



24
02

**Universidad Nacional Autónoma
de México**

FACULTAD DE QUIMICA

**SIMULACION DE LA PLANTA METANOL I
DEL COMPLEJO PETROQUIMICO TEXMELUCAN**



EXAMEN PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

T E S I S

INGENIERO QUIMICO

GUSTAVO MUÑOZ AMADOR

1986



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.

I N D I C E

Pag.

CAPITULO	I	INTRODUCCION	1
CAPITULO	II	GENERALIDADES	4
CAPITULO	III	DESCRIPCION DEL PROCESO DE LA PLANTA METANCL I	39
CAPITULO	IV	SIMULACION DEL PROCESO DE LA PLANTA DE METANOL	52
CAPITULO	V	ANALISIS DE RESULTADOS	132
CAPITULO	VI	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	134
CAPITULO	VII	BIBLIOGRAFIA	137
CAPITULO	VIII	APENDICE A	143

CAPITULO I

INTRODUCCION

INTRODUCCION

La simulación de procesos, se define como la representación hecha por medio de modelos de ecuaciones matemáticas de un proceso químico, que al ser resueltos proporcionan información acerca del comportamiento teórico del mismo.

Hoy en día, la simulación de procesos se ha convertido en una herramienta útil en el análisis y diseño de procesos químicos.

Ya que en la actualidad, la gran mayoría de las plantas químicas o petroquímicas, antes de construirse, generalmente se realiza la simulación del proceso.

El objetivo del presente trabajo, es el de llevar a cabo la simulación del proceso de la Planta de Metanol I.

En el capítulo II, se da una descripción del estado actual de la simulación de procesos, sus enfoques y estructuras, así como también los algoritmos utilizados para la generación de un Sistema de Simulación de Procesos.

En el capítulo III, se presenta la descripción del proceso de la Planta Metanol I del complejo Petroquímico Texmelucan, donde se describen las etapas que involucran la obtención del metanol.

Por otro lado, en el capítulo IV se desarrollan y analizan los modelos utilizados para la simulación del proceso de la Planta de Metanol; así como también se dan los datos de diseño y la simulación de la Planta de Metanol.

En el capítulo V, se analizan los resultados obtenidos de la simulación de la Planta de Metanol en función de los modelos descritos en el capítulo anterior.

Por último, en el capítulo VI, se dan las conclusiones y recomendaciones derivadas del desarrollo y resultados del presente trabajo.

En el apéndice A, se da una descripción del metanol, sus propiedades, características y usos que tiene actualmente, así como también de sus futuras aplicaciones.

CAPITULO II

GENERALIDADES

SIMULACION DE PROCESOS

En años recientes, la simulación de procesos se ha convertido en una herramienta útil para el análisis y diseño de procesos químicos.

El desarrollo de la simulación aplicada a procesos químicos, se inicia a mediados de 1950 y el primer simulador aparece en 1958. A mediados de 1960, la estructura para la simulación de procesos, llamada: Programa Modular, fué cristalizada. De acuerdo a este enfoque, cada esquema del proceso es representado por la unión de una serie de módulos matemáticos, con redes flexibles y arbitrarias.

La representación de un proceso químico por medio de modelos de ecuaciones matemáticas, ha dado origen a lo que se conoce hoy en día como simulación de procesos, los cuales nos brindan al resolverse, datos del comportamiento teórico del proceso.

En la actualidad, la gran mayoría de las plantas químicas o petroquímicas que son diseñadas, son simuladas a través de modelos matemáticos; estos modelos son usualmente un programa de computadora, conocido generalmente como "Simulador de Procesos" o "Sistema de Simulación" (FLOWSHEETING).

Kehat y Shacham (1973), clasifican a los programas de simulación de procesos de acuerdo a su estructura y usos. El programa puede ser desarrollado para simular cualquier proceso en particular; tal programa puede ser resuelto en forma eficiente, usando técnicas numéricas sofisticadas, ya que la simulación es enfocada como un problema matemático con restricciones y ecuaciones completamente definidas. Generalmente las ecuaciones son dispersas y muchas de ellas son no lineales.

Las ecuaciones, generalmente agrupadas (cálculo de flash, destilaciones, etc.), se resuelven utilizando algoritmos especialmente diseñados, que son robustos (raramente defectuosos) y eficientes. El método más natural para resolver las ecuaciones, es el de módulo por módulo.

Como se mencionó anteriormente, cada paso de procesamiento químico está representado por un modelo matemático llamado módulo unitario. Estos módulos unitarios están unidos por una serie de datos que representan el flujo de masa y energía entre las unidades de proceso. Un programa ejecutivo supervisa el flujo de información entre los módulos.

Un sistema de simulación puede ser utilizado tanto para la simulación a estado estacionario, como para la simulación dinámica y para equipo específico.

La simulación a estado estacionario calcula el balance de masa y energía del proceso. Las condiciones de operación de todas las unidades y las corrientes de alimentación usualmente se fijan. Los modelos matemáticos algebraicos para los módulos normalmente son fáciles de generar.

El propósito de la simulación dinámica es diferente, ya que ésta empieza a un punto dado en tiempo y calcula los cambios de flujos de masa y energía en un proceso a incrementos consecutivos de tiempo, por encima de un período de tiempo dado.

A continuación se presentan algunas diferencias entre la simulación a estado estacionario y la simulación dinámica.

- 1.- Para reflejar el tiempo de cambio en flujos y condiciones de proceso, los modelos incluyen ecuaciones diferenciales dependientes del tiempo.
- 2.- La descripción de las condiciones de las corrientes del proceso, pueden ser especificadas en la simulación dinámica. Estas son utilizadas como condiciones iniciales en la solución de las ecuaciones diferenciales. En la simulación a estado estacionario, la descripción es omitida, excepto cuando se estiman las corrientes que forman una recirculación.

- 3.- Los tanques elevados, tiempos de residencia en los reactores, tiempos de retraso en tuberías, etc., tienen un papel importante en el cálculo de las condiciones de corriente a lo largo del proceso a intervalos sucesivos de tiempo. Estos no deben ser ignorados en la simulación dinámica, pero son irrelevantes en la simulación a estado estacionario.
- 4.- Las corrientes de recirculación no presentan problemas de convergencia en la simulación dinámica. Sus condiciones iniciales son conocidas y los cambios ocurren gradualmente; así que ellas no afectan a sus unidades de destino, ya que son tratadas como cualquier corriente intermedia.
- 5.- La terminación de la simulación dinámica consiste en la descripción de las condiciones de corriente a cualquier incremento de tiempo. De acuerdo a esto, los flujos son más voluminosos que cuando es para la simulación a estado estacionario.

La simulación dinámica es más compleja y costosa computacionalmente.

Westerberg (1979), en su libro define a un sistema de simulación (Flowsheeting) como: "El uso de la computadora para realizar el balance de masa y energía, dimensionamiento

de equipo y cálculo de costos para un proceso a estado estacionario". Una definición más amplia de un sistema de simulación, incluye: "Cualquier sistema de programación por computadora que acepta como entrada, información acerca de un proceso, a un nivel de diagrama de flujo y que realice análisis que son utilizados en el desarrollo, diseño u operación de procesos".

Otros tipos de análisis que son importantes incluyen:

- 1.- Simulación dinámica: para estudios realizados en sistema de control, para el arranque y paro de plantas y operación en emergencias.
- 2.- Optimización: A un nivel de subsistema, y/o para el proceso completo.
- 3.- Síntesis de procesos: Particularmente para sub-tareas, tal como integración de energía, determinación de secuencias de separación y estrategias de control.
- 4.- Programación y secuencia de operaciones Batch: Involucrando tanto simulación estocástica, como algoritmos determinísticos.
- 5.- Análisis de eficiencia en energía: Basada en la segunda ley de la termodinámica y con los conceptos de la energía disponible en sus diferentes formas.

- 6.- Seguridad y análisis de funcionamiento: Con énfasis en procesos operables y determinación de probables factores de corriente.
- 7.- Sistemas de simulación: Sistemas que son bastante probables para determinar y proveer una estimación del riesgo económico, operaciones factibles y la varianza estadística.

Todos estos tipos de análisis están basados en modelos matemáticos apropiados, que se derivan de la información del proceso a un nivel de diagrama de flujo.

Los elementos esenciales de cualquier sistema de simulación a gran escala que ayudan en el análisis de ingeniería, están expuestos en la figura 1. El sistema puede verse, como la construcción de una estructura de bloques.

Los bloques del sistema de simulación son:

- a) Modelos.
- b) Algoritmos.
- c) Programa de computadora (Software).
- d) Interfase con el usuario.

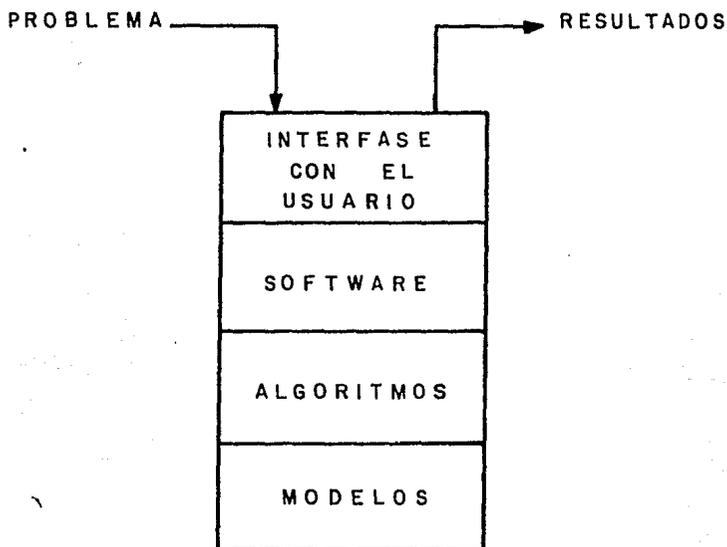


FIGURA 1:- ESTRUCTURA DE BLOQUES DE UN SISTEMA DE SIMULACION PARA EL ANALISIS DE INGENIERIA

MODELOS

El corazón de un sistema de simulación de procesos, son los modelos de las operaciones unitarias. La estructura de los modelos está expuesta en la figura 2.

Los modelos proveen una serie de relaciones algebraicas no lineales de la forma:

$$\text{Variables de Salida} = f(\text{Variables de entrada}) \quad (1)$$

Las variables de entrada, son las variables de corriente de entrada y los parámetros del modelo (que son las variables requeridas para especificar la función de la operación unitaria).

Las variables de salida son, las variables de corriente de salida, ejecución y dimensionamiento (tal como los requerimientos de potencia de una bomba o el calor requerido por un calentador), y las variables internas o de retención (tal como las temperaturas de cada etapa, composiciones y valores de K_i en una columna de destilación). Estas variables internas son valores intermedios que no se requieren en el diagrama de flujo, pero son almacenadas para utilizarse como valo-

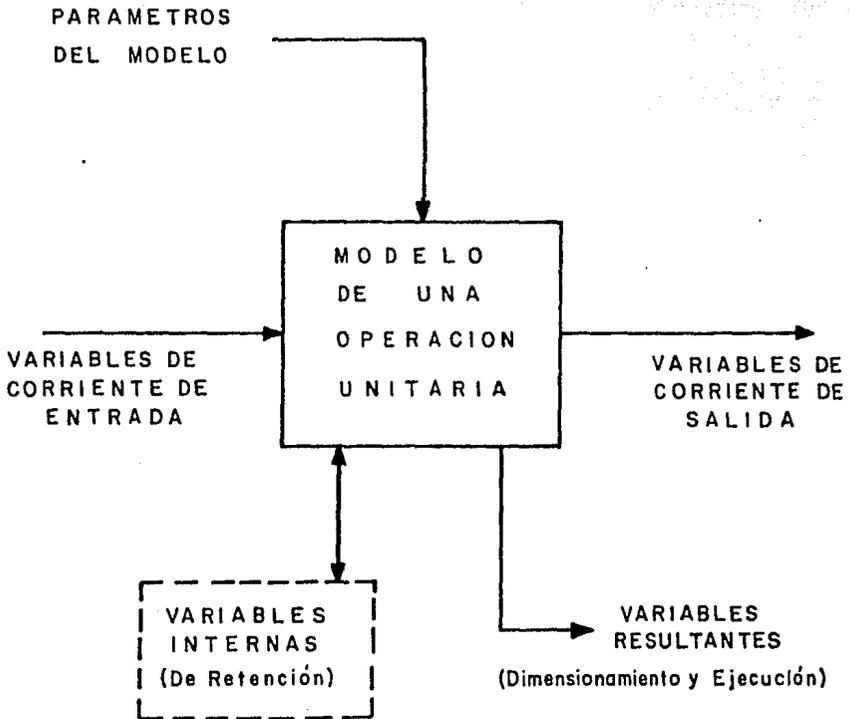


FIGURA 2.- DIAGRAMA ESQUEMATICO DEL MODELO DE UNA OPERACION UNITARIA

res iniciales en la próxima iteración, si la unidad forma parte de una recirculación.

En el enfoque modular secuencial, los modelos de las unidades de proceso son implementados como subrutinas de programación, que calculan las variables de corriente de salida, en función de las variables de corriente de entrada y de los parámetros del modelo. La subrutina llama a un paquete de propiedades físicas, que calcula las propiedades termodinámicas, tal como entalpías, constantes de equilibrio líquido-vapor, densidades, etc.

Funcionalmente el modelo de una operación unitaria, puede ser expresado como:

$$F(\underline{u}, \underline{x}, \underline{y}, \underline{z}, \underline{r}) = 0 \quad (2)$$

Donde: \underline{u} = Vector de los parámetros del modelo.

\underline{x} = Variables de corriente de entrada.

\underline{y} = Variables de corriente de salida.

\underline{z} = Variables internas (o de retención).

\underline{r} = Variables resultantes (ejecución y dimensionamiento).

En la simulación de un proceso, el número total de ecuaciones

ciones es igual a la suma del número de variables de corriente de salida, variables internas y variables resultantes.

El número de grados de libertad es igual al número total de parámetros del modelo y de las variables de corriente de entrada. El número total de variables generalmente es más -- grande que el número de grados de libertad, debido a la gran cantidad de variables internas, por ejemplo; en una columna de destilación las temperaturas de cada etapa, composiciones, entalpías, valores de K_i , densidades, etc., son variables in ternas.

Estas son algunas combinaciones posibles de los parámetros del modelo, que son utilizadas para especificar una operación unitaria.

En general, el número total de variables en el modelo -- de la operación unitaria deben ser las mismas, para diferentes tipos de especificaciones, pero se clasifican como parámetros del modelo a: las variables de corriente de entrada, variables de corriente de salida, variables internas o variables resultantes.

El flujo de información de un sistema de simulación, se presenta en la figura 3.

DEFINICION DEL PROCESO

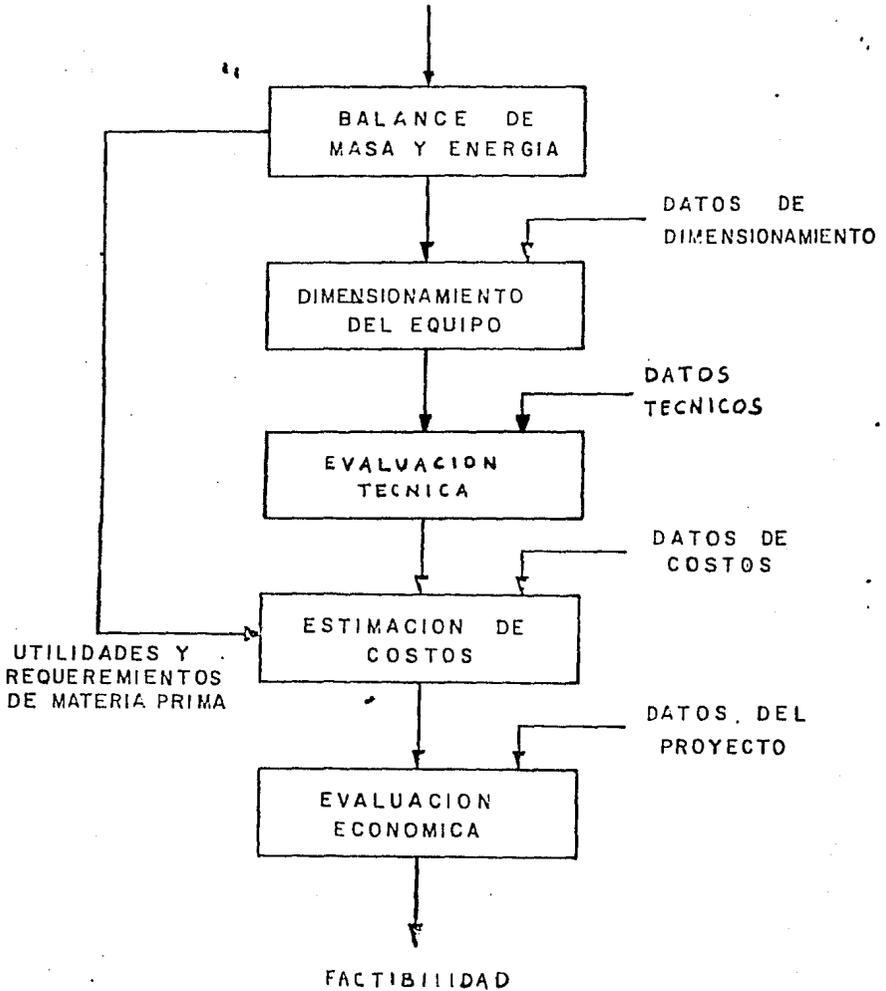


FIGURA 3.- FLUJO DE INFORMACION EN UN SISTEMA DE SIMULACION

La entrada a la fase de cálculos del balance de masa y energía, es el diagrama de flujo, definido con suficiente detalle para poder determinar todas las corrientes intermedias y de productos, y la unidad ejecutora para todas las unidades.

