245.02	245.03	0.02	0.02	0.02	113.86
22DMC4	112.16	76.24	76.24	0.00	0.00	0.00	36.63
3MC5	212.91	144.72	144.72	0.00	0.00	0.00	68.94
2MC5	425.55	289.25	289.25	0.00	0.00	0.00	138.43
n-C6H14	336.12	228.47	228.47	0.00	0.00	0.00	102.64
n-C7H16	544.97	370.43	370.43	0.00	0.00	0.00	178.52
n-C8H18	3,107.64	2,112.33	2,112.34	0.00	0.00	0.00	992.76
n-C9H20	2,047.64	1,391.83	1,391.83	0.00	0.00	0.00	655.80
n-C10H22	1,270.09	863.31	863.31	0.00	0.00	0.00	406.66
n-C11H24	603.96	410.53	410.53	0.00	0.00	0.00	203.41
MCC5	638.67	434.12	434.12	0.00	0.00	0.00	206.91
CC6	30.38	20.65	20.65	0.00	0.00	0.00	0.07
MCC6	111.61	75.86	75.86	0.00	0.00	0.00	0.13
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.70
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.63
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.28
TIOFENO	0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	1.90
BENCENO	30.34	20.62	20.62	0.00	0.00	0.00	19.59
TOLUENO	137.15	93.23	93.22	0.00	0.00	0.00	79.87
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	10,204.00	6,935.62	6,935.65	133.57	133.57	133.57	4,835.94
LB/HR	1.17E+06	7.92E+05	7.92E+05	6,974.47	6,974.47	6.97E+03	3.88E+05
VARIABLES:							
TEMP F	497.28	497.28	529.82	100.80	102.30	100.00	343.48
PRES PSI	255.30	255.30	255.30	250.30	305.00	296.30	490.00
FRAC VAP	0.00	0.00	0.85	0.00	0.00	0.00	0.32
ENTALPIA:							
BTU/LB	-641.95	-641.95	-562.98	-1,103.26	-1,102.32	-1,103.79	-734.99
BTU/HR	-7.48E+08	-5.09E+08	-4.46E+08	-7.69E+06	-7.69E+06	-7.70E+06	-2.85E+08
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.38	-1.38	-1.30	-1.73	-1.73	-1.74	-1.49
H-ToS	1.14E+08	7.72E+07	1.05E+08	-1.21E+08	-1.20E+08	-1.20E+08	2.41E+07
DENS. LB/FT3	22.36	22.36	4.84	30.29	30.31	30.42	9.94
PM prom.	114.25	114.25	114.25	52.22	52.22	52.22	80.26

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	40	41	42	43	44	45	46
Fase:	LIQUID	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H2S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CH4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	0.00	0.00	0.03	0.03	0.03	0.03	0.00
i-C4H10	0.44	0.44	3.36	3.36	3.36	2.92	0.44
C4H10-1	9.09	9.09	69.51	69.51	69.51	60.42	9.09
2MC4	48.20	48.20	366.59	366.59	366.59	318.65	47.93
22DMC3	17.19	17.19	131.37	131.37	131.37	114.19	17.18
n-C5H12	115.45	115.45	871.01	871.01	871.01	757.13	113.89
22DMC4	35.92	35.92	250.18	250.18	250.18	217.47	32.71
3MC5	68.19	68.19	292.13	292.13	292.13	253.94	38.20
2MC5	136.29	136.29	771.29	771.29	771.29	670.44	100.65
n-C6H14	107.65	107.65	104.51	104.51	104.51	90.84	13.66
n-C7H16	174.54	174.54	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C8H18	995.31	995.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C9H20	655.82	655.82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C10H22	406.78	406.78	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
n-C11H24	193.44	193.44	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MCC5	204.55	204.55	45.35	45.35	45.35	39.42	5.93
CC6	9.73	9.73	0.03	0.03	0.03	0.03	0.00
MCC6	35.74	35.74	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TIOFENO	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BENCENO	9.72	9.72	0.89	0.89	0.89	0.77	0.12
TOLUENO	43.93	43.93	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	3,268.00	3,268.00	2,906.24	2,906.24	2,906.24	2,526.24	380.00
LB/HR	3.73E+05	3.73E+05	2.29E+05	2.29E+05	2.29E+05	1.99E+05	3.00E+04
VARIABLES:							
TEMP F	497.28	350.00	187.79	172.89	172.90	172.90	172.90
PRES PSI	255.30	49.30	44.00	44.00	45.00	45.00	45.00
FRAC VAP	0.00	0.54	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-641.95	-696.67	-835.93	-977.66	-977.65	-977.65	-977.65
BTU/HR	-2.40E+08	-2.60E+08	-1.92E+08	-2.24E+08	-2.24E+08	-1.95E+08	-2.93E+07
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.38	-1.43	-1.47	-1.69	-1.69	-1.69	-1.69
H-ToS	3.64E+07	2.64E+07	-1.08E+07	-1.61E+07	-1.61E+07	-1.40E+07	-2.10E+06
DENS. LB/FT3	22.36	1.31	0.55	32.94	32.94	32.94	32.94
PM prom.	114.25	114.25	78.83	78.83	78.83	78.83	78.83

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	47	48	48B	49	5	50	51
Fase:	LIQUID	LIQUID	MIXED	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.00	0.00	1,293.57	0.00	0.00
H2S	0.00	0.00	0.00	0.00	4.32	0.00	0.00
CH4	0.00	0.00	0.00	0.00	96.46	0.00	0.00
C2H6	0.00	0.00	0.00	0.00	28.00	0.00	0.00
C3H8	0.00	0.00	0.00	0.00	17.92	0.00	0.00
I-C4H10	0.00	0.00	0.00	0.00	20.83	0.00	0.00
C4H10-1	0.00	0.00	0.00	0.00	85.38	0.00	0.00
2MC4	0.45	0.19	0.19	0.19	44.76	0.27	0.02
22DMC3	0.02	0.01	0.01	0.01	25.27	0.01	0.00
n-C5H12	2.65	1.08	1.08	1.08	113.86	1.57	0.10
22DMC4	5.44	2.23	2.23	2.23	36.63	3.21	0.21
3MC5	50.77	20.77	20.77	20.77	68.84	30.00	1.95
2MC5	59.99	24.55	24.55	24.55	138.43	35.45	2.31
n-C6H14	159.07	65.09	65.09	65.09	102.64	83.98	6.12
n-C7H16	295.42	120.87	120.87	120.87	178.52	174.54	11.36
n-C8H18	1,684.58	689.27	689.27	689.27	992.76	995.31	64.79
n-C9H20	1,109.98	454.17	454.17	454.17	655.80	655.62	42.69
n-C10H22	688.49	281.70	281.70	281.70	406.86	406.78	26.48
n-C11H24	327.40	133.96	133.96	133.96	203.41	193.44	12.59
MCC5	336.18	137.55	137.55	137.55	206.91	198.62	12.93
CC6	16.46	6.74	6.74	6.74	0.07	9.73	0.63
MCC8	60.50	24.75	24.75	24.75	0.13	35.74	2.33
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	2.70	0.00	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	1.63	0.00	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	3.28	0.00	0.00
TIOFENO	0.01	0.01	0.01	0.01	1.90	0.01	0.00
BENCENO	16.25	6.65	6.65	6.65	19.59	9.60	0.62
TOLUENO	74.35	30.42	30.42	30.42	79.87	43.93	2.86
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	4,888.00	2,000.00	2,000.00	2,000.00	4,835.94	2,888.00	188.00
LB/HR	5.81E+05	2.38E+05	2.38E+05	2.38E+05	3.88E+05	3.43E+05	2.24E+04
VARIABLES:							
TEMP F	340.20	340.20	369.58	375.62	589.93	340.20	340.20
PRES PSI	49.30	49.30	49.30	49.30	475.00	49.30	49.30
FRAC VAP	0.00	0.00	0.60	0.75	1.00	0.00	0.00
ENTALPIA:							
BTU/LB	-751.48	-751.48	-665.58	-644.94	-495.45	-751.48	-751.48
BTU/HR	-4.37E+08	-1.79E+08	-1.58E+08	-1.53E+08	-1.92E+08	-2.58E+08	-1.68E+07
ENTROPIA:							
BTU/LB-R	-1.51	-1.51	-1.41	-1.38	-1.23	-1.51	-1.51
H-ToS	3.56E+07	1.46E+07	2.19E+07	2.33E+07	6.30E+07	2.10E+07	1.37E+06
DENS. LB/FT3	31.02	31.02	1.19	0.96	4.11	31.02	31.02
PM prom.	118.91	118.91	118.91	118.91	80.26	118.91	118.91