Los resultados del balance de masa y energía, aumentan con la cantidad de datos que provee la entrada del tamaño del equipo; como ejemplos de la cantidad de datos, se incluyen, el supuesto factor de ensuciamiento de un cambiador de calor o los gastos de vapor permisible en una columna.

Si el tamaño del equipo es utilizado para definir el diagrama de flujo; entonces el dimensionamiento del mismo viene a ser un cálculo trivial. Si las especificaciones realizadas son utilizadas para definir el diagrama de flujo; entonces el balance de masa y energía es relativamente fácil, pero el dimensionamiento es más difícil.

La estimación del costo, requiere como entrada el tamaño del equipo, materiales de construcción y otros datos necesarios para determinar la inversión. Las utilidades, materia prima, mano de obra, mantenimiento y otros requerimientos son necesarios para determinar el costo de manufactura. Datos de costo, tales como, coeficientes de correlación de costos e índices de inflación, también deben ser provistos por el usuario en forma de un banco de datos.

Finalmente, la evaluación técnica-económica, es la asociación de costos, tanto fijos como variables a un esquema de proceso, y que permite valorar su factibilidad.

Antes de concluir la discusión de los modelos, es necesario hacer algunas observaciones generales:

- 1.- Lo descrito anteriormente es necesario, para obtener un mejor entendimiento de un proceso para beneficio del modelo.
- 2.- En la mayoría de los modelos estén expuestas las implicaciones o postulados acerca del proceso; un modelo del sistema de simulación chea la consistencia de los postulados.
- 3.- Cuando se modela detalladamente, es más realista la evolución del proceso.
- 4.- El mayor beneficio de los modelos, está en la consistencia de las evaluaciones, y además como una herramienta en las comunicaciones. El usuario de un sistema de simulación puede obtener cualquier resultado que desee, en forma de un manual de evaluación, ajustando creativamente los postulados, pero estos pueden ser explícitos y los resultados deben ser consistentes con todos los postulados.

ALGORITMOS

El problema matemático primario que es resuelto en la simulación a estado estacionario, es la solución de grandes sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. Sargent (1980) describe algunos métodos generales para la solución de sistema de ecuaciones no lineales.

El punto principal en la simulación a estado estacionario es el diagrama de bloques del modelo, que especifica todas las ecuaciones que deben ser resueltas. Para la solución de éstos sistemas de ecuaciones, han sido propuestos tres enfoques que son:

- 1.- Enfoque modular secuencial.
- 2.- Enfoque orientado a ecuaciones.
- 3.- Enfoque modular simultáneo o de doble rompimiento.

A continuación se da una breve descripción de cada uno.

MODULAR SECUENCIAL

El término MODULAR SECUENCIAL, fué utilizado por Westorberg (1979) para describir el enfoque que es usado hoy, esencialmente por todos los simuladores industriales. En este enfoque se desarrolla una subrutina para cada tipo de bloque,

que calculan las variables de corriente de salida en función de las variables de corriente de entrada y los parámetros -- del bloque. Las rutinas son llamadas después, para simular el proceso.

Las corrientes de recirculación, son cortadas y llevadas a convergencia por un proceso iterativo. Estimaciones -- iniciales, de estas variables deben ser proporcionadas (Por el usuario o automáticamente). Las especificaciones (Res -- tricciones) también son resueltas iterativamente.

Para poder resolver un diagrama de flujo por medio del enfoque modular secuencial, es necesario llevar a cabo la -- partición del diagrama de flujo, seleccionar la corriente a romper, unir los cálculos y determinar la secuencia de cálculo.

Un ingeniero de proceso puede realizar fácilmente los -- pasos de partición, rompimiento, unión y determinación de la secuencia computacional, inspeccionado el diagrama de flujo, cuando éste no sea muy complicado. Para muchos simuladores, por ejemplo; el de Flowtran (Rosen y Pauls, 1977), el usua-- rio suministra como entrada a la secuencia computacional.

Para la partición, el algoritmo de Sargent y Westerberg (1964), o en una forma modificada y descubierta independien--

temente, el de Tarjan (1972), son muy eficientes y efectivos.

Para la selección de las variables a romper, el algoritmo desarrollado por Motard y Westerberg (1977), proveen un criterio apropiado. Una vez que las uniones han sido determinadas, la secuencia de cálculo es llevada a cabo.

Para la convergencia de las corrientes de recirculación, el algoritmo de Wegstein (1958), ha sido el mejor para la simulación modular secuencial por casi 20 años: aunque este algoritmo descuida la interacción entre las variables de las corrientes a romper.

Las especificaciones son resueltas por cualquier técnica para la solución de ecuaciones algebraicas no lineales, tal como el método de la secante; aunque recientemente se están utilizando métodos como el de Newton, para resolver simultáneamente las corrientes de recirculación y las especificaciones.

METODOS ORIENTADOS A ECUACIONES

La idea básica de estos métodos, es simplemente la colección de todas las ecuaciones que describen el diagrama de flujo y resolverlas como un sistema de ecuaciones algebraí-

cas no lineales.

Matemáticamente el problema se puede representar como:

$$\text{Resolver } \underline{F}(\underline{x}, \underline{u}) = 0 \quad (3)$$

Donde: \underline{x} = Vector de variables de estado (dependientes)

\underline{u} = Vector de variables de decisión (independientes).

Las variables de decisión generalmente incluyen a todos los parámetros del bloque y a las variables de corriente de alimentación; las variables de estado, incluyen a todas las variables de corriente intermedias y de productos, variables internas y variables resultantes.

Los métodos orientados a ecuaciones, se utilizan extensivamente en modelos de operaciones unitarias individuales.

El algoritmo de Naphtali-Sandholm (1971), para cálculos de destilación fué una de las primeras aplicaciones del algoritmo de solución de ecuaciones, y que son utilizados hoy en día para destilación.

El punto de partida para los métodos orientados a ecuaciones, es la partición del diagrama de flujo; no obstante, en lugar de utilizar las subrutinas para calcular las varia-

bles de salida como una función de las variables de entrada; los simuladores orientados a ecuaciones necesitan de procedimientos que generen y representen las ecuaciones para cada bloque, que son alimentadas a un eficiente procedimiento de solución de ecuaciones.

En resumen, los algoritmos de solución de ecuaciones, son utilizados para modelar tipos individuales de equipo, para resolver sistemas de simulación que involucran colecciones homogéneas de unidades (tal como columnas de destilación o cambiadores de calor), y que están siendo estudiados en sistemas prototipo para resolver un sistema de simulación general.

ALGORITMOS DE DOBLE ROMPIMIENTO

Aunque los métodos de solución de ecuaciones ofrecen una rápida convergencia y formulación natural de los problemas de diseño, ellos tienen tres grandes desventajas; primero necesitan buenos valores iniciales; segundo, no toman en cuenta las ventajas y la gran inversión utilizada en el desarrollo de los modelos de operaciones unitarias, basados en el enfoque modular secuencial; y tercero, cuando hay un error de cálculo y no converge; es difícil para el usuario diagnosticar el problema.

Esta es otra clase de métodos, llamados por Rosen (1980) de doble rompimiento que superan las desventajas de los métodos de solución de ecuaciones, ya que se anticipan a muchas de estas desventajas. La idea básica de este enfoque, está expuesta en la figura 4.

En este enfoque se utilizan los dos tipos de modelos: Rigurosos y Simples.

Los modelos rigurosos, son los modelos de operaciones unitarias tradicionales, que se utilizan en la simulación modular secuencial; sin embargo, son utilizados para determinar los parámetros en los modelos simples que son representados como ecuaciones.

Los modelos simples se resuelven por medio de cualquier técnica eficiente de solución de ecuaciones, para determinar todas las variables de corriente que admiten los modelos rigurosos que son llamados otra vez. Los modelos simples pueden ser modelos lineales cuyos coeficientes son determinados por perturbación numérica de los modelos rigurosos, que están en forma de ecuaciones; sin embargo tienen muy pocas variables internas en comparación con las de los modelos rigurosos.

En un modelo lineal, las variables de estado son las va-

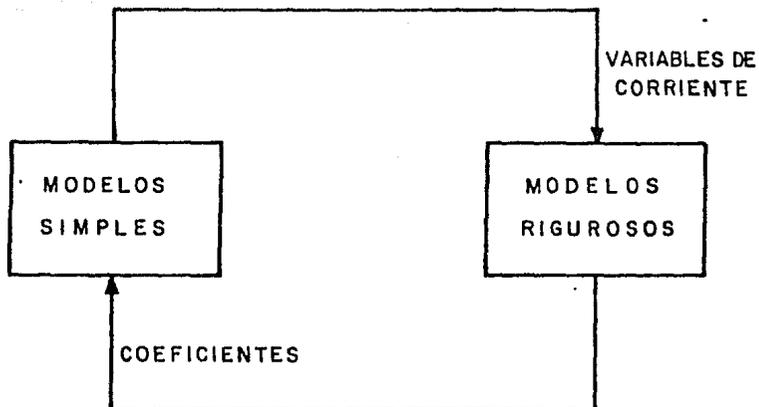


FIGURA 4- ALGORITMO DE DOBLE ROMPIMIENTO

riables de corriente de salida. Los modelos simples, sea lineal o no lineal, algunas veces son referidos como modelos reducidos, ya que involucran muy pocas variables.

El enfoque de doble rompimiento tradicional, es llamado modular simultáneo (Westerberg 1979), porque éste usa los modelos modulares tradicionales, ya que son resueltos simultáneamente para todas las variables de corriente.

Este enfoque toma la ventaja de la existencia del modular secuencial, particularmente tiene toda la estructura heurística para promover valores iniciales y para manejar casos especiales. Estos algoritmos proveen valores iniciales, para el enfoque modular secuencial.

El enfoque de doble rompimiento, es considerado en realidad como otro método de convergencia que es utilizado como una alternativa para el enfoque modular secuencial.

SOFTWARE

El software de un sistema de simulación, incluye todos los requerimientos para implementar los algoritmos a una computadora y a sistemas en operación.

Las ediciones a ser consideradas en el desarrollo de un

buen software incluyen:

Al programa y arquitectura del sistema, estructuras de datos, interfase con el sistema de archivo, código computacional y la documentación del sistema.

Estas son cinco etapas en el ciclo de vida de cualquier programa de computo a gran escala:

- 1) Definición.
- 2) Diseño.
- 3) Implementación.
- 4) Prueba.
- 5) Distribución.

- La primera etapa es la DEFINICION de las especificaciones funcionales o criterios de diseño, que nos dice cuál es el sistema a utilizar pero, no indican como. Las especificaciones funcionales contestan preguntas tales como:

- ¿ Cuáles modelos de ingeniería deben ser incluidos?
- ¿ Qué tipos de análisis deben ser realizados?
- ¿ Qué características de la interfase con el usuario -- son importantes?
- ¿ Cuáles son los requerimientos para interactuar con la computadora y el sistema en operación?

- La siguiente etapa es el DISEÑO del sistema, que especifica como se deben hallar los requerimientos funcionales.

En esta etapa se toman las decisiones del programa a considerar, la arquitectura del sistema, estructura de datos, interfase con el sistema de archivo y selección del lenguaje de programación.

El diseño del sistema es un proceso de síntesis en donde las alternativas que se requieren son consideradas y evaluadas.

Un método para el diseño del sistema conocido como diseño estructurado, incluye una notación y terminología para describir el diseño del sistema; las técnicas de análisis para evaluarlo, guías para un buen diseño y un proceso en el cual el diseño es sistemáticamente revisado, mejorado y expresado con gran detalle.

- Una vez que el diseño es completado, inicia la etapa de IMPLEMENTACION, que es el proceso de translación del diseño del sistema dentro del código computacional.

El lenguaje de programación, puede ser seleccionado, si éste no es parte del diseño del sistema.

- La cuarta etapa es la de PRUEBA. Que es una de las --

más costosas y que consumen mas tiempo en el ciclo de vida.

En esta etapa los programas de computadora a gran escala en sistemas de simulación (O para cualquier otro propósito), deben ser confiables, libres de fallas y además que los usuarios manejen y tengan confianza en los resultados obtenidos.

- La etapa final en la vida del sistema, es la fase de - DISTRIBUCION, en donde el programa es utilizado continuamente para resolver problemas reales, en base a la producción. Las estrategias para mantenimiento y mejoramiento del sistema, entrenamiento y consulta de usuarios, también son importantes.

INTERFASE CON EL USUARIO

La interfase con el usuario es la ventana por la cual el usuario revisa el sistema, incluyendose el lenguaje de entrada u otras medidas por medio de las cuales el usuario pueda describir su o sus problemas. También se incluyen los reportes de salida, que es donde se presentan los resultados.

Las características más importantes que debe tener la interfase con el usuario, se enlistan a continuación:

- 1.- Debe tener un formato libre.
- 2.- Debe estar organizado por medio de párrafos, oraciones y palabras.
- 3.- Debe permitir diferentes tipos de entrada:
 - a) Por claves ó
 - b) posicional.
- 4.- Debe proporcionar valores automáticamente cuando se necesiten.
- 5.- El usuario debe proporcionar globalmente las unidades de entrada y salida, dentro de un párrafo o para datos en forma individual.
- 6.- El usuario debe especificar los datos de entrada -- por componentes, corrientes, bloques y algunos o -- otros datos del modelo.
- 7.- Debe proporcionar al usuario una forma recomendada de introducir los datos.
- 8.- El usuario debe tener acceso a cualquier variable -- del modelo, y además pueda hacer cualquier transformación por medio de proposiciones fortran.
- 9.- El usuario debe documentarse con el lenguaje.
- 10.- La descripción del diagrama de flujo de proceso es independiente del esquema de convergencia.

Muchos de los requerimientos de la interfase con el usuario, están en conflicto y deben ser tratados con destreza pa

ra que sean fáciles de usar, flexibles y además fáciles de aprender.

REQUERIMIENTOS DE UN SISTEMA DE SIMULACION

Los programas de computación han sido desarrollados por grandes compañías químicas, petroleras y de la construcción para la simulación de procesos a estado estacionario, por medio de los diagramas de flujo. Un gran número de éstos programas de la Primera Generación fueron desarrollados a fines de los 1950's y principios de los 1960's. El desarrollo de los programas de la Segunda Generación comienza a finales de los 1960's.

En las tablas 1 y 2, se enlistan las principales diferencias entre los programas de la 1a. y 2a. generación.

Esta interesante información, fué dirigida por Evans et al, que describe a la primera generación, y por Motard et al, que resume el reciente trabajo de la simulación de procesos. Los términos primera y segunda generación son utilizados en el aspecto evolutivo.