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	52	53	54	55	56	6	7
Fase:	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR	VAPOR
Componentes							
LBMOL/HR							
H2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1,527.35	1,351.63
H2S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	4.31	13.82
CH4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	122.02	123.65
C2H6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	49.49	60.66
C3H8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	31.12	38.44
I-C4H10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	23.82	29.36
C4H10-1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	88.94	94.42
2MC4	0.02	0.02	0.25	0.25	0.25	45.76	51.30
22DMC3	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	25.81	25.81
n-C5H12	0.10	0.10	1.46	1.48	1.46	114.68	120.64
22DMC4	0.21	0.21	3.00	3.00	3.00	36.96	38.96
3MC5	1.95	1.95	28.04	28.04	28.04	69.27	69.27
2MC5	2.31	2.31	33.14	33.14	33.14	138.75	138.75
n-C6H14	6.12	6.12	87.87	87.87	87.87	103.04	109.01
n-C7H16	11.36	11.36	163.18	163.18	163.18	178.82	175.23
n-C8H18	64.79	64.79	930.52	930.52	930.52	992.96	996.68
n-C9H20	42.69	42.69	613.12	613.12	613.12	655.89	656.15
n-C10H22	26.48	26.48	380.30	380.30	380.30	406.86	406.86
n-C11H24	12.59	12.59	180.84	180.84	180.84	203.41	193.46
MCC5	12.93	12.93	185.69	185.69	185.69	206.91	206.91
CC6	0.63	0.63	9.09	9.09	9.09	6,7165-02	9.82
MCC6	2.33	2.33	33.42	33.42	33.42	0.13	35.88
ETMERC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.70	0.00
MEETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.63	0.00
DETSUL	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.28	0.00
TIOFENO	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	1.90	0.01
BENCENO	0.62	0.62	8.98	8.98	8.98	19.59	9.84
TOLUENO	2.86	2.86	41.07	41.07	41.07	79.87	44.12
FLUJO TOTAL:							
LBMOL/HR	188.00	188.00	2,700.00	2,700.00	2,700.00	5,140.85	4,996.67
LB/HR	2.24E+04	2.24E+04	3.21E+05	3.21E+05	3.21E+05	3.91E+05	3.91E+05
VARIABLES:							
TEMP F	340.74	100.00	340.20	343.13	250.26	664.96	662.14
PRES PSI	81.30	40.00	49.30	326.30	315.00	425.00	388.30
FRAC VAP	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00
ENTALPIA:							
BTULB	-751.11	-892.46	-751.48	-749.38	-808.15	-437.45	-437.44
BTU/HR	-1.68E+07	-2.00E+07	-2.41E+08	-2.41E+08	-2.59E+08	-1.71E+08	-1.71E+08
ENTROPIA:							
BTULB-R	-1.51	-1.72	-1.51	-1.51	-1.59	-1.17	-1.16
H-ToS	1.38E+06	7.12E+05	1.97E+07	2.03E+07	1.48E+07	7.38E+07	7.28E+07
DENS. LB/FT3	31.06	37.43	31.02	31.46	34.22	2.96	2.72
PM prom.	118.91	118.91	118.91	118.91	118.91	76.05	78.21