Debido a las limitaciones de los programas de la 1a. y-

T A B L A 1

PRIMERA GENERACION DE SIMULADORES

- 1.- De 1 a 5 años-hombre para desarrollarlos.
- 2.- Costo menor a \$200,000.00
- 3.- La simulación es llevada a cabo de la interpreta --
ción y descripción del proceso.
- 4.- Capacidad muy limitada de propiedades físicas.
- 5.- Archivo limitado de subrutinas de las operaciones -
unitarias.
- 6.- Las subrutinas de nuevas operaciones unitarias, --
sólo pueden ser adicionadas por el programador del-
sistema.
- 7.- Solo es capaz de realizar la simulación.
- 8.- La convergencia de las recirculaciones, es general-
mente por sustitución directa.

T A B L A 2

SEGUNDA GENERACION DE SIMULADORES

- 1.- De 20 a 60 años-hombre para desarrollarlos.
- 2.- Costo menor de \$1'000,000.00
- 3.- La simulación es llevada a cabo por la ejecución de un programa de fortran.
- 4.- Extenso banco de datos de información de propiedades físicas.
- 5.- Extenso archivo de subrutinas de operaciones unitarias.
- 6.- Las subrutinas nuevas de operaciones unitarias pueden ser adicionadas por el usuario.
- 7.- Con habilidad para resolver el problema de diseño - por medio de la simulación.
- 8.- Técnicas sofisticadas para la convergencia de las - recirculaciones.
- 9.- Limitados a sistemas vapor-líquido.

2a. generación, una Tercera Generación de sistemas de simulación, puede ser necesaria para resolver los problemas de ingeniería de procesos de los 80's.

En la tabla 3 se enlistan los requerimientos de los programas de la 3a. generación.

Nuestra habilidad ingenieril para desarrollar procesos más eficientes, se ve limitada por los requerimientos para poder llevar a cabo la evaluación de las alternativas del diagrama de flujo.

Por lo que es necesario un eficiente sistema de simulación, tal como el expuesto en la figura 5, para llevar a cabo el análisis de sistemas de procesos que permitan a los ingenieros de proceso evaluar más configuraciones del proceso.

Los problemas que con mayor frecuencia se presentan, y que son un desafío para poder iniciar la planeación de un sistema de simulación y que son capaces de realizarse del análisis de diagrama de flujo; se enlistan a continuación:

- 1.- Simulación a estado estacionario: balance de masa y energía para determinar los valores de las variables de corriente de proceso.
- 2.- Tamaño del equipo: dimensionamiento y parámetros de ejecución de las unidades del proceso.
- 3.- Evaluación económica: capital invertido, costo de manufactura y análisis de ganancias.
- 4.- Simulación a estado no estacionario: procesos dinámicos para arrancar, parar y el control del proceso y en casos de emergencia.
- 5.- Eficiencia de energía: realización de los balances de energía, termodinámicamente.

La figura 6, resume los pasos involucrados en la concepción de un proceso nuevo, para que pueda arrancar y operar.

Los bloques oscuros representan los pasos en donde la computadora debe asistir.

La computadora sirve como se había mencionado anteriormente, como una herramienta que permite al usuario refinar su conocimiento en cuanto al proceso por análisis interactivo.

Los tipos de análisis expuestos en la figura anterior, pueden ser asistidos por un sistema de simulación que permita cerrar la interacción entre el usuario y la computadora.

T A B L A 3

TERCERA GENERACION DE SIMULADORES

- 1.- El sistema debe permitir análisis de diagrama de flujo con diferentes tipos de corrientes; incluyendo a las corrientes líquido-vapor, las que contengan sólidos, multifase, corrientes sólido-líquido-vapor, corrientes de energía y de información.
- 2.- La descripción del diagrama de flujo, debe ser independiente de los programas de análisis.
- 3.- El sistema debe aceptar diagramas de flujo a diferentes niveles de detalle: simples, detallados y muy detallados.
- 4.- El sistema debe ser extenso y capaz de ser modificado.
- 5.- El sistema debe ser fácil de entender por el usuario, esto es, que esté bien documentado y diseñado.
- 6.- El sistema debe ser accesible para el usuario.
- 7.- El sistema debe ser adaptable a diferentes tipos de computadoras.
- 8.- El usuario debe ser capaz de suministrar los datos de entrada en una forma conversacional; ya que esto facilitaría la interpretación de los resultados.
- 9.- Costo mayor a \$5'000,000.00
- 10.- De 2 a 6 años-hombre para desarrollarlos en un lapso de 3 a 5 años, para poder terminarlos.

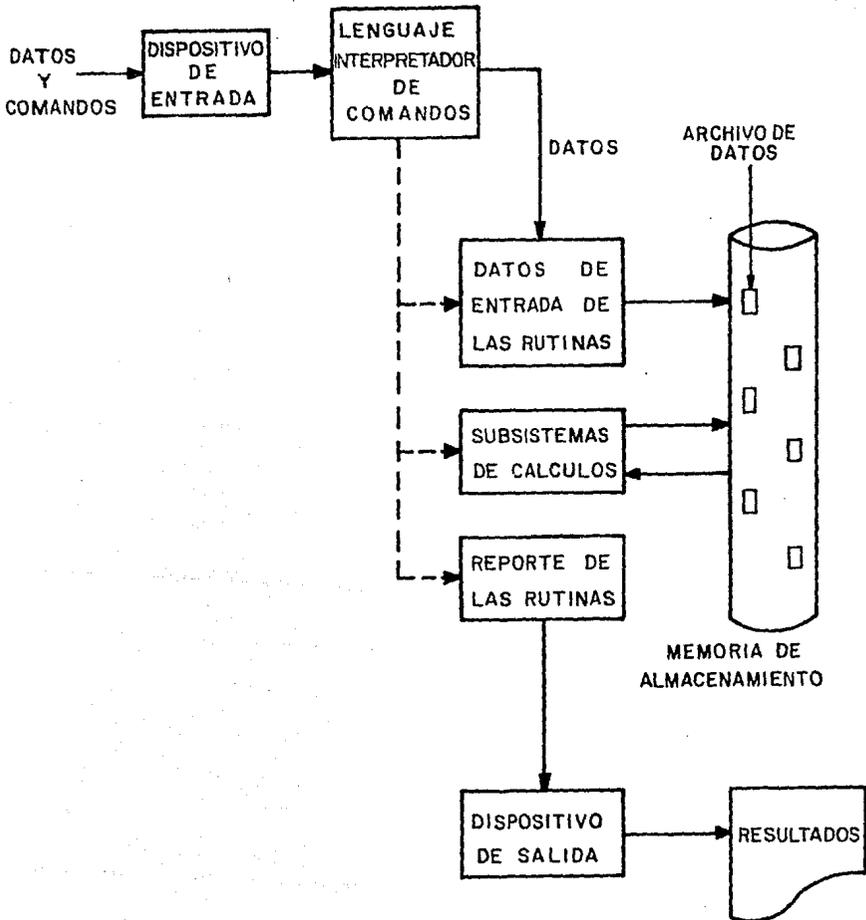


FIGURA 5.- FLUJO DE INFORMACION EN UN SISTEMA DE SIMULACION

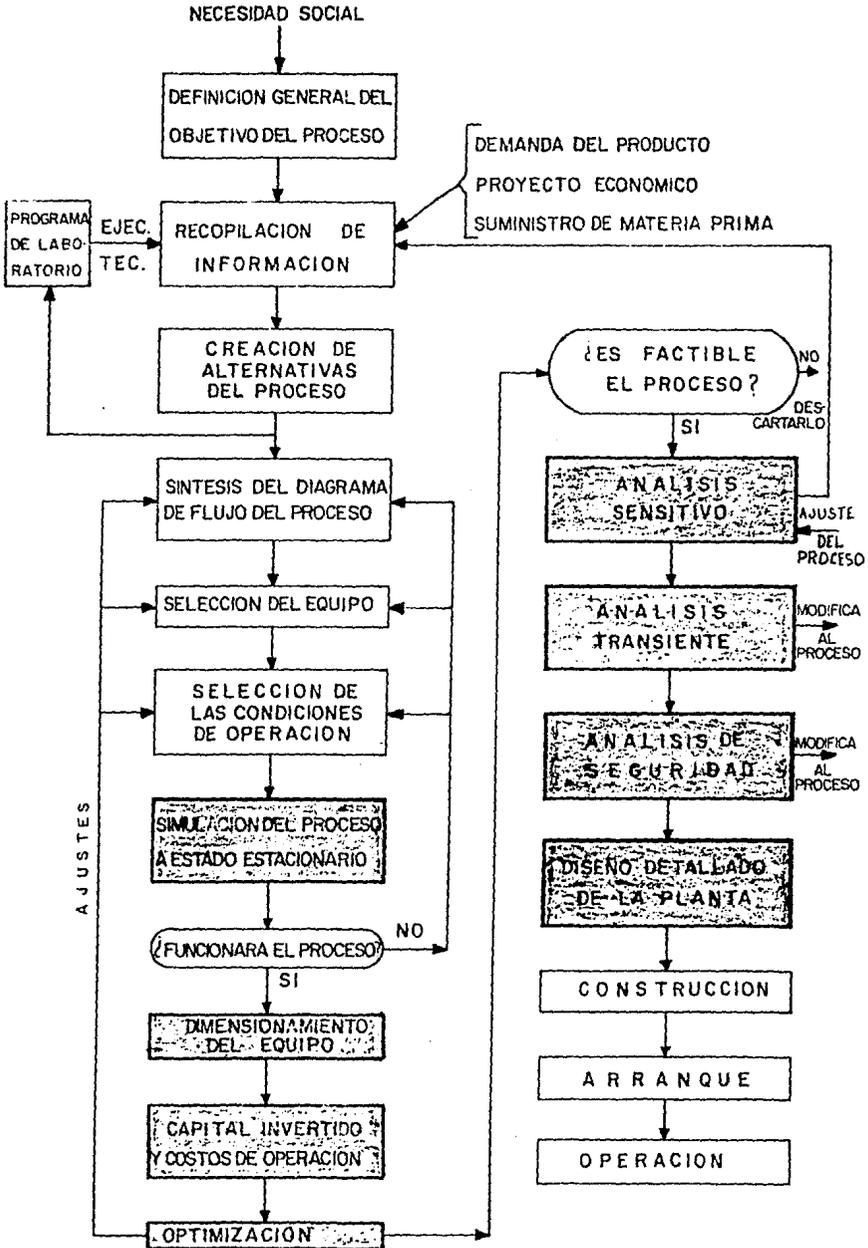


FIGURA. 6: ETAPAS QUE INTERVIENEN EN EL DESARROLLO DE UN NUEVO PROCESO

CAPITULO III

DESCRIPCION DEL PROCESO PLANTA METANOL I

DESCRIPCION DEL PROCESO DE LA PLANTA METANOL I

La planta en estudio, está diseñada para la producción de metanol, y se divide en las siguientes secciones:

- PURIFICACION DE GAS NATURAL

El gas natural proveniente del gasoducto, pasa a la casetta de medición y de allí a unos separadores de sólidos y a un separador de líquidos donde se retienen todos los líquidos que pudiera traer; al salir del separador se le controla la presión por medio de una válvula de control; al salir del control, una parte del gas sale como combustible (hacia el reformador y a la sección de compresión), y otra parte entra a la planta como gas de proceso.

El gas de proceso pasa a unos eliminadores de azufre, donde se elimina el ácido sulfhídrico (H_2S), y los compuestos orgánicos de azufre, tales como mercaptanos ($R-HS$), y sulfuro de carbonilo (COS), absorbiéndose en el catalizador de carbón activado que contiene un gran porcentaje de óxidos metálicos.

El gas natural ya desulfurizado que sale del eliminador, debe contener, cuando más 1 ppm de azufre, ya que éste es un

veneno para el catalizador del reformador. Una vez que se ha saturado uno de los eliminadores debe regenerarse.

El gas natural, pasa después a través de un filtro de carbón, donde se elimina el polvo de carbón, que pudiera haber arrastrado, pasando después por una válvula de control de flujo. Al salir de ahí, se mezcla con una corriente de bióxido de carbono (CO_2), recirculado de la sección de compresión y un poco antes de entrar al calentador reformador, se le une una corriente de vapor recalentado.

- REFORMACION

La mezcla de gas natural, CO_2 y vapor es calentada en la sección de convección del reformador, hasta una temperatura de 425°C antes de entrar a la sección de radiación donde están localizados los tubos de catalizador del reformador.

El precalentamiento se hace con la finalidad de aprovechar al máximo el lecho catalítico.

El reformador, es un horno de tiro inducido, con catalizador de níquel en los tubos catalíticos, siendo el combustible de éste, gas natural.

Este horno de reformación tiene 2 secciones: Convec --

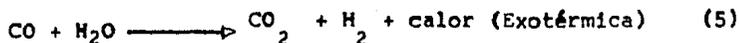
ción y Radiación.

En la sección de convección se encuentran dispuestos varios serpentines, los cuales tienen la siguiente función:

Sobrecalentamiento de agua para producción de vapor, -- precalentamiento de la alimentación, precalentamiento del agua de alimentación a la caldera y sobrecalentamiento de vapor.

La zona de radiación contiene los tubos empacados con el catalizador de níquel, donde se lleva a cabo la reformación.

Las principales reacciones químicas que ocurren dentro de los tubos catalíticos son:



Reacciones similares a la primera pueden ocurrir con -- hidrocarburos de alto peso molecular.

La reformación del metano comienza aproximadamente a -- 600°C; aunque hidrocarburos superiores reaccionan a temperaturas más bajas.

Las reacciones se llevan a cabo con un exceso de vapor. El calor absorbido por la primera reacción, es mucho mayor - que la que libera la segunda reacción, por lo cual el proceso es endotérmico, por lo que hay que suministrar calor por medio de los quemadores, para poder llevar a cabo la reforma ción.

Para contrarrestar la segunda reacción, se hace la adición de CO_2 , para desplazarla hacia la izquierda, teniendo - mayor producción de CO .

El gas reformado al salir de la cama catalítica, pasa a la línea de transfer aproximadamente a 865°C , el calor que - trae este gas, es aprovechado para la producción de vapor, - en un generador de vapor (mediante sifón térmico); el gas a la salida de este generador, toma 2 caminos; como gas a proceso y como gas a mutación.

El gas reformado a proceso es enfriado mediante agua, - en un intercambiador hasta una temperatura de 38°C , después de este enfriador, se hace pasar a un separador de condensado para recuperarlo; el gas libre de condensado entra a la - sección de compresión.

- COMPRESION

Para la compresión de este gas, se cuenta con 3 máquinas -- compresoras que trabajan en paralelo, cada una cuenta -- con cinco pasos de compresión y son del tipo recíprocante y -- de servicio múltiple, cuenta también con un cilindro para -- comprimir el CO_2 que se recircula al reformador, y otro ci -- lindro para el gas de recirculación de la sección de conver -- sión.

La finalidad de ésta sección, es la de transferir el -- gas y presionarlo de 2.7 a 360 Kg/cm^2 , donde se necesita és -- ta presión para la conversión de metanol.

La presión del gas a la succión de los dos primeros pa -- sos, es controlada por medio de una válvula de control.

El gas es succionado por el primer paso de compresión, -- siendo descargado a través de un enfriador de entre paso y -- luego a un separador de líquidos para ser succionado por el -- segundo paso de compresión, común para las tres máquinas, pa -- sando luego a través de un enfriador y a un separador de lí -- quidos, para luego dirigirse a la torre absorbadora.

- PURIFICACION DEL GAS DE SINTESIS

El gas que sale del segundo paso de compresión, pasa a la torre absorbedora; la función de esta torre es reducir la concentración del CO_2 , en el gas de síntesis de metanol.

En la torre se absorbe el CO_2 , por medio de una solución diluida de monoetanolamina.

La absorción de M.E.A., eliminará el CO_2 de la corriente de gas, lo más bajo posible.

Como en la sección de amina, el ciclo es cerrado, esta torre cuenta además con una torre regeneradora, donde se lleva a cabo la desorción por medio de calor.

El gas de síntesis después de la absorción, es pasado a través de un separador de condensado, y de ahí al tercer paso de compresión, común para las tres compresoras del gas de síntesis.

Este gas es succionado por el tercer paso de compresión y descargado a un enfriador de entre paso y luego a un separador de condensado, para después ser succionado por el cuarto paso de compresión y descargando a un enfriador y separa-

dor, succionandolo a éste el quinto paso, descargando el gas a un cabezal común para las tres máquinas.

Este gas, que sale a una presión de 360 Kg/cm^2 del quinto paso de compresión, es enfriado posteriormente en un intercambiador, después el gas de síntesis es alimentado al reactor.