Tabla 7.2 Resultados del proceso modificado

No. Corriente:	8	9				
Fase:	MIXED	MIXED				
Componentes						
LBMOL/HR						
H2	1,351.63	1,351.63				
H2S	13.82	13.82				
CH4	123.65	123.65				
C2H6	60.66	60.66				
C3H8	38.44	38.44				
I-C4H10	29.36	29.36				
C4H10-1	94.42	94.42				
2MC4	51.30	51.30				
22DMC3	25.81	25.81				
n-C5H12	120.64	120.64				
22DMC4	36.96	36.96				
3MC5	69.27	69.27				
2MC5	138.75	138.75				
n-C6H14	109.01	109.01				
n-C7H16	175.23	175.23				
n-C8H18	896.68	896.68				
n-C9H20	656.15	656.15				
n-C10H22	406.86	406.86				
n-C11H24	193.46	193.46				
MCC5	206.91	206.91				
CC6	9.82	9.82				
MCC6	35.88	35.88				
ETMERC	0.00	0.00				
MEETSUL	0.00	0.00				
DETSUL	0.00	0.00				
TIOFENO	0.01	0.01				
BENCENO	9.84	9.84				
TOLUENO	44.12	44.12				
FLUJO TOTAL:						
LBMOL/HR	4,998.67	4,998.67				
LB/HR	3.91E+05	3.91E+05				
VARIABLES:						
TEMP F	420.00	351.96				
PRES PSI	386.34	370.00				
FRAC VAP	0.50	0.39				
ENTALPIA:						
BTU/LB	-675.23	-737.24				
BTU/HR	-2.64E+08	-2.88E+08				
ENTROPIA:						
BTU/LB-R	-1.40	-1.47				
H-ToS	3.02E+07	2.12E+07				
DENS. LB/FT3	5.77	6.95				
PM prom.	78.21	78.21				

F. ANALISIS DE LAS PROPUESTAS

En la tabla 7.3 se presentan los resultados del cálculo de trabajo perdido del proceso modificado, éstos, al igual que los anteriores, se realizaron utilizando el simulador Aspen Plus siguiendo la misma metodología.

Como se puede observar en la tabla, el efecto de las modificaciones causó un aumento en el trabajo perdido de algunos equipos así como la disminución en otros, pero el efecto global en el proceso fue una disminución importante de trabajo perdido de alrededor de 20 millones de BTU/hr. Estos resultados se pueden comparar con los obtenidos en la tabla 7.1.

La disminución del trabajo perdido se manifiesta como una reducción en el consumo de servicios auxiliares de la planta, como son: vapor, agua de enfriamiento, combustible y energía eléctrica.

En esta sección no se pretende hacer un estudio económico a fondo de las mejoras propuestas, pero sí proporcionar un estimado del ahorro en servicios auxiliares que representan. Para llevar a cabo este estimado se tiene la siguiente información de costos de los servicios auxiliares:

- 1) Agua de enfriamiento: el costo del agua en la zona de Tula era en 1992 de 2.54 pesos/ft³ el cual actualizado a Mayo de 1993 resulta de 0.103 nuevos pesos por metro cúbico. La capacidad calorífica del agua se considerará de 1 Btu/lb°F
- 2) Electricidad: también en 1992 el costo de la energía eléctrica era de 140 \$/KWh, el cual actualizado a 1993 resulta de 165 centavos de nuevo peso por KWh.

TRABAJO PERDIDO EN PROCESO MODIFICADO

	Equipo	Corrientes de entrada	Corrientes de salida	Cambio de Entalpia (BTU/HR)	Cambio de Entropia (BTU/HR-R)	Calor (BTU/HR)	Trabajo Equivalente (BTU/HR)	Trabajo Eq. Min. (BTU/HR)	Entropia Generada (BTU/HR-R)	Trabajo Perdido (BTU/HR)
BOMBA	GA-401	1	2	1,124,400	429	0	1,124,300	894,317	429	230,340
MEZCLADOR	B2	2,15	3	-90	503	0	0	-269,752	503	270,080
CAMBIADOR	EA-401	3,9	4,10	-18,565	982	0	0	-544,997	982	545,660
CAMBIADOR	EA-402	4,7	5,8	-938	6,837	0	0	-3,665,463	6,837	3,870,100
CALENTADOR	BA-401	5	6	23,979,000	22,916	23,979,000	13,766,000	11,696,024	3,885	2,085,100
CAMBIADOR	EA-403	8,17	9,18	-1,981	6,438	0	0	-3,452,535	6,438	3,456,800
MEZCLADOR	B8	10,11	12	-2,775	1,059	0	0	-570,131	1,059	570,840
ENFRIADOR	EA-404	12	13	-23,898,000	-39,479	-23,898,000	-1,077,100	-2,737,256	3,044	1,633,500
FLASH	FA-402	13	14,16	0	0	0	0	0	0	0
COMPRESOR	GB-401	14	15	812,510	374	0	812,500	612,293	374	200,450
CAMBIADOR	EA-405	16,55	17,56	0	7,014	0	0	-3,759,811	7,014	3,764,300
FLASH	FA-404	18	19,23	7	0	7	2	2	0	0
ENFRIADOR	EA-406	19	20	-3,208,200	-4,789	-3,208,200	-105,960	-641,135	991	532,020
FLASH	FA-405	20	21,25	0	0	0	0	0	0	0
MEZCLADOR	B18	21,30	22	0	85	0	0	-45,665	85	45,722
BOMBA	GA-408	23	24	526,480	143	0	526,470	449,703	143	76,864
MEZCLADOR	B18	24,26	27	43	424	0	0	-227,361	32	227,640
BOMBA	GA-409	25	26	30,917	32	0	30,915	13,587	32	17,251
TORRE	DA-401	27,33,38	28,34	0	11,139	0	0	-5,970,504	11,139	5,977,800
ENFRIADOR	EA-407	28	29	-8,440,000	-13,631	-8,440,000	-380,400	-1,133,784	1,386	744,020
FLASH	FA-406	29	30,31	0	0	0	0	0	0	0
DIVISOR	B23	31	32,37	0	0	0	0	0	0	0
BOMBA	GA-402	32	33	2,297	4	0	0	313	4	-310
DIVISOR	B25	34	35,40	0	0	0	0	0	0	0
REHERVIDOR	BA-402	35	36	62,576,000	64,245	62,576,000	35,924,000	28,140,880	14,579	7,826,400
BOMBA	GA-403	37	38	6,566	8	0	6,567	2,520	8	4,051
ENFRIADOR	EA-410	38	39	-10,244	-18	-10,244	-338	-807	1	457
TORRE	DA-402	1A,41,45,49	2,42,47	0	15,913	-9,000,000	-405,640	-8,529,368	15,913	8,134,700
ENFRIADOR	EA-408	42	43	-32,470,000	-50,684	-32,470,000	-1,463,500	-5,303,376	7,093	3,806,400
BOMBA	GA-407	43	44	1,694	1	0	1,694	1,349	1	345
DIVISOR	B33	44	45,46	-48	0	0	0	-17	0	17
DIVISOR	B34	47	48,50	0	0	0	0	0	0	0
REHERVIDOR	EA-409	48B	49	4,907,300	5,896	4,907,300	2,217,200	1,747,044	894	474,240
DIVISOR	B38	50	51,54	0	0	0	0	0	0	0
BOMBA	GA-406	51	52	8,185	5	0	8,184	5,559	5	2,629
ENFRIADOR	EA-411	52	53	-3,159,800	-4,851	-3,159,800	-104,360	-666,810	1,042	559,370
BOMBA	GA-405	54	55	672,870	182	0	672,650	575,097	182	97,665
CAMBIADOR	B26B	40,48	41,48B	0	5,433	0	0	-2,911,874	5,433	2,915,500
TOTAL										47,670,081

Tabla 7.3 Trabajo perdido en proceso modificado

3) Vapor de media: el costo del vapor de media en 1992 era de aproximadamente 22 pesos por libra, por lo que actualizado a 1993 se tiene un costo de aproximadamente 50.6 nuevos pesos por tonelada de vapor. Además se sabe que el vapor a las condiciones en que es suministrado tiene un poder calorífico de 818 BTU/lb.