- CONVERSION DE METANOL

Al gas de síntesis, se le une la corriente de CO_2 , que viene del compresor de recirculación, ambas corrientes son enviadas a la síntesis de metanol.

La síntesis de metanol requiere una mezcla de hidrógeno (H_2) y monóxido de carbono (CO), con una relación mínima teórica de 2/1, y debe tener una concentración muy baja de CO_2 , ya que éste es un veneno del catalizador del convertidor.

Ya que el gas de síntesis debe de estar libre de aceite y líquidos, éste se hace pasar a través de un filtro; después el gas toma dos caminos.

Una de las corrientes es la principal, que entra en la parte superior del convertidor y la otra corriente entra por

la parte inferior del mismo y se utiliza como tiro frío.

El flujo principal, después de entrar al convertidor se dirige hacia abajo, por una sección anular; entre la envolvente y la canasta del catalizador, ésto ayuda a remover el calor de la canasta y a su vez calienta la carga del recipiente. Posteriormente, el gas se mezcla con el tiro frío y pasan a un cabezal medio, para luego pasar por el interior de unos tubos concéntricos, recibiendo en un cabezal superior de la sección media, después suben a través de una resistencia eléctrica que proporciona el calentamiento inicial.

Después del calentamiento, los gases pasan a través de las camas con catalizador de óxidos de Zn y Cr; en éstas camas se lleva a cabo la reacción a 380°C y 360 Kg/cm^2 , que son las condiciones para la conversión de metanol.

El catalizador del convertidor para la síntesis de metanol, es una mezcla de óxidos de Zinc y Cromo, seleccionado por los resultados satisfactorios que se han obtenido.

Este catalizador es especial para la reacción del metanol, resistente a los envenenamientos y a los deterioros físicos.

Los principales venenos del catalizador son el oxígeno, azufre, vapor de agua y carbonilos de hierro.

Las principales reacciones que se llevan a cabo en el convertidor son:



Debido a que en la síntesis, las reacciones son exotérmicas, y generan grandes cantidades de calor, éste se distribuye uniformemente en el convertidor, y es por ello que se tiene el arreglo antes mencionado del mismo.

Aunque éste catalizador es selectivo para la reacción del metanol, son posibles otras reacciones secundarias.

Al salir los gases de metanol del convertidor, éstos se hacen pasar a través de un cambiador, donde se enfrían de -- 165°C, que es su temperatura de salida, hasta 48°C aproximadamente, donde el metanol gaseoso se condensa como líquido,-

éste se hace pasar a un separador de metanol.

En éste separador, los componentes líquidos se separan de los gases no convertidos e incondensables.

Los gases que no se convirtieron en el reactor, son enviados como recirculación, siendo recomprimidos y enviados al convertidor.

El metanol que sale del separador, está constituido de una porción líquida y otra gaseosa, siendo pasado éste a la torre absorbadora de metanol, donde se le adiciona agua de dilución; la combinación del agua utilizada para lavar los gases y el metanol, constituyen el metanol crudo, con una pureza de 56%; en donde el flujo de agua es una función de ésta pureza.

Los gases incondensables (CO , H_2 , CH_4 y CO_2) que no son absorbidos por el agua, se envían al desfogue general.

El metanol crudo que sale por el fondo de la torre absorbadora de metanol, es enviado a un tanque de almacenamiento de metanol crudo, para posteriormente pasarlo a la sección de destilación.

- PURIFICACION DEL METANOL CRUDO

En la sección de destilación, el metanol crudo es succionado del tanque de almacenamiento, por medio de una bomba hacia unos intercambiadores, entrando por la parte superior, donde se eliminan principalmente las metilaminas.

El metanol libre de éstas impurezas, pasa a la torre -- despuntadora, en donde se separan, CH_4 , CH_3OCH_3 , H_2 , CO , -- los cuales salen por la parte superior de la torre, pasando a un enfriador y posteriormente separados en un acumulador; los gases son venteados a la atmósfera.

El condensado del acumulador, es reflujaado a la torre -- despuntadora.

Para mantener la temperatura en el fondo de la torre -- despuntadora, se tiene un rehervidor, cuyo medio de calentamiento es vapor de baja presión.

- PURIFICACION DE METANOL REFINADO

El metanol despuntado, que sale por el fondo de la torre despuntadora, es succionado por medio de una bomba hacia la torre refinadora.

Los vapores de metanol que salen del domo de esta torre, se pasan a un condensador y posteriormente a un acumulador - de metanol puro.

El metanol puro, es succionado por una bomba, en donde una parte de éste es enviado como reflujo, y el resto se pasa a través de un enfriador, para posteriormente enviarse -- éste a los tanques de almacenamiento de metanol puro.

El líquido que queda en el fondo de la torre de metanol refinado, se envía hacia un recalentador, con el fin de mantener la temperatura en el fondo de la misma.

El metanol puro, deberá tener las características y especificaciones que se mencionan en el apéndice A.

CAPITULO IV**SIMULACION DEL PROCESO
PLANTA DE METANOL**

DESCRIPCION DE LOS MODELOS DEL PROCESO

El diagrama de flujo del proceso de metanol, se presenta en la figura 7, y descrito en el capítulo anterior; fué modelado utilizando el sistema "SGP/ZAR" (SISTEMA GENERAL DE -- PROCESOS/ZARAÑOZA); siendo éste sistema, un programa de simulación modular de diagramas de flujo.

SGP/ZAR, es una versión modificada del sistema CHESS -- (SISTEMA DE INGENIERIA QUIMICA).

El diagrama de flujo de información para la simulación del proceso con SGP/ZAR, está expuesto en la figura 8.

Los nombres de los módulos utilizados por SGP/ZAR, para la simulación del proceso y sus funciones, se presentan en la tabla 4.

Módulos estándares de equipo, fueron utilizados por -- SGP/ZAR para la simulación del proceso, tales como intercambiadores, separadores, compresores, etc., sin embargo se desarrollaron otros módulos de equipo utilizados en el proceso de metanol, tales como el reformador metano-vapor, calentador rehervidor de desechos, rehervidor calentador del agua de alimentación, convertidor de metanol y condensador par --

cial.

SGP/ZAR, no tiene módulos que simulen la operación de los equipos antes mencionados, pero se desarrollaron subrutinas para la simulación de los mismos y que fueron utilizadas por SGP/ZAR para el modelado del proceso de metanol.

Para la simulación del proceso, fué necesario adicionar dos módulos; el primero, un módulo de soporte, que calcula el calor de reacción a la presión y temperatura del sistema-reaccionante y la constante de equilibrio químico a la temperatura de reacción.

El segundo, un módulo que regula la temperatura de la mezcla de reacción que entra en cada lecho catalítico del convertidor de metanol para ajustar la cantidad de gas de apagado.

Los módulos que fueron desarrollados junto con los dos módulos adicionados para la simulación del proceso de metanol se describen a continuación.

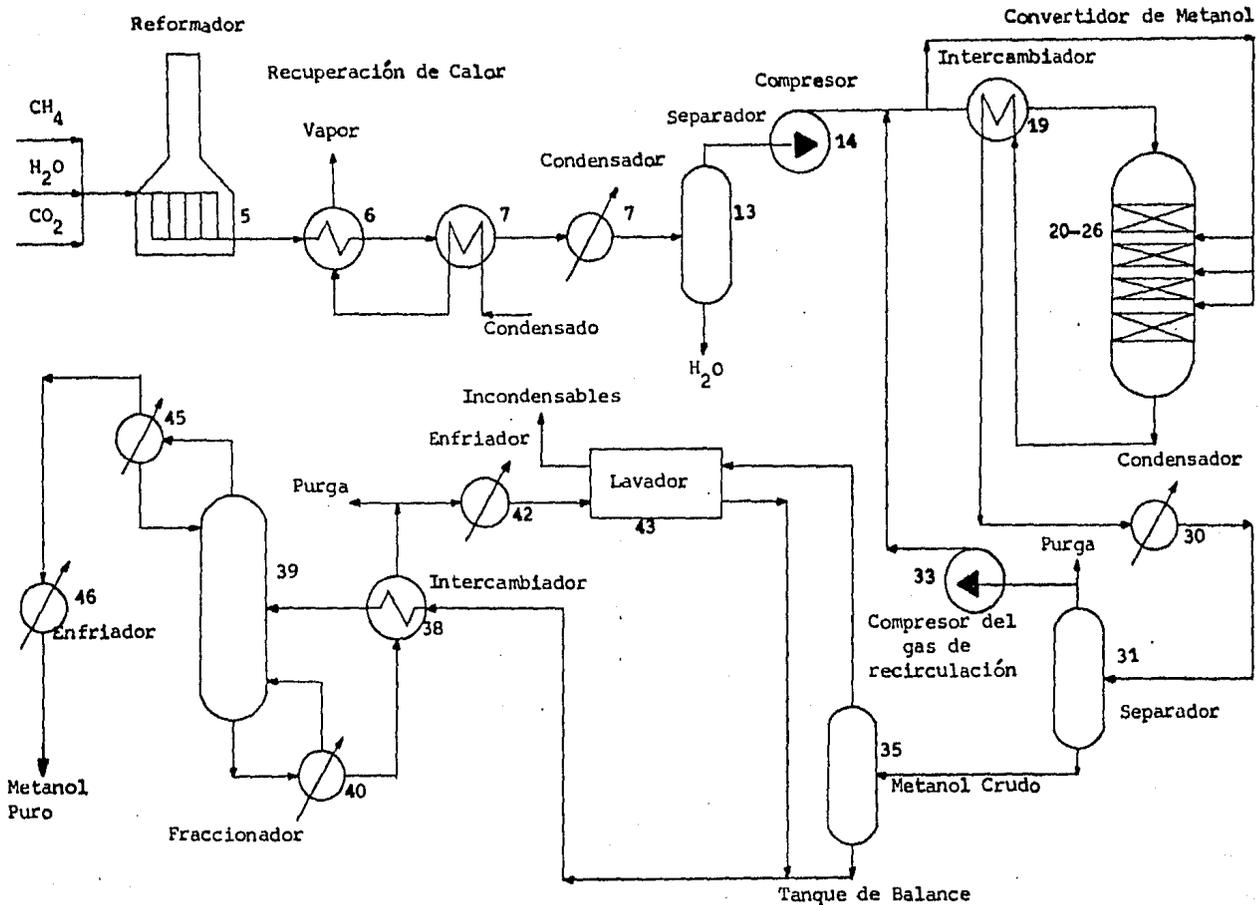


FIGURA 7.- Diagrama de flujo del proceso de metanol

TABLA 4

MODULOS DEL EQUIPO UTILIZADO EN LA
SIMULACION DEL PROCESO

NOMBRE DEL MODULO	FUNCION
ABSR	Absorbedor
ADBF	Separador
ADD1	Reformador metano-vapor
ADD2	Convertidor de metanol
ADD3	Calentador rehervidor de desechos
ADD6	Rehervidor calentador del agua de alimentación y condensador par -- cial.
ADD7	Controlador de apagado
DIST	Fraccionador
DVDR	Divisor de corrientes
HXER	Intercambiador de calor
MIXER	Mezclador
PUMP	Compresor
VALV	Válvula reductora de presión.

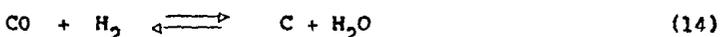
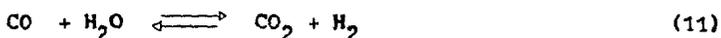
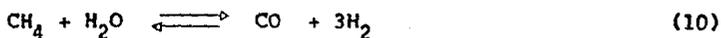
- REFORMADOR METANO-VAPOR

El método más común para la producción de H_2 y CO , requeridos en la síntesis de metanol, es por medio de la reformación catalítica de metano-vapor.

En el proceso de reformación de metano-vapor, la mezcla precalentada de vapor, CO_2 y CH_4 , reacciona por encima del catalizador con base de níquel. El catalizador que está contenido en los tubos verticales, son calentados externamente en el horno reformador, con gas natural como combustible, -- que proporciona el calor requerido para llevar a cabo la -- reacción endotérmica de metano-vapor.

La función del módulo del reformador, es la de definir la temperatura, presión, entalpia y composición de la mezcla de gas efluente, dadas las condiciones de entrada y las reacciones que se llevan a cabo.

Las reacciones que ocurren en el reformador son:



La ecuación (10), es la reacción de metano-vapor; la ecuación (11), es la reacción de conversión agua-gas. La composición del gas permitido en el reformador, se controla por las condiciones de equilibrio de estas dos reacciones a la temperatura y presión del sistema.

Las ecuaciones (12), (13) y (14) son las reacciones que resultan de la deposición de carbón en el catalizador del reformador; por lo que las condiciones de operación se eligen para suprimir éstas reacciones.

La conversión de metano en el reformador, se determina por el equilibrio termodinámico de las ecuaciones (12) y (13) (Moe y Allen).

Las variables significativas en la determinación de la composición de equilibrio del gas reformado son:

- 1.- Relación de vapor a CH_4 en la alimentación del reformador.
- 2.- Relación de CO_2 a CH_4 en la alimentación del reformador.
- 3.- Temperatura de operación del reformador.
- 4.- Presión de operación del reformador.
- 5.- Conversión de CH_4 en el reformador.
- 6.- Relación de H_2 a CO en el gas reformado.

Los efectos de cambio en éstos parámetros en la operación del reformador, han sido descritos en varias publicaciones (Moe y Allen; Wellman y Katell, 1963; Kitzen y Tiel Rooy, 1961; y Metta, 1970).

Una incrementada conversión de metano, se ve favorecida por:

- 1.- Incremento en la temperatura del reformador.
- 2.- Incremento en la relación vapor a CH_4 en la alimentación.
- 3.- Disminución en la presión del reformador.

La relación de H_2 a CO en el gas reformado se ve incrementada por:

- 1.- Disminución en la temperatura del reformador.
- 2.- Incremento en la relación de vapor a CH_4 en la alimentación.
- 3.- Disminución de la relación CO_2 a CH_4 en la alimentación.

A pesar del hecho de que la conversión de CH_4 en el reformador, se ve disminuida por el incremento de la presión, la tendencia en el diseño del reformador ha sido el de operar a altas presiones. Se tienen algunas ventajas en la ope

ración a altas presiones; la primera es de que el gas reformado está a alta presión y por lo tanto, la energía requerida por el compresor para llevar el gas a la presión de síntesis, no es tan grande.

Al tener el gas natural a altas presiones se puede utilizar, sin tener que reducir su presión. Finalmente, el calor recuperado del gas reformado es mejor a altas presiones.

La tendencia del carbón que se deposita en el catalizador, también debe ser considerado al establecer las condiciones de diseño.

La actividad del catalizador disminuye debido a la deposición de carbón, disminuyendo la conversión de CH_4 ; también, causa que el catalizador se desintegre debido al incremento de la caída de presión a través del reformador.

Morse (1973) desarrolló una serie de relaciones que definen las condiciones de operaciones del reformador. Estas relaciones se derivan de las ecuaciones del balance de masa en el reformador y de las ecuaciones de equilibrio de las reacciones.

Las ecuaciones que definen las condiciones de equilibrio de la mezcla de reacción son:

$$Z_4 = 1/K_{p4} \quad (15)$$

$$\log_{10} K_{p3} = -21,185/T + 13.1927 \quad (16)$$

$$\log_{10} K_{p4} = 3,236/T - 1.6485 \quad (17)$$

$$U_4 = R_2(R_3 + 1) - 2(R_3 - 1)C \quad (18)$$

$$V_4 = R_3 [R_3(C + R_1) - 3C + R_1] \quad (19)$$

$$Z_4 = U_4/V_4 \quad (20)$$

$$U_3 = 2 [(N - R_1 - 1) + R_3 Z_4 (N - 3R_1 - R_2 - 1)]^4 \quad (21)$$

$$V_3 = R_3 N^2 (Z_4 R_3 - Z_2 + 2)^3 (1 - C) [R_3 (2R_1 + R_2) + R_1 + 1 - N] \quad (22)$$

$$N = 3 + R_1 + R_2 - 2(1 - C) \quad (23)$$

$$K_{p3} = U_3 p^2 K_{p4} / V_3 \quad (24)$$

donde:

R_1 = Relación CO_2/CH_2 en la alimentación del reformador.

R_2 = Relación vapor/ CH_4 en la alimentación del reformador.

R_3 = Relación H_2/CO en el gas reformado.