4) Combustóleo: el precio del combustóleo en 1989 era de 163 pesos/litro, el cual actualizado a 1993 y convertido a kilogramos resulta de aproximadamente 341 centavos de nuevo peso por kilogramo. El poder calorífico del combustóleo se tomará de 18,700 Btu/lb

En la tabla 7.4 se hace un análisis comparativo en el consumo de estos cuatro servicios entre la planta actual y la planta con las modificaciones propuestas.

EVALUACION DE LAS MODIFICACIONES PROPUESTAS								
Energía eléctrica	Proceso actual			Proceso modificado			Ahorro NS/año	
	Equipo	Trabajo Btu/hr	Consumo (kWh/año)	Costo NS/año	Trabajo Btu/hr	Consumo (kWh)		Costo NS/año
	GA-401	1.11E+06	2.54E+06	418,511	1.12E+06	2.56E+06	422,760	-4,249
	GB-401	1.13E+06	2.57E+06	423,362	8.13E+05	1.85E+06	305,517	117,845
	GA-408	5.26E+05	1.20E+06	197,964	5.26E+05	1.20E+06	197,964	0
	GA-409	3.08E+04	7.05E+04	11,626	3.08E+04	7.05E+04	11,625	1
	GA-403	6.57E+03	1.50E+04	2,469	6.57E+03	1.50E+04	2,469	0
	GA-407	8.61E+03	1.96E+04	3,237	1.69E+03	3.86E+03	637	2,600
	GA-406	1.10E+04	2.51E+04	4,144	8.18E+03	1.87E+04	3,077	1,067
	GA-405	6.77E+05	1.54E+06	254,656	6.73E+05	1.53E+06	252,930	1,726
	TOTAL	3.50E+06	7.18E+06	1,315,968	3.18E+06	6.53E+06	1,196,979	118,990
Combustible								
	Equipo	Calor Btu/hr	Consumo Kg/año	Costo NS/año	Calor Btu/hr	Consumo Kg/año	Costo NS/año	Ahorro NS/año
	BA-401	4.39E+07	8.29E+06	2,827,381	2.40E+07	4.53E+06	1,545,530	1,281,851
Agua de enf.								
	Equipo	Calor Btu/hr	Consumo m ³ /año	Costo NS/año	Calor Btu/hr	Consumo m ³ /año	Costo NS/año	Ahorro NS/año
	EA-404	2.40E+07	3.42E+08	352,587	2.39E+07	3.40E+08	350,723	1,864
	EA-406	3.21E+06	4.56E+05	47,087	3.21E+06	4.56E+05	47,083	4
	EA-407	8.44E+06	1.20E+06	123,810	8.44E+06	1.20E+06	123,864	-54
	EA-410	1.03E+04	1.46E+03	151	1.02E+04	1.46E+03	150	0
	EA-408	5.97E+07	8.49E+06	876,529	3.25E+07	4.62E+06	476,525	400,005
	EA-411	3.40E+06	4.84E+05	49,918	3.16E+06	4.49E+05	46,373	3,546
	TOTAL	9.88E+07	1.26E+07	1,450,083	7.12E+07	9.11E+06	1,044,718	405,365
Vapor de media								
	Equipo	Calor Btu/hr	Consumo Ton/año	Costo NS/año	Calor Btu/hr	Consumo Ton/año	Costo NS/año	Ahorro NS/año
	EA-409	2.59E+07	1.14E+05	5,747,870	4.91E+06	2.15E+04	1,087,837	4,660,033
GRAN TOTAL				12,601,446			4,875,064	6,466,238

Fig. 7.4 Análisis de las propuestas

CAPITULO 8

CONCLUSIONES

A. SIMULACION DE LA PLANTA HIDRODESULFURADORA DE NAFTA

Los resultados de la simulación presentados en la tabla 6.1, así como su análisis (tabla 6.2), demuestran que el simulador Aspen Plus resulta ser una herramienta confiable en el diseño de procesos químicos.

Respecto a las variaciones encontradas entre los flujos de diseño, por componente, y los flujos obtenidos mediante la simulación, en la mayoría de los casos no se sobrepasa el 10% de error. En el caso del etano, y el ácido sulfhídrico, se tiene un error promedio mayor al 10% ya que en algunas corrientes se tienen flujos muy pequeños en comparación al flujo global, lo que conduce a tener un error elevado aunque la diferencia sea solamente de 2 a 3 lbmol.

En lo referente a los isopentanos e isohexanos el error encontrado es mayor al 10% debido a que no se tiene una mezcla totalmente caracterizada, lo cual ocasiona un mayor error en las corrientes de salida de la torre desisohexanizadora, sin llegar a ser importante, ya que se cumple con el peso molecular, temperatura, flujo total y presión de las mezclas.

Es importante también recalcar, que aunque en el presente trabajo no se reportan directamente las cargas de los intercambiadores de calor obtenidas mediante la simulación (pueden encontrarse en las tablas de trabajo perdido, 7.1 y 7.2), éstas se encuentran dentro del rango de diseño, lo cual confirma la confiabilidad del simulador.

Es debido a esta gran confiabilidad, que el simulador Aspen Plus pudo ser utilizado para la simulación de las mejoras propuestas en el presente trabajo, las cuales se analizan en la siguiente sección.

Por último, vale la pena mencionar que el simulador Aspen Plus demostró ser más rápido y versátil que otros simuladores, en especial Chem-Cad, debido a la gran flexibilidad en su manejo y a la fácil introducción de nuevas subrutinas en Fortran.

B. PROPUESTA DE MEJORAS

Como se puede observar en la tabla 7.2 las mejoras propuestas no alteran la funcionalidad del proceso, únicamente disminuyen el trabajo perdido del proceso global en aproximadamente el 31% (tablas 7.1 y 7.3).

La reducción en el trabajo perdido se debe principalmente a los siguientes aspectos:

- 1) Una reducción del LMTD del tren de intercambiadores EA-401 al 403 así como en el calentador BA-401, debida al precalentamiento de la alimentación de naftas.
- 2) El preenfriamiento de la alimentación a la torre desisohexanizadora con la corriente que va al reboiler de la misma, provocó un mejor aprovechamiento del calor de esta corriente, ya que se utiliza más eficientemente el calor en el fondo de la torre que en la parte media.
- 3) La introducción de un enfriador intermedio en la torre desisohexanizadora provocó una disminución en el trabajo perdido del condensador de la misma torre, ya que disminuyó el flujo de vapor en el domo. Por su parte, en el interenfriador se mantuvo un LMTD pequeño gracias a la utilización de la corriente de alimentación de la planta como medio de enfriamiento.

En lo que respecta a los servicios auxiliares, su consumo se vio disminuido significativamente, lográndose una reducción en el costo del 50%, sin considerar los costos del calentador BA-402.

Como puede observarse en la tabla 7.4, todas las mejoras propuestas causaron una disminución en el consumo de servicios, así por ejemplo, se tiene que la reconexión de la reposición de hidrógeno causó una reducción en el consumo de agua de enfriamiento del cambiador EA-404, mientras que el precalentamiento de la alimentación de naftas mediante el interenfriador de la desisohexanizadora provocó una reducción en el consumo tanto de combustible del calentador BA-401, como de agua de enfriamiento en el condensador EA-408.

Las modificaciones propuestas provocan la introducción de nuevos equipos, como son intercambiadores (debido a la reducción del LMTD aumenta el área de transferencia) por lo que es necesario hacer un estudio económico más a fondo, así como de viabilidad, antes de su implementación física.

Para concluir, cabe señalar, que el simulador Aspen Plus resultó ser una herramienta de gran utilidad en la implementación de la propuesta de mejoras ya que permitió hacer sencillo y rápido el cálculo del trabajo perdido mediante la subrutina en Fortran.

Así quedó demostrado que los simuladores comerciales, y sobre todo Aspen Plus, deben de ser utilizados por el ingeniero de procesos como herramienta fundamental en la reconversión y diseño de plantas químicas.