C = Conversión de CH_4 , Lb CH_4 convertido / Lb CH_4 alimentado.

N = Moles totales en el gas reformado, Lb gas / Lb CH_4 alimentado.

T = Temperatura de la mezcla de reacción, $^{\circ}\text{R}$.

P = Presión de la mezcla de reacción, atm.

K_{p3} = Constante de equilibrio químico de la reacción (11).

K_{p4} = Constante de equilibrio químico de la reacción (12).

Varios parámetros intermedios son utilizados para definir las ecuaciones de equilibrio:

Z_4 , U_3 , V_3 , U_4 y V_4 ; éstos parámetros simplifican las ecuaciones y no tienen significado físico en el modelo del reformador.

Las ecuaciones (15) a (24) se reducen a dos ecuaciones relacionando los seis parámetros de operación, que son: R_1 , R_2 , R_3 , C , T y P . Si se especifican cuatro de éstos parámetros, los otros dos pueden ser calculados utilizando las demás ecuaciones.

Ya que los seis parámetros de diseño están definidos, - las fracciones mol de los componentes del gas reformado, se calculan de las ecuaciones del balance de masa:

$$X_{\text{CH}_4} = (1 - C)/N \quad (25)$$

$$X_{\text{CO}_2} = (R_3(2R_1 + R_2) + R_1 + 1 - N)/V \quad (26)$$

$$X_{\text{CO}} = [2(N - R_1 - 1) + R_3 Z_4 (N - 3R_1 - R_2 - 1)] / V \quad (27)$$

$$V = NR_3 (Z_4 R_3 - Z_4 + 2) \quad (28)$$

$$X_{\text{H}_2\text{O}} = R_3 Z_4 X_{\text{CO}_2} \quad (29)$$

$$X_{\text{H}_2} = R_3 X_{\text{CO}} \quad (30)$$

donde:

X_i = Fracción mol del componente i del gas reformado --
Lb/Lb.

Si R_1 , R_2 , R_3 y C se especifican, T y P se calculan -- directamente de las ecuaciones (15) a (24); sin embargo, si-

R_1 , R_2 , T y P se especifican R_3 y C , se calculan por medio de un procedimiento iterativo numérico.

Los pasos para calcular T y P cuando se especifican los otros parámetros son:

- 1.- Calcular Z_4 , utilizando las ecuaciones (18), (19), - (20).
- 2.- Calcular T , utilizando las ecuaciones (15) y (17).
- 3.- Calcular P , utilizando las ecuaciones (16), (21), -- (22), (23) y (25).

Se utilizan dos ecuaciones (Morse; 1973) para calcular - la cantidad mínima de CO_2 y vapor que debe estar presente en - la alimentación del reformador:

$$R_{1m} = (3 - R_3)/(1 + R_3) \quad (31)$$

$$R_{2m} = 1 - R_1 \quad (32)$$

donde:

R_{1m} = Relación mínima CO_2/CH_4 en la alimentación del -- reformador.

R_{2m} = Relación mínima vapor/ CH_4 en la alimentación del - reformador.

La conversión de equilibrio y la relación de H_2/CO_2 se calculan cuando se especifican los otros cuatro parámetros, por medio del procedimiento de relajación (Mickley, et al, — 1957), junto con el método de Newton (Conte, 1956b).

El método de Newton se utiliza para localizar los valores cero de las ecuaciones no lineales; la estrategia de relajación se utiliza para localizar la región de las raíces, para sistemas de ecuaciones no lineales.

Las ecuaciones (20) y (24) son rearrregladas para utilizar el procedimiento anterior.

$$F_4 = U_4 / (V_4 Z_4) \quad (33)$$

$$F_3 = (P^2 K_{P4} U_3) / (V_3 K_{P3}) \quad (34)$$

Cuando el sistema reaccionante está en equilibrio, los valores F_3 y F_4 son cero.

Después de que los parámetros de diseño están completamente definidos y la fracción mol de equilibrio de cada componente está determinada, las ecuaciones (12), (13) y (14) — son probadas para determinar si el carbón puede estar depositado en el catalizador del reformador.

Esta prueba se hace por comparación del cociente de producto a reactivo, de las actividades de los componentes en la mezcla de reacción en equilibrio que participa en una reacción particular, para la constante de equilibrio químico de la reacción:

$$Q_r = \sum_{i=1}^n [(a_i)^{q_i} m_i] \quad (35)$$

donde:

Q_r = Coeficiente de actividad de la reacción "r".

a_i = Actividad del componente i de la reacción.

q_i = 1, si el componente i es un producto de la reacción.

q_i = -1, si es un reactivo.

m_i = Coeficiente estequiométrico del componente i.

i = Índice del componente.

r = Índice de reacción.

n = Número total de componentes en la mezcla de reacción.

Las actividades se calculan utilizando la ecuación (58).

Una relación crítica (Holland y Wan, 1963) se forma por la división de cada constante de equilibrio químico por el -

correspondiente cociente de actividad para una reacción particular:

$$R_c = K_{pr}/Q_r \quad (36)$$

donde:

K_{pr} = Constante de equilibrio químico de la reacción "r".

R_c = Relación crítica.

Un valor de $R_c > 1$, indica que el carbón se ha depositado; un valor de $R_c < 1$, indica que el reformador opera libre de depósitos de carbón.

La energía que es suministrada al reformador se obtiene de la siguiente expresión:

$$\Delta H_{ref} = (H_e - H_f)1. \times 10^{-6} \quad (37)$$

donde:

ΔH_{ref} = Energía suministrada a la mezcla de reacción --
MMBTU/Hr.

H_e = Calor total que contiene la corriente del efluente del reformador, BTU/Hr.

H_f = Calor total que contiene la corriente de alimentación al reformador, BTU/Hr.

La energía suministrada por el combustible en el reformador, con un 75% de eficiencia para el horno, es:

$$\Delta H_{fg} = \Delta H_{ref}/0.75 \quad (38)$$

donde:

$$\Delta H_{fg} = \text{Energía suministrada por el gas combustible, -- MMBTU/Hr.}$$

El flujo molar del gas combustible del reformador, es:

$$N_{fg} = \Delta H_{fg}/(H_{hv} 385.2) \quad (39)$$

donde:

$$N_{fg} = \text{Flujo molar del gas combustible, Lb/hr.}$$

$$H_{hv} = \text{Poder calorífico del combustible, MMBTU/M}^3$$

El calor que contiene el gas de combustión permitido en el reformador es:

$$H_{cg} = (\Delta H_{fg} - \Delta H_{ref})1. \times 10^6 \quad (40)$$

donde:

$$H_{cg} = \text{Calor que contiene el gas de combustión, BTU/Hr.}$$

La temperatura del gas combustible se establece utilizando la entalpia obtenida de la ecuación (40) y aplicando la ecuación (56).

- CALENTADOR Y REHERVIDOR DEL AGUA DE ALIMENTACION
Y DESECHOS.

Estas unidades recuperan el calor de la corriente de gas reformado y los gases combustibles exhaustos del reformador.

El calor recuperado, es un aspecto muy importante en la economía del proceso. La simulación de los modelos de estas unidades, determina la cantidad de vapor que se produce del aprovechamiento del calor de desecho; aunque se requiere vapor adicional para poder operar los compresores.

En el calentador de desecho, el calor es removido de la corriente de gas caliente que sale del reformador y que es utilizado para producir el vapor de proceso.

El módulo del calentador de desecho, calcula la cantidad de vapor que es producido para una disminución de la temperatura en la corriente de gas reformado.

La energía removida de la corriente de gas reformado en el calentador de desechos es:

$$Q_r = H_1 - H_0 \quad (41)$$

donde:

Q_r = Energía removida de la corriente de gas reformado, BTU/hr.

H_1 = Entalpia de la corriente de gas que entra al calentador, BTU/hr.

H_o = Entalpia de la corriente de gas que sale del calentador, BTU/hr.

La entalpia de la corriente de proceso que sale del calentador a la temperatura especificada, T_o , se calcula en el paquete termodinámico del sistema SGP/ZAR. La cantidad de calor que se genera en el calentador es:

$$F_s = Q_r / \Delta H_v \quad (42)$$

donde:

F_s = Cantidad de calor generado, Lb/hr.

ΔH_v = Calor de vaporización del agua a la presión de operación del calentador BTU/Lb.

El área de intercambio de calor del calentador se obtiene de las ecuaciones (77) y (78) donde T_1 y T_2 , están definidas como:

$$T_1 = T_1 - T_s \quad (43)$$

$$T_2 = T_o - T_s \quad (44)$$

donde:

T_1 = Temperatura de entrada de la corriente de proceso, °R.

T_2 = Temperatura de salida de la corriente de proceso, °R.

T_s = Temperatura del vapor a la presión de vapor especificada, °R.

El calentador rehedvidor del agua de alimentación, re-
mueve el calor de la corriente de gas reformado que sale del
calentador para calentar la corriente de agua a la temperatu-
ra de entrada especificada, a la temperatura de ebullición -
del agua a la presión de operación especificada del calenta-
dor.

El módulo del calentador rehedvidor del agua de alimen-
tación procesa la información que contiene la corriente de -
entrada y el conjunto de equipos y la información se pasa al
módulo del calentador para determinar:

- 1.- La cantidad de energía suministrada a la corriente-
de agua para calentarla a la temperatura de calenta-
miento requerida.
- 2.- La temperatura y fracción de vapor de la corriente-
de gas reformado que sale del calentador del agua -
de alimentación.

La cantidad de calor removido de la corriente de proce-
so para elevar la temperatura de la corriente de agua es:

$$Q_r = F_S C_p (T_S - T'_1) \quad (45)$$

donde:

Q_r = Energía removida de la corriente de proceso, BTU/hr.

F_S = Cantidad de vapor producido en el calentador, Lb/hr.

C_p = Capacidad calorífica del agua, BTU/Lb^oR.

T_s = Temperatura de ebullición del agua a la presión de vapor especificada, ^oR.

T'_i = Temperatura de entrada del agua, ^oR.

La entalpia, de la corriente de proceso que sale del calentador del agua de alimentación es:

$$H_o = H_i - Q_r \quad (46)$$

donde:

H_o = Entalpia de la corriente de proceso de salida del calentador del agua de alimentación, BTU/hr.

H_i = Entalpia de la corriente de proceso de entrada al calentador del agua de alimentación, BTU/hr.

La temperatura y fracción de vapor de la corriente de salida se calcula en la rutina de separadores del sistema SGP/ZAR.

El área de intercambio de calor del calentador rehervidor del agua de alimentación se obtiene de las ecuaciones (77) y (78); T_1 y T_2 están definidas como:

$$T_1 = T'_i - T_s \quad (47)$$

$$T_2 = T_o - T'_i \quad (48)$$

donde:

T_1 = Temperatura de la corriente de proceso de entrada al calentador del agua de alimentación, °R.

T_0 = Temperatura de la corriente de proceso de salida del calentador del agua de alimentación, °R.

- CONVERTIDOR DE METANOL

El convertidor del tipo de apagado (Strelzoff, 1970), que es utilizado en grandes plantas de metanol, es el simulado en el modelo del proceso.

El módulo del convertidor procesa información contenida en la corriente de entrada y en el conjunto de equipos para obtener:

- 1.- El flujo de los componentes de salida y los perfiles de temperatura y presión a lo largo de los lechos catalíticos.
- 2.- El tamaño del convertidor, dando la conversión, -- condiciones de operación y propiedades del catalizador.

En el desarrollo de las ecuaciones del balance de masa y energía utilizadas en el modelo del convertidor, se supone que los gradientes de concentración, temperatura y presión, son insignificantes a lo largo del radio del convertidor.

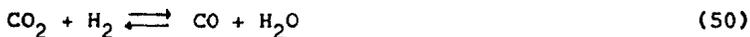
Se supone, que la no difusión del balance de masa o energía, ocurre en la dirección axial del convertidor.

Se consideran dos reacciones en el convertidor:

La reacción metano-vapor.



y la reacción de conversión reversible agua-gas,



Las ecuaciones que describen los cambios en la composición y entalpia en el lecho catalítico, se obtienen del balance de masa y energía del convertidor.

Las ecuaciones obtenidas de éstas relaciones, se ven limitadas al conocimiento de la estequiometría de las reacciones, datos de la velocidad de reacción y densidad del catalizador; así como el calor de reacción y la conversión del metanol, siendo éstas:

$$dN_i/dZ = \sum_{r=1}^2 [(q_i m_i)_{r,R} \rho_{cat}] \quad (51)$$

donde:

N_i = Flujo molar del componente i, Lb/hr.

Z = Longitud del lecho catalítico, ft.

q_i = 1, si el componente i es un producto de la reacción.

$q_i = -1$, si es un reactivo.

m_i = Coeficiente estequiométrico del componente i en la reacción r .

R_r = Velocidad de producción del componente principal - en la reacción r , Lb/Lb cat-hr.

A_c = Área seccional del convertidor, ft².

ρ_{cat} = Densidad del catalizador, Lb/ft³.

n = Número total de componentes en la mezcla de reacción.

i = Índice del componente.

r = Índice de reacción.

$$dH/dZ = \sum_{r=1}^2 \Delta H_r (dN_c/dZ)_r \quad (52)$$

donde:

H = Entalpía de las corrientes gaseosas, BTU/hr.

ΔH_r = Calor de reacción de la reacción r , BTU/Lb.

dN_c = Conversión del componente principal en la reacción r , Lb/hr.

La caída de presión dentro del lecho catalítico es pequeña, comparada con la presión total del sistema; por lo tanto, ésta se expresa como una relación lineal.

La relación utilizada por Peters y Timmerhaus (1968), está limitada por la velocidad, densidad y viscosidad del gas, además por el diámetro de la partícula catalítica, siendo ésta:

$$dP/dZ = \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \frac{G^2}{d_p g \rho_g} \left[\frac{150(1-\epsilon)\mu_g}{d_p G} + 1.75 \right] \quad (53)$$

donde:

- P = Presión del sistema, Lb/ft².
- G = Velocidad másica del gas superficial, Lb/hr-ft².
- ρ_g = Densidad del gas, Lb/ft³.
- ϵ = Fracción de volumen vacío del lecho, ft³ vacío/ft³ de lecho empacado.
- d_p = Diámetro efectivo de la partícula de catalizador, o el diámetro de una esfera con la misma relación superficie a volumen de una partícula catalítica, ft.
- μ_g = Viscosidad absoluta, Lb/ft-hr.

Las condiciones iniciales para éste sistema de ecuaciones están identificadas por el sufijo "o". Así, N_1^o , P^o , H^o , se refieren al flujo molar, presión y entalpía a la entrada de cada lecho catalítico.

La conversión del CO está dividida igualmente entre los lechos, con la siguiente condición utilizada por Natta:

$$N^* = 0.25 n_{cb}^C N^* \quad (54)$$

donde:

N^* = Flujo de metanol de salida del lecho n , Lb/hr.

C = Conversión de CO dentro del convertidor, Lb salida/Lb entrada.

n_{cb} = Número del lecho catalítico; 1, 2, 3, o 4.

N^i = Flujo de entrada de CO al convertidor, Lb/hr.

Las relaciones del balance de masa, dadas en la ecuación (51) se resuelven numéricamente, sujetándose a las condiciones dadas en la ecuación (54), por el método de Runge-Kutta de cuarto orden. Los cambios en la presión y entalpía en un elemento de volumen del lecho del reactor se obtienen de las ecuaciones (52) y (53), después de que los cambios en el flujo molar de los componentes químicos en el elemento han sido determinados.

La temperatura de la corriente, se obtiene de la entalpía de la corriente por medio de la relación dada por Smith y Van Ness (1959a), limitándose a poder contar con datos de entalpía de acuerdo a las condiciones de operación, así como de un modelo para el cálculo de la desviación de la entalpía DH .

$$H = \sum_{i=1}^n 1.8N_i \left[a_i(T-T_R) + b_i(T^2 - T_R^2)/2 + c_i(T^3 - T_R^3)/3 + d_i(T^4 - T_R^4)/4 - DH \right] \quad (55)$$

donde:

N = Entalpia de la corriente gaseosa, BTU/hr.

N_i = Flujo molar del componente i , Lb/hr.

a_i = Primer coeficiente de la ecuación de capacidad calorífica molar.

b_i = Segundo coeficiente de la ecuación de C_p .

c_i = Tercer coeficiente de la ecuación de C_p .

d_i = Cuarto coeficiente de la ecuación de C_p .

T = Temperatura de la corriente de gas, $^{\circ}R$.

T_R = Temperatura de referencia, $^{\circ}R$.

DH = Desviación de la entalpia de gas ideal a las condiciones de la corriente, BTU/hr.

El valor de la temperatura de la corriente que produce el valor correcto de la entalpia, se localiza por medio de un método numérico iterativo.

Los calores de reacción de las ecuaciones (49) y (50), utilizados en el balance de energía de la ecuación (52), se obtiene de una subrutina desarrollada en la simulación.

Para resolver el balance de masa de la ecuación (51), se utilizan ecuaciones que describen las velocidades de reacción de las reacciones, metano-vapor y de conversión reversible agua-gas como una función de la temperatura, presión y -

composición del sistema.

Existen varias fórmulas que describen la velocidad de -- formación del metanol, que han sido desarrolladas: (Molstad-- y Dodge, 1935; Temkin y Pysheu, 1940; Natta, 1955; Uchida y-- Ogino, 1956; Vlasenko, et al, 1964; y Bakemeier, et al, 1970).

La ecuación utilizada para la determinación de la veloci-- dad de formación de metanol, es la de Natta:

$$R_1 = \frac{a_{CO} a_{H_2}^2 - a_{CH_3OH} / K_{p1}}{(A_1 + A_2 a_{CO} + A_3 a_{H_2} + A_4 a_{CH_3OH})^3} \quad (56)$$

donde:

- R_1 = Velocidad de formación del metanol, Lb/Lbcat-hr.
- a_i = Actividad del componente i en la mezcla de reacción.
- K_{p1} = Constante de equilibrio químico.
- A_i = Coeficientes de la ecuación de Natta, $i=1,2,3$ y 4.

Los coeficientes, A_i en la fórmula de Natta, están en -- función de la temperatura; Natta (1955), presenta datos de la dependencia de éstos coeficientes para diferentes catalizado-- res de ZnO-CrO. Una relación para los valores de los coefi-- cientes, como una función de la temperatura del sistema, fue-- ron dados por Cappelli, et al (1972).

La fórmula general de la ecuación es:

$$\ln A_1 = B_{1_1} + B_{2_1} / R_g T \quad (57)$$

donde:

B_1, B_2 = Constantes.

T = Temperatura del sistema, °K.

R_g = Constante de los gases, cal/g °K.

Las constantes B_{1_1} y B_{2_1} se calculan de los datos dados por Natta, aplicando el método de regresión lineal.

La tabla 5 da los valores de los coeficientes de la fórmula de Natta a diferentes temperaturas y los valores de las constantes de la ecuación (57).

La actividad de cada componente en la mezcla de reacción, está dada por la siguiente expresión general.

$$a_i = \gamma_i \phi_i X_i P \quad (58)$$

donde:

a_i = Actividad del componente i en la fase gas.

γ_i = Coeficiente de actividad del componente i.

ϕ_i = Coeficiente de fugacidad del componente i.

X_i = Fracción mol del componente i en la fase gas.

P = Presión total del sistema.

TABLA 5

VALORES DE LOS COEFICIENTES DE LA ECUACION DE NATTA
A DIFERENTES TEMPERATURAS

	A_1	A_2	A_3	A_4
Temperatura en función de los coeficientes.				
300	78.0	3.9	0.76	27.8
310	69.0	3.3	0.76	22.4
320	65.0	3.0	0.59	18.5
330	62.0	2.7	0.55	15.9
Regresión de las constantes.				
B_1	-0.1908	-5.849	-6.991	-7.836
B_2	5152	8237	7542	12677
Determinación del coeficiente.				
R^2	0.954	0.086	0.988	0.991

Siguiendo con Natta, y suponiendo mezclas ideales; por lo tanto, el coeficiente de actividad de cada componente en la fase gas es 1.

Los coeficientes de fugacidad de cada componente en la fase gas, se obtienen de una expresión derivada de la ecuación de estado de Redlich-Kwong (1949) limitandose a gases, normalmente hidrocarburos debilmente polares y no polares.

La ecuación utilizada, es de la forma:

$$Z_g = \frac{1}{1-h} - \frac{Ar}{Br} \frac{h}{1+h} \quad (59)$$

$$h = BrP/Z_g \quad (60)$$

$$Ar_i = \frac{0.4278}{P_{cT_r}^{2.5}} \quad (61)$$

$$Br_i = \frac{0.0867}{P_{cT_r}} \quad (62)$$

$$Ar = X_i Ar_i \quad (63)$$

$$Br = X_i Br_i \quad (64)$$

donde:

- Z_g = Factor de compresibilidad del gas.
 T_r = Temperatura reducida del componente i, °K/°K
 P_c = Presión crítica del componente i, atm.
 A_{r_i}, B_{r_i} = Constantes del componente i.
 A_r, B_r = Constantes de la ecuación de Redlich-Kwong.

El factor de compresibilidad del gas se calcula de las ecuaciones (59) a (64), utilizando una técnica de iteración numérica lineal (Conte; 1965a).

Cuando el factor de compresibilidad se conoce, el coeficiente de fugacidad de cada componente en la fase gas se calcula de la siguiente expresión:

$$\ln \phi_i = \frac{B_{r_i}}{B_r} (Z_g - 1) - \ln(Z_g - B_r P) - \frac{A_r^2}{B_r} \left[\frac{2A_{r_i}}{A_r} - \frac{B_{r_i}}{B_r} \right] \ln \left[\frac{1+B_r P}{Z_g} \right] \quad (65)$$

donde:

- ϕ_i = Coeficiente de fugacidad del componente i en la fase gas.

La velocidad de reacción para la reacción de conversión-reversible aqua-gas reportada por Fulton y Fair (1974), es — la siguiente expresión:

$$R_2 = K_2 [a_{CO_2} a_{H_2} - a_{CO} a_{H_2O} / K_{p2}] \quad (66)$$

donde:

R_2 = Velocidad de formación del agua, Lb H_2O producida/
Lb cat-hr.

K_2 = Constante de velocidad de reacción para la reac —
ción de conversión reversible aqua-gas.

K_{p2} = Constante de equilibrio químico para la reacción.

La constante de velocidad de reacción se calcula utili—
zando la fórmula:

$$K_2 = F_2 \exp(-E_a / R_g T) \quad (67)$$

donde:

F_2 = Factor de frecuencia.

E_a = Energía de activación, cal/gr $^{\circ}K$.

R_g = Constante de los gases, cal/gr $^{\circ}K$.

T = Temperatura del sistema, $^{\circ}K$.

El procedimiento utilizado en el módulo del convertidor, para calcular el flujo de componentes, temperatura y presión a lo largo del lecho catalítico es el siguiente:

- 1.- Calcular los coeficientes de fugacidad para cada -- componente en la mezcla de reacción.
- 2.- Calcular las constantes de equilibrio químico para las reacciones.
- 3.- Calcular las velocidades de reacción para las reacciones.
- 4.- Calcular el cambio en el flujo de los componentes -- para un elemento de longitud a lo largo del lecho -- catalítico del convertidor.
- 5.- Calcular el cambio de entalpia y temperatura para -- el elemento de longitud.
- 6.- Calcular el cambio de presión para el elemento de -- longitud.
- 7.- Probar que la conversión de CO es igual a la conver -- sión especificada. Si la conversión calculada no -- es igual a la conversión especificada para el lecho, repartir los pasos 1 al 6. Si las conversiones son iguales, es la terminación de los cálculos para el -- lecho catalítico.

- CONDENSADOR PARCIAL

El módulo del condensador parcial, del sistema SGP/ZAR, se desarrolló para simularlo en el caso donde se presentan corrientes que contengan componentes no condensables, debido a que la corriente principal de salida del fraccionador del proceso, contiene no condensables.

Las temperaturas, composiciones y flujos de las corrientes, permiten al módulo del fraccionador calcularlas para dar una fracción de condensado.

El módulo del condensador parcial, procesa información que está contenida en la corriente de entrada, conjunto de equipos y la información que es pasada a éste, del modelo del fraccionador.

El módulo del condensador parcial, calcula:

- 1.- El flujo y la temperatura de la corriente de proceso que sale del condensador.
- 2.- La cantidad de calor removido de la corriente de proceso.

El flujo y la temperatura de la corriente que sale del condensador se obtienen de las relaciones del balance de masa y energía para el condensador.

El balance total de masa para el condensador es:

$$F_v = F_p + F_r \quad (69)$$

donde:

F_v = Flujo molar de la corriente de vapor que entra al condensador, Lb/hr.

F_p = Flujo molar de la corriente de vapor que sale del condensador, Lb/hr.

F_r = Flujo molar de la corriente líquida de reflujo que sale del condensador, Lb/hr.

El valor de la relación de reflujo es:

$$DL = F_r / F_p \quad (69)$$

donde:

DL = Relación de reflujo .

En el sistema SGP/ZAR, el valor utilizado para el flujo del fraccionador es F_p . Para obtener el flujo del fraccionador, se utiliza la siguiente relación:

$$F_v = (1 + DL)F_p \quad (70)$$

Para calcular el flujo y la temperatura de la corriente de producto que sale del condensador, se utiliza un método -

iterativo.

En éste procedimiento, se estima un valor de la temperatura de equilibrio y se realiza el cálculo del condensador - parcial a la temperatura estimada.

Después de realizar el cálculo del condensador, se determina el flujo de la corriente de producto que se obtiene del cálculo del condensador. Si el flujo calculado es igual al flujo requerido, la temperatura correcta ha sido encontrada; si los flujos no son iguales, se estima un nuevo valor de la temperatura y se continúa con el mismo procedimiento.

Se utiliza una variable error,

$$SUM = F_r - F_{rc} \quad (71)$$

donde:

SUM = Desviación del reflujo calculado al reflujo requerido, Lb/hr.

F_{rc} = Reflujo a la temperatura de la corriente estimada, Lb/hr.

Que provee una medida de la desviación del flujo a la temperatura estimada del flujo requerido.

Nuevos valores de la temperatura estimada, se determinan por el método de la secante (Conte, 1965 c):

$$T^{(k+1)} = T^{(k)} - \text{SUM}^{(k)} \left[\frac{T^{(k)} - T^{(k-1)}}{\text{SUM}^{(k)} - \text{SUM}^{(k-1)}} \right] \quad (72)$$

donde:

K = Índice de iteración.

T = Temperatura, °R.

La búsqueda de la temperatura a las condiciones de flujo se ve limitada en un rango que está en el límite superior de la región del punto de rocío del sistema y en el límite inferior de la región del punto de burbuja del sistema.

Los límites de la región cambian con cada nuevo cálculo a una temperatura estimada, que reemplaza la propia temperatura límite. Los cambios de temperatura están limitados en un intervalo igual o menor al 10% de la región buscada. La temperatura estimada inicial en el sistema, es la temperatura en el punto de rocío; el segundo valor estimado es a una temperatura de 20°R abajo del punto de rocío.

Valores estimados sucesivos de temperatura se realizan,

utilizando la ecuación (72).

Cuando la temperatura que satisface las condiciones de flujo de las corrientes que salen del condensador es localizada; el calor total del condensador se calcula utilizando la siguiente ecuación:

$$Q_r = H_{in} - (H_{o1} - H_{o2}) \quad (73)$$

donde:

Q_r = Calor total del condensador parcial, BTU/hr.

H_{in} = Entalpia de la corriente de vapor de entrada al condensador, BTU/hr.

H_{o1} = Entalpia de la corriente de vapor que sale del condensador, BTU/hr.

H_{o2} = Entalpia de la corriente líquida que sale del condensador, BTU/hr.

Las entalpias de las corrientes que salen del condensador se calculan en el módulo adiabático, y se pasan al módulo del condensador parcial. La entalpia real de la corriente de entrada al condensador, se obtiene de la entalpia que se da en el vector de corriente aplicando la siguiente relación:

$$H_{in} = (1 + DL)H'_{in} \quad (74)$$

donde:

H'_{in} = Entalpia de la corriente de entrada que se da en la matriz de corriente, BTU/hr.

El área de intercambio que se requiere para encontrar el calor total del condensador, se da en las siguientes ecuaciones:

$$T_1 = T_i - T'_o \quad (75)$$

$$T_2 = T_o - T'_i \quad (76)$$

$$\Delta T_{lm} = (T_1 - T_2) / \ln(T_1/T_2) \quad (77)$$

$$A_{HE} = Q_r / U_{HE} \Delta T_{lm} \quad (78)$$

donde:

- T_1 = Temperatura de entrada a la corriente de proceso, $^{\circ}\text{R}$.
- T_0 = Temperatura de salida de la corriente de proceso, $^{\circ}\text{R}$.
- T'_i = Temperatura de entrada del agua de enfriamiento, $^{\circ}\text{R}$.
- T'_0 = Temperatura de salida del agua de enfriamiento, $^{\circ}\text{R}$.
- A_{HE} = Area de intercambio de calor, ft^2
- U_{HE} = Coeficiente global de intercambio de calor, --
BTU/hr ft^2 $^{\circ}\text{R}$.
- ΔT_{lm} = Gradiente de temperatura media logarítmica, $^{\circ}\text{R}$.

- CONTROLADOR DE APAGADO

El enfriamiento de la mezcla de reacción en el convertidor, se lleva a cabo inyectando gas de síntesis frío dentro del mismo, en las secciones que preceden a los lechos catalíticos.

En la simulación del proceso, el módulo de control de - apagado distribuye la cantidad de gas de apagado que se envía a cada punto de inyección.

Este módulo opera como una subrutina; esto es, supervisa la secuencia de cálculo para cada equipo que se ve afectado por los cambios en las cantidades de materia de las corrientes de apagado.

Las temperaturas de cada corriente que entran al lecho catalítico, también se calculan en este módulo. Si la temperatura está dentro del rango de diseño de la temperatura que se especifica para la corriente, el controlador procede con la secuencia de cálculo del equipo.

Si la temperatura de la corriente excede el rango permitido, la cantidad de gas de apagado que se inyecta en ese punto, se ajusta hasta que se alcanza la temperatura especificada; entonces, el controlador continúa con la secuencia de cálculo.

La medida de la desviación entre la temperatura calculada para la corriente y la temperatura especificada, en la sección de conversión que precede al lecho catalítico es:

$$SUM = T_{SP} - T \quad (79)$$

donde:

SUM = Desviación entre la temperatura calculada para la corriente y la temperatura especificada, °R.

T_{SP} = Temperatura especificada para la corriente, °R.

T = Temperatura calculada para la corriente, °R.

Los cálculos de la fracción de gas de apagado que es --
removido de la corriente de gas de síntesis frío, se determi--
na por el método de la secante:

$$Q_P(k+1) = Q_F(k) - \text{SUM}(k) \left[\frac{Q_F(k) - Q_F(k-1)}{\text{SUM}(k) - \text{SUM}(k-1)} \right] \quad (80)$$

donde:

k = Índice de interacción.

Q = Fracción de apagado.

El valor de la fracción de apagado que es la que produ-
ce la temperatura especificada para la corriente en el con--
vertidor, se encuentra en una región de los límites de la --
fracción de apagado.

Los límites de esta región, se cambian en cada prueba, --
a una fracción de apagado estimada, el valor estimado de la --
fracción de apagado, reemplaza al valor limitante anterior. --
Los cambios en los valores estimados de las fracciones de --
apagado se reducen a un intervalo igual o menor del 10% de --
la región buscada.

El valor estimado inicial de la fracción de apagado, se
especifica en el vector de corriente del divisor de gas de --

síntesis.

El segundo valor estimado es:

$$Q_F^{(2)} = Q_F^{(1)} \pm 0.01 \quad (81)$$

El signo del segundo término del lado derecho de la expresión, depende de la operación para el mejoramiento de la temperatura del convertidor. Valores estimados sucesivos de la fracción de apagado se encuentran utilizando la ecuación (80).

- CALOR DE REACCION

El calor de reacción a la temperatura y presión de reacción del sistema, y la constante de equilibrio químico se calculan en un módulo desarrollado para la simulación del proceso.

Este módulo suministra el dato de calor de reacción para el convertidor y para los módulos del reformador.

Los valores del cambio en la entalpia que acompañan a la reacción, y la constante de equilibrio químico asociada con la misma, se obtienen de las ecuaciones basadas en las

propiedades termodinámicas de los componentes del sistema -- reaccionante y de la temperatura del mismo.