C. TRABAJOS FUTUROS

Esta tesis puede ser utilizada como fundamento para trabajos futuros complementarios o para el desarrollo más completo de alguno de sus temas como son:

- 1) Optimización de cada una de las operaciones unitarias, mediante una minimización del trabajo perdido, utilizando las variables obtenidas a partir de la subrutina en Fortran.**
- 2) Optimización del reactor de la hidrodesulfuradora mediante la elaboración de un modelo más completo.**
- 3) Implementación de una metodología para la reducción del trabajo perdido, alterando no sólo las condiciones del proceso, sino también su estructura.**

BIBLIOGRAFIA

Alonso, L.A. y Giral L.F. "*Propuesta de Mejoramiento del tren de recuperación de vapores de la planta catalítica de Tula*". Tesis. México, CU, 1992. 107 pp.

Bazúa Rueda Enrique. "*Bases termodinámicas para el uso eficiente de la energía*." Notas del Diplomado de ahorro y uso eficiente de la energía. México. Facultad de Química, UNAM. 1992.

Britt, H.I., "*Multiphase Stream Structures in the Aspen Process Simulator*" en Mah, R.S.H., Seider, W.D. Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design. V.1. New York, Engineering Foundation, 1981. p.p. 471-510

Evans, Lawrence B. "*Advances in Process Flowsheeting Systems*" en Mah, R.S.H., Seider, W.D. Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design. V.1. New York, Engineering Foundation, 1981. p.p. 425-469

Gates, Bruce C. et al. "*Chemistry of Catalytic Processes*." New York: Mc. Graw Hill, 1979. 469 pp.

Henley, E.J., Seader, J.D. "*Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*". México: Reverté, 1990. 814 pp.

Husain, Asghar. "*Chemical Process Simulation*." New Delhi: Wiley Eastern, Ltd., 1986. 376 pp.

Kenney W.F. "*Energy Conservation in the Process Industries*". Orlando: Academic Press, 1984. 329 pp.

Biegler T. L. "*Chemical Process Simulation*." Chem Eng, Progress, October, 1989. pp. 50-61.

Luyben, William M. "*Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*" 2a ed. Singapur: Mc. Graw Hill, 1989. 726 pp.

IMP. "*Libro de Proyecto de la Unidad Hidrosulfuradora de Naftas de la Cangrejera, Ver.*" Vol. 1. México. 1976.

IMP. "Libro de Proyecto de la Unidad Hidrosulfuradora de Naftas de la Refinería Miguel Hidalgo" Vol. 1. México. 1976.

Nevers Noel, Seader J.D. "Mechanical lost work, thermodynamic lost work, and thermodynamic efficiencies of processes" Latin American Journal of heat and mass transfer, 1984. pp. 77-105.

Ojeda Ramos Miguel. "Métodos modulares simultáneos para la simulación de procesos químicos en estado estacionario". Tesis. México: UNAM. ENEP Zaragoza, 1987. 562 pp.

PEMEX, Refinería Miguel Hidalgo. Superintendencia de Proceso. "Libro de Proceso". Julio, 1989.

Peters M.S., Timmerhaus K.D. "Plant Design and Economics for Chemical Engineerings." Singapur: Mc. Graw Hill, 1991. 910 pp.

Satterfield C.N. "Heterogeneous Catalysis in Practice". New York: Mc. Graw hill, 1981. 416 pp.

Seader J.D. Notas del curso "Modeling, Simulation and Optimization of Chemical Processes". Boston: MIT, Julio, 1992.

Smith, J.M., Van Ness, H.C. "Introducción a la termodinámica en ingeniería química." México: Mc. Graw Hill, 1989. 717 pp.

Westerberg A.W. et al. "Process Flowsheeting" Melbourne: Cambridge, 1976. 345 pp.

Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS Costing Manual, 1991.

Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS Data Regression Manual, 1991.

Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS Electrolytes Manual, 1991.

Aspen Technology Inc. ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Interactive Simulation*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Model Manager and ASPEN PLUS, Installation and Reference for the PC*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Model Manager, Getting Started and Tutorials for the PC*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Notes on Interfaces and User Models*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Solids Manual*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Stream Libraries and Insert Libraries*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Summary File Toolkit*, 1991.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS User Guide*, 1991.