Un desarrollo de estas ecuaciones está dado por Hougan, et al (1966 a). Las expresiones dadas para el cambio de -- energía libre, de la cual se obtiene la constante de equilibrio químico y el cambio de entalpia para una reacción son:

$$\Delta H^{\circ}_T = I_H + \Delta aT + \Delta bT^2/2 + \Delta cT^3/3 + \Delta dT^4/4 \quad (82)$$

$$\Delta G^{\circ}_T = T_H + (I_G - \Delta a \ln T) + \Delta bT^2/2 + \Delta cT^3/6 + \Delta dT^4/12 \quad (83)$$

$$\Delta a = \sum_{i=1}^n q_i m_i a_i \quad (84)$$

$$\Delta b = \sum_{i=1}^n q_i m_i a_i \quad (85)$$

$$\Delta c = \sum_{i=1}^n q_i m_i a_i \quad (86)$$

$$\Delta d = \sum_{i=1}^n q_i m_i a_i \quad (87)$$

donde:

H_T^O = Cambio de entalpía a la temperatura de reacción, cal/gr.

G_T^O = Cambio de energía libre a la temperatura de --
reacción, cal/gr.

T = Temperatura de reacción, °K.

a_i = Primer coeficiente de la ecuación de capacidad -
calorífica molar.

b_i = Segundo coeficiente de la ecuación de capacidad-
calorífica molar.

c_i = Tercer coeficiente de la ecuación de capacidad -
calorífica molar.

d_i = Cuarto coeficiente de la ecuación de capacidad -
calorífica molar.

m_i = Coeficiente estequiométrico del componente i .

q_i = 1, si el componente i es un producto de la --
reacción.

q_i = -1, si es un reactivo.

n = Número total de componentes en la mezcla de --
reacción.

I_H = Constante.

I_G = Constante.

Las constantes a_i , b_i , c_i y d_i para cada uno de los com
ponentes que participan en las reacciones, en la simulación-
del proceso, se enlistan en la tabla 6 .

TABLA 6

COEFICIENTES DE LA ECUACION DE CAPACIDAD CALORIFICA MOLAR

Componente	a	$b \times 10^2$	$c \times 10^6$	$d \times 10^9$
Metano	4.750	1.200	0.3030	-2.630
Hidrógeno	6.952	-0.0547	0.0956	-0.291
Agua	7.700	0.0459	0.2521	-0.858
Monóxido de Carbono	6.726	0.0400	0.1283	-0.531
Dióxido de Carbono	5.316	1.4285	-0.8362	1.784
Metanol	4.550	2.186	-0.2910	-1.920

Las constantes I_H y I_G de las ecuaciones (82) y (83), - utilizan valores conocidos de entalpia y cambios en la energía libre a cualquier temperatura.

La entalpia y los cambios en la energía libre a 25°C, - se calculan de los valores conocidos de calor estandar de -- formación de los componentes del sistema. Estos valores, -- que se enlistan en la tabla .7., se utilizan para evaluar -- los términos constantes.

El calor estandar y la energía libre de reacción están- dados por las siguientes ecuaciones:

$$\Delta H^{\circ} = \sum_{i=1}^n q_i m_i \Delta H^{\circ}_{f_i} \quad (88)$$

$$\Delta G^{\circ} = \sum_{i=1}^n q_i m_i \Delta G^{\circ}_{f_i} \quad (89)$$

donde:

ΔH° = Cambio de entalpia a 25°C, cal/gr.

ΔG° = Cambio de energía libre a 25°C, cal/gr.

$\Delta H^{\circ}_{f_i}$ = Entalpia de formación del componente i a 25°C, cal/gr.

$\Delta G^{\circ}_{f_i}$ = Energía libre de formación del componente i a 25°C, cal/gr.

TABLA 7

DATOS TERMODINAMICOS A 298.15 °K

Componente	ΔH° Kcal/gr	ΔG° Kcal/gr
Metano	-17.889	-12.140
Hidrógeno	0.0	0.0
Agua	-57.7979	-57.6357
Monóxido de Carbono	-26.4157	-32.8079
Dióxido de Carbono	-94.0518	-94.2598
Metanol	-48.08	-38.69

La constante de equilibrio químico se obtiene de la siguiente expresión:

$$\ln K_a = \Delta G^{\circ}_T / R_g T \quad (90)$$

donde:

K_a = Constante de equilibrio químico.

R_g = Constante de los gases, cal/gr $^{\circ}$ K.

Thomas y Portalski (1958), dan una serie de ecuaciones que incluyen el efecto de la presión en el calor de reacción.

Utilizando la ecuación de estado de Berthelot:

$$PV = R_g T \left[1 + \left(\frac{PT_c}{128P_c T} \right) \left(1 - \frac{6T_c^2}{T^2} \right) \right] \quad (91)$$

Y con el desarrollo de las ecuaciones, se obtiene:

$$\Delta H_{T,P} = H^{\circ}_T + H_{P1} P + H_{P2} P/T^2 \quad (92)$$

$$H_{P1} = 9R_g/128 \sum_{i=1}^n q_i m_i T_c i / P_c i \quad (93)$$

$$H_{P2} = 162R_g/128 \sum_{i=1}^n q_i m_i T_c^3 i / P_c i \quad (94)$$

donde:

$\Delta H_{T,P}$ = Cambio de entalpia a la temperatura y presión -
de reacción, cal/gr.

T = Temperatura de reacción, °K.

P = Presión de reacción, atm.

T_{C_i} = Temperatura crítica del componente i en la mezcla
de reacción, °K.

P_{C_i} = Presión crítica del componente i en la mezcla -
de reacción, atm.

R_g = Constante de los gases, cal/gr °K.

La entalpia que se obtiene, se convierte al sistema ingles de unidades, que es utilizado en el sistema SGP/ZAR, -- con la siguiente ecuación:

$$\Delta H'_{T,P} = 1.8 H_{T,P} \quad (95)$$

donde:

$\Delta H'_{T,P}$ = Cambio de entalpia a la temperatura y presión-
de reacción, BTU/Lb.

DATOS DE DISEÑO PARA LA SIMULACION

A continuación, se da una breve descripción de la documentación de los datos utilizados en la simulación del proceso de metanol. Esta documentación, está arreglada de acuerdo a la información requerida por SGP/ZAR:

Las corrientes de alimentación del proceso; dos corrientes de recirculación, y dos corrientes de intercambio de calor se especifican en los vectores de corriente.

Las corrientes de alimentación del proceso son tres. La corriente de alimentación principal es la de gas natural, las otras corrientes de alimentación, que contienen vapor y monóxido de carbono respectivamente, están en función de la corriente de alimentación principal.

La composición del gas natural, está dada por los valores promedio del análisis del gas natural utilizado en la planta de metanol.

La composición, en % en volumen, es: metano, 87.15%; nitrógeno, 1.50%; dióxido de carbono, 0.15%; etano, 9.00%; propano, 2.00%; n-butano, 0.08%; i-butano, 0.12%.

Las corrientes de recirculación, corrientes 43 y 66 de-

la figura 8, se especifican para una rápida convergencia de estas corrientes. Los valores de estos parámetros de corriente se obtienen en la simulación.

Las otras dos corrientes que entran a las unidades que intercambian calor entre las dos corrientes que pasan en el proceso, también se especifican. Si ésta corriente no se especifica para el intercambiador de calor del efluente de la corriente de alimentación del convertidor de metanol, la corriente de alimentación al convertidor, no está a la misma temperatura de reacción. Si ésta temperatura no es alcanzada, los cálculos del reactor se deben repetir.

Esto no es necesario que se especifique la segunda corriente que entra al fraccionador para calentar la corriente de alimentación; sin embargo ésta especificación promueve la convergencia de los cálculos de las recirculaciones.

La lista de los módulos del equipo utilizado en el modelo del proceso de metanol, se dan en la tabla 4; y el arreglo de estos modelos en el proceso, el diagrama de simulación del proceso, se expone en la figura 8. La información requerida por cada módulo perteneciente a las condiciones de operación, los parámetros de diseño y los modos opcionales de operación de cada equipo, están representados por el módulo.

La mezcla de corrientes, las unidades flash y el absorb--bedor utilizado en el proceso no requieren exploración en sus condiciones de operación en los vectores de los equipos, por lo que se omite su discusión.

Existen dos válvulas reductoras de presión en el modelo--del proceso. La primera, reduce la presión de la corriente -de alimentación de gas natural, entrando al proceso a la pre--sión de operación especificada para el reformador.

La segunda válvula, baja la presión del metanol crudo en la sección de purificación del proceso. La presión de la co--rriente de proceso se reduce a la caída de presión de sínte--sis a la presión de operación del fraccionador.

En el proceso, se utilizan tres divisores de corrientes. El primero, es el divisor de corrientes de apagado, las frac--ciones de apagado utilizadas por este divisor, se incluyen en el **controlador** de apagado; El segundo divisor en el proceso, es el divisor de purga; y el tercero, es un divisor de purga--para la corriente de recirculación en la sección de purifica--ción del proceso.

El módulo del compresor, se utiliza para representar al--compresor de gas de síntesis y al de recirculación en el pro--

ceso. Ambos compresores sirven para elevar la presión de la corriente del proceso a la presión de operación especificada en la sección de síntesis.

El controlador de apagado, regula la temperatura de entrada a cada lecho catalítico en el convertidor de metanol. Esta temperatura se especifica en el vector del parámetro de equipo del controlador.

En el modelado de proceso de metanol, se utilizan once, intercambiadores de calor. Los parámetros que se especifican en estas unidades son, los coeficientes globales de intercambio de calor y la temperatura de salida de la corriente de proceso de cada intercambiador.

Los valores de estos parámetros para cada intercambiador de calor, se enlistan en la tabla 8.

El módulo del reformador de metano, requiere que se especifiquen cuatro de seis de las variables de operación asociadas con la simulación del mismo. Las otras dos variables se calculan en el módulo del reformador. En éste estudio, cuatro de las variables, son variables de proceso independientes.

La información de diseño que debe ser transmitida al mó

T A B L A 8

ESPECIFICACIONES DE DISEÑO DE LOS INTERCAMBIADORES DE CALOR

EQUIPO NUMERO	FUNCION DEL EQUIPO	FLUIDO CALIENTE	FLUIDO FRIO	$\frac{U}{ft^2-hr-^{\circ}F}$ BTU
6	REHERVIDOR	GAS	AGUA	15
7	CALENTADOR	GAS	AGUA	15
8	SOBRECALENTADOR	GAS	VAPOR	10
12	CONDENSADOR	GAS	AGUA	150
19	INTERCAMBIADOR	GAS	GAS	10
30	CONDENSADOR	GAS	AGUA	150
38	INTERCAMBIADOR	AGUA	GAS	10
40	REHERVIDOR	VAPOR	LIQUIDO ORG.	200
42	ENFRIADOR	AGUA	AGUA	250
45	CONDENSADOR PARCIAL	GAS	AGUA	150
45	CONDENSADOR	GAS	AGUA	150

dulo del convertidor es; la conversión total de CO en el convertidor y las especificaciones del catalizador.

Las especificaciones del catalizador, se dan en la tabla 9.

La fracción vacía del catalizador, se obtiene de los datos de la tabla, utilizando la siguiente relación:

$$\varepsilon = 1 - \rho_{PC} / \rho_{CG} \quad (96)$$

donde:

ε = Fracción vacía.

ρ_{CG} = Densidad del gránulo catalítico, Kg/m³

ρ_{PC} = Densidad del catalizador empacado, KG/m³

El diámetro efectivo del catalizador, es el diámetro de una esfera con la misma relación superficie a volumen de una partícula catalítica.

La relación superficie a volumen para una esfera es:

$$R_S = 3/r \quad (97)$$

donde:

R_S = Relación superficie a volumen de una esfera.

r = Radio de la esfera, mm

La relación de superficie a volumen para un cilindro es:

T A B L A 9

ESPECIFICACIONES DEL CATALIZADOR DEL CONVERTIDOR

PARAMETRO	VALOR
DIAMETRO DEL GRANULO CATALITICO (CILINDROS PEQUEÑOS), mm	5.5
LONGITUD DE LOS GRANULOS CATALITICOS, mm	16.0
DENSIDAD DEL CATALIZADOR EMPACADO, Kg/m ³	830.0
DENSIDAD QUIMICA DEL CATALIZA- DOR, Kg/m ³	5400.0
DENSIDAD DEL GRANULO CATALITI- CO, Kg/m ³	1700.0
FRACCION VACIA DENTRO DE UN --- GRANULO POROSO	0.68

$$R_C = (2d + 4 l)/d1 \quad (98)$$

donde:

R_C = Relación superficie a volumen de un cilindro.

d = Diámetro del cilindro, mm.

l = Longitud del cilindro, mm.

En la biblioteca del sistema SGP/ZAR, el metanol no es un componente estandar, por lo que sus propiedades tienen que ser especificadas. Estas, propiedades del metanol, se enlistan en la tabla 10.

Los parámetros a , b , c y d de la tabla, son las constantes de la ecuación de capacidad calorífica molar, de acuerdo a la siguiente expresión:

$$C_p^0 = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad (99)$$

donde:

C_p^0 = Capacidad calorífica molar de un componente gaseoso.

T = Temperatura del sistema, °K.

El parámetro de solubilidad, se obtiene del calor de vaporización y volumen molar del metanol a 25°C, utilizando la relación de Chao y Seader (1961):

T A B L A 10
PROPIEDADES TERMODINAMICAS DEL METANOL

PARAMETRO	VALOR
PRESION CRITICA	79.9 atm
TEMPERATURA CRITICA	240.0 °C
DENSIDAD CRITICA	0.272 gr/cm ³
PESO MOLECULAR	32.04 fr/gmol
CALOR DE VAPORIZACION A 25 °C	8.94 kcal/gr
DENSIDAD A 25 °C	0.7866 gr/cm ³
PARAMETRO DE SOLUBILIDAD	4.53 (cal/cm ³) ^{1/2}
FACTOR ACENTRICO	0.556
COEFICIENTE A	4.55
COEFICIENTE B	1.214x10 ⁻²
COEFICIENTE C	8.98x10 ⁻⁷
COEFICIENTE D	3.30x10 ⁻¹⁰

$$S = \frac{(\Delta H_v - R_g T)^{1/2}}{\bar{V}} \quad (100)$$

donde:

S = Parámetro de solubilidad (cal/cm³)^{1/2}

ΔH_v = Calor de vaporización a 25°C, cal/gr.

R_g = Constante de los gases, cal/gr °K.

\bar{V} = Volumen molar a 25°C, cm³/gr.

A continuación se presentan los resultados obtenidos, - de llevar a cabo la simulación del proceso de la planta de - metanol I.

En la tabla 11, se enlistan los resultados finales del- resumen de corrientes, de acuerdo al diagrama de información para la simulación del proceso, de la tabla 8.

En la tabla 12, se enlistan los resultados finales, del resumen de equipos-detalles individuales, de acuerdo a los - módulos del equipo utilizado en la simulación del proceso, - de la tabla 4.

*** SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS ***

PROYECTO : SIMULACION DE LA PLANTA DE METANOL I
 ELABORADO : GUSTAVO NUÑO AMADOR
 FECHA : 6/7/56

RESULTADOS FINALES

*** SIMULACION DE LA PLANTA DE METANOL I ***

RESUMEN DE CORRIENTES

NO. DE CORRIENTE	1	2	3
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 0 AL 3	DEL 0 AL 4	DEL 0 AL 4
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, K	1000.0000	929.3337	1000.0000
PRESION, PSIA	732.0000	530.0000	500.0000
ENTALPIA, MBTU	17372.5400	33351.3430	11245.9100

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	0.0	0.0	0.0
CO	0.0	0.0	0.0
HIDROGENO	0.0	0.0	0.0
METANO	2130.5513	0.0	0.0
AGUA	0.0	5609.6239	0.0
CO2	13.2453	0.0	1350.9534
NITROGENO	72.2351	0.0	0.0
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	2230.7832	5609.6239	1350.9534

NO. DE CORRIENTE	4	5	6
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 3 AL 4	DEL 4 AL 5	DEL 5 AL 6
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, K	929.7761	955.1134	2225.0000
PRESION, PSIA	530.0000	530.0000	499.0000
ENTALPIA, MBTU	17372.5400	57371.2300	235746.7000

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	0.0	0.0	0.0
CO	0.0	0.0	3203.1621
HIDROGENO	0.0	0.0	5678.8164
METANO	2130.5513	2130.5513	196.5561
AGUA	0.0	5609.6239	3913.7059
CO2	13.2453	1350.9534	1050.7375
NITROGENO	72.2351	72.2351	72.2351
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	2230.7832	9241.3653	13209.0937

NO. DE CORRIENTE	7	8	9
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 6 AL 7	DEL 7 AL 12	DEL 12 AL 13
FRACCION VAPOR	1.0000	0.7103	0.6787
TEMPERATURA, R	1001.9339	684.1135	580.0034
PRESSION, PSIA	439.9333	484.0095	478.9998
ENTALPIA, MBTU	97023.9400	5349.3440	-17720.5600

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	0.0	0.0	0.0
CO	2293.1621	2293.1621	2293.1621
HIDROGENO	5673.8164	5673.8164	5673.8164
METANO	196.5561	196.5561	196.5561
AGUA	3916.7959	3916.7959	3916.7959
CO2	1050.4378	1050.4378	1050.4378
NITROGENO	72.9850	72.9850	72.9850
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	13209.0937	13209.0937	13209.0937

NO. DE CORRIENTE	10	11	12
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 13 AL 14	DEL 14 AL 15	DEL 15 AL 17
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, R	533.9334	530.0034	575.8154
PRESSION, PSIA	473.9333	2500.0000	2500.0000
ENTALPIA, MBTU	35733.7900	35327.0100	214112.3000

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	0.0	0.0	132.2044
CO	2217.7180	2217.7180	11931.7344
HIDROGENO	5596.5102	5596.5102	34536.5117
METANO	131.7745	131.7745	2775.9295
AGUA	41.2025	41.2025	49.8454
CO2	359.3334	359.3334	3886.5642
NITROGENO	71.1333	71.1333	1460.5231
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	8965.2539	8965.2539	54893.3242

NO. DE CORRIENTE	13	14	23
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 15 AL 13	DEL 13 AL 19	DEL 13 AL 21
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, F	575.3154	575.3154	575.3154
PRESION, PSIA	2500.0000	2500.0000	2500.0000
ENTALPIA, METU	214112.5000	117761.3000	29975.7100

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	132.2044	72.7124	13.5086
CC	11031.7544	5589.9531	1677.4426
HIDROGENO	34558.5117	19022.5731	4342.1094
METANO	2773.9722	1537.7610	391.4200
AGUA	46.3454	7.4158	0.9784
CO2	3334.1342	2137.6104	547.1139
HIDROGENO	1467.5231	303.2903	204.4739
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	54073.5242	30191.3231	7685.0625

NO. DE CORRIENTE	24	25	30
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 13 AL 23	DEL 13 AL 25	DEL 19 AL 20
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, F	575.3154	575.3154	1030.0000
PRESION, PSIA	2500.0000	2500.0000	2405.0000
ENTALPIA, METU	34257.9700	32115.5300	222372.1000

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	21.1527	19.3307	72.7124
CC	1217.0776	1707.3593	6548.9531
HIDROGENO	5933.3594	5137.6727	19022.5731
METANO	447.3433	419.3352	1537.7610
AGUA	7.4158	7.4158	27.4158
CO2	621.3512	512.9344	2137.6104
HIDROGENO	253.8345	213.0772	303.2903
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	8732.9277	3233.9961	30191.3231

NO. DE CORRIENTE	31	32	33
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 20 AL 21	DEL 21 AL 22	DEL 22 AL 23
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, F	1159.3230	1025.8129	1122.2491
PRESION, PSIA	2432.3257	2494.3257	2494.3257
ENTALPIA, MBTU	240620.0000	270595.6000	291550.7000
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
METANOL	605.9641	624.4727	1153.5024
CO	6338.3504	7833.3008	7514.5586
HIPOGENO	17409.4100	25333.5182	21230.9880
METANO	123.7610	123.7610	1927.1908
AGUA	277.0764	234.0547	343.8437
CO2	1337.0437	2432.0676	2372.2786
NITROGENO	0.0	1007.7642	1007.7642
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	29124.3073	36309.8633	35751.8008

NO. DE CORRIENTE	34	35	36
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 23 AL 24	DEL 24 AL 25	DEL 25 AL 26
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, F	1020.4921	1100.3308	1020.4673
PRESION, PSIA	2432.3257	2494.3257	2494.3257
ENTALPIA, MBTU	325316.5000	346492.7000	378609.7000
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
METANOL	1174.5550	1696.1042	1715.9348
CO	8231.2323	3960.3047	10764.0625
HIPOGENO	26964.2333	23360.0944	31032.9576
METANO	2376.5396	2376.5396	2792.9287
AGUA	351.3133	403.4431	415.9199
CO2	2344.1232	2837.5046	3520.4390
NITROGENO	1241.4435	1241.4435	1480.5276
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	44534.7305	43491.8203	51725.8164

T A B L A 11 (CONT.)

VAL DE CORRIENTE	77	33	41
COMPRON DE EQUIPOS	DEL 26 AL 17	DEL 17 AL 31	DEL 30 AL 31
COMPRON VAFOR	1.375.344,2	1.131.131,1	573.000,0
COMPRON TURBOP	1.431.733,1	2.336.733,4	2.411.783,5
COMPRON PSJA	375.944,3	223.342,2	163.250,3
COMPRON PETU	30.000,0	0,0	0,0
COMPOSICION, LG-TOL/ANNA			
VALOR	2226.733,4	2226.733,4	2226.733,4
COMPRON	4.357.811,0	4.357.811,0	4.357.811,0
COMPRON	1.554,7	1.554,7	1.554,7
COMPRON	2.741,7	2.741,7	2.741,7
COMPRON	1.431.733,1	1.431.733,1	1.431.733,1
COMPRON	1.431.733,1	1.431.733,1	1.431.733,1
COMPRON	1.431.733,1	1.431.733,1	1.431.733,1
COMPRON	1.431.733,1	1.431.733,1	1.431.733,1
COMPRON	1.431.733,1	1.431.733,1	1.431.733,1
TOTAL	5.074.210,9	5.074.210,9	5.074.210,9

VAL DE CORRIENTE	41	42	43
COMPRON DE EQUIPOS	DEL 31 AL 12	DEL 32 AL 33	DEL 33 AL 15
COMPRON VAFOR	571.400,0	1.131,1	1.131,1
COMPRON TURBOP	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON PSJA	120.475,5	173.643,3	173.644,4
COMPRON PETU	30.000,0	0,0	0,0
COMPOSICION, LG-TOL/ANNA			
VALOR	333.333,3	333.333,3	331.000,6
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
COMPRON	2.336.733,4	2.336.733,4	2.336.733,4
TOTAL	4.535.433,5	4.531.733,5	4.517.033,5

NO. DE CORRIENTE	50	51	52
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 51 AL 34	DEL 34 AL 35	DEL 35 AL 36
FRACCION VAPOR	0.0	0.4819	0.0
TEMPERATURA, R	573.1024	539.3332	589.3382
PRESION, PSIA	2430.4035	50.0000	50.0000
ENTALPIA, MBTU	-14190.3200	-14190.4700	-22657.4900

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	2093.4023	2093.4023	1787.2485
CC	44.7326	44.7326	7.0419
HIDROGENO	724.2190	724.2190	4.6824
METANO	157.0571	157.0571	3.7134
AGUA	43.2070	454.2009	42.5706
CO2	41.2310	41.2310	21.2173
NITROGENO	57.3235	57.3235	0.7894
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	4343.7227	4343.7227	2253.2642

NO. DE CORRIENTE	53	60	61
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 36 AL 33	DEL 33 AL 39	DEL 39 AL 40
FRACCION VAPOR	0.0	0.0335	0.0
TEMPERATURA, R	621.5106	660.1036	742.7312
PRESION, PSIA	50.0000	50.0000	50.0000
ENTALPIA, MBTU	-33226.7500	-29330.7400	-13741.6200

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	2095.0691	2095.0331	10.4753
CC	6.5730	6.5335	0.0010
HIDROGENO	6.5263	6.5332	0.0007
METANO	5.4434	5.4447	0.0005
AGUA	123.3020	1233.1333	1231.9001
CO2	31.7235	31.7235	0.0032
NITROGENO	1.0561	1.0561	0.0001
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	3373.7661	3332.5364	1242.3306

NO. DE CORRIENTE	62	63	64
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 40 AL 38	DEL 38 AL 41	DEL 41 AL 42
FRACCION VAPOF	0.0	0.0	0.0
TEMPERATURA, K	742.7312	531.3738	585.0000
PRESION, PSIA	50.0000	50.0000	50.0000
ENTALPIA, MBTU	-13741.8270	-17193.7630	-18783.7600
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
METANOL	10.4753	10.4758	10.4758
CC	0.0010	0.0010	0.0010
HIDROGENO	0.0007	0.0007	0.0007
METANU	0.0005	0.0005	0.0005
AGUA	1231.8948	1231.8948	1231.8948
CO2	0.0032	0.0032	0.0032
NITROGENO	0.0001	0.0001	0.0001
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	1242.3306	1242.3757	1242.3757

NO. DE CORRIENTE	65	66	71
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 42 AL 43	DEL 43 AL 36	DEL 39 AL 45
FRACCION VAPOF	0.0	0.0	1.0000
TEMPERATURA, R	585.0000	610.9995	671.4937
PRESION, PSIA	50.0000	50.0000	50.0000
ENTALPIA, MBTU	-12239.4400	-10569.2700	9600.9590
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
METANOL	6.8023	307.8115	2084.5627
CC	0.0002	2.5570	0.5326
HIDROGENO	0.0004	1.3444	0.5326
METANU	0.0004	1.7237	5.4440
AGUA	307.7314	800.7314	1.2333
CC	0.0021	10.5207	31.7421
NITROGENO	0.0001	0.2666	1.0565
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	907.5442	1125.4419	2140.1533

NO. DE CORRIENTE	72	73	74
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 45 AL 45	DEL 44 AL 0	DEL 45 AL 46
FRACCION VAPOR	1.0000	0.0	0.0241
TEMPERATURA, K	670.5249	670.5249	530.0410
PRESION, PSIA	51.0000	50.0000	45.0000
ENTALPIA, MBTU	9595.5230	-11336.8700	-20225.0400

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	2049.8992	1433.0142	2049.8992
CC	15.8596	0.1511	15.8596
HIDROGENO	10.8604	0.0543	10.8604
METANO	3.9919	0.1044	3.9919
AGUA	0.7158	1.3445	0.7158
CC2	51.9360	1.0995	51.9360
NITROGENO	1.7500	0.0151	1.7500
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	2140.0129	1435.7930	2140.0129

NO. DE CORRIENTE	75	76	80
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 46 AL 0	DEL 45 AL 0	DEL 0 AL 5
FRACCION VAPOR	1.0000	0.0	1.0000
TEMPERATURA, K	530.0410	530.0410	560.0000
PRESION, PSIA	45.0000	45.0000	735.0000
ENTALPIA, MBTU	205.5334	-20420.7700	26507.4800

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	0.2753	2041.6252	0.0
CC	10.6706	5.7390	0.0
HIDROGENO	3.3622	1.0981	0.0
METANO	4.0368	4.0551	646.4192
AGUA	4.7111	0.7146	130.5385
CC2	13.7233	37.5577	5.3865
NITROGENO	1.1057	0.5363	5133.4270
OXIGENO	0.0	0.0	1357.4805
TOTAL	51.6865	2033.3262	7272.2812

NO. DE CORRIENTE	31	92	33
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 5 AL 8	DEL 3 AL 6	DEL 0 AL 0
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	0.0
TEMPERATURA, R	1504.3844	1001.9300	0.0
PRESION, PSIA	735.0000	730.0000	0.0
ENTALPIA, MBTU	32532.5110	46531.7600	0.0
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
METANOL	0.0	0.0	0.0
CO	0.0	0.0	0.0
HIDROGENO	0.0	0.0	0.0
METANO	0.0	0.0	0.0
AGUA	1427.3765	1427.3765	0.0
CO2	651.3089	651.3089	0.0
NITROGENO	5137.4570	5137.4570	0.0
OXIGENO	67.5421	67.5421	0.0
TOTAL	7272.2773	7272.2773	0.0

NO. DE CORRIENTE	35	36	90
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 6 AL 8	DEL 3 AL 0	DEL 32 AL 0
FRACCION VAPOR	1.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, R	294.8300	1299.8733	575.7024
PRESION, PSIA	600.0000	395.0000	2493.7935
ENTALPIA, MBTU	90749.6500	116741.5000	1340.5330
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
METANOL	0.0	0.0	1.3333
CO	0.0	0.0	99.5256
HIDROGENO	0.0	0.0	292.6009
METANO	0.0	0.0	26.3987
AGUA	11523.3516	11523.3516	7.0875
CO2	0.0	0.0	30.5618
NITROGENO	0.0	0.0	14.0270
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	11523.3516	11523.3516	463.5549

NO. DE CORRIENTE	92	93	94
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 13 AL 0	DEL 35 AL 43	DEL 43 AL 0
FRACCION VAPOR	0.0000	1.0000	1.0000
TEMPERATURA, R	537.0084	539.3332	557.5964
PRESION, PSIA	479.9983	50.0000	50.0000
ENTALPIA, MBTU	-53501.5500	9466.3950	6326.7250

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	0.0	306.1536	5.1511
CC	75.7439	440.6926	433.1560
HIDROGENO	32.2045	719.5364	717.6921
METANO	14.7317	153.3437	151.6153
AGUA	3372.5037	33.6300	323.6796
CC	19.3337	329.0620	382.2436
NITROGENO	1.3454	57.0333	56.7722
OXIGENO	0.0	0.0	0.0
TOTAL	4243.3477	2095.4578	1777.5601

NO. DE CORRIENTE	95
CONEXION DE EQUIPOS	DEL 14 AL 0
FRACCION VAPOR	0.0000
TEMPERATURA, R	535.0000
PRESION, PSIA	50.0000
ENTALPIA, MBTU	-6574.3150

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

METANOL	3.6665
CC	0.4003
HIDROGENO	0.4003
METANO	2.0015
AGUA	431.1551
CC	0.0000
NITROGENO	0.0
OXIGENO	0.0
TOTAL	434.3313

* * * SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS * * *

PROYECTO : SIMULACION DE LA PLANTA DE METALURGIA
 DEPARTAMENTO : INDUSTRIAL
 FECHA : 6/7/76

RESULTADOS GENERALES

* * * SIMULACION DE LA PLANTA DE METALURGIA * * *

RESUMEN DE EJECUCION - DETALLES INDIVIDUALES

*** DE/ISORES ***

NO. DE EQUIPO	13	32	42
NOMBRE EXTERNO	DV1	DV2	DV3
FRACCIONA NO.			
1	155.00	137.00	155.00
2	14.00	131.00	155.00
3	14.00	14.00	15.00
4	14.00	14.00	15.00
5	14.00	14.00	15.00
6	14.00	14.00	15.00

*** FACCIONABLE ***

NO. DE EQUIPO	59
NOMBRE EXTERNO	D-1
COMPONENTES PRINCIPALES	
1	3.0000
2	3.0000
3	3.0000
4	3.0000
5	3.0000
6	3.0000
7	3.0000
8	3.0000
9	3.0000
10	3.0000
11	3.0000
12	3.0000
13	3.0000
14	3.0000
15	3.0000
16	3.0000
17	3.0000
18	3.0000
19	3.0000
20	3.0000
21	3.0000
22	3.0000
23	3.0000
24	3.0000
25	3.0000
26	3.0000
27	3.0000
28	3.0000
29	3.0000
30	3.0000
31	3.0000
32	3.0000
33	3.0000
34	3.0000
35	3.0000
36	3.0000
37	3.0000
38	3.0000
39	3.0000
40	3.0000
41	3.0000
42	3.0000
43	3.0000
44	3.0000
45	3.0000
46	3.0000
47	3.0000
48	3.0000
49	3.0000
50	3.0000
51	3.0000
52	3.0000
53	3.0000
54	3.0000
55	3.0000
56	3.0000
57	3.0000
58	3.0000
59	3.0000
60	3.0000
61	3.0000
62	3.0000
63	3.0000
64	3.0000
65	3.0000
66	3.0000
67	3.0000
68	3.0000
69	3.0000
70	3.0000
71	3.0000
72	3.0000
73	3.0000
74	3.0000
75	3.0000
76	3.0000
77	3.0000
78	3.0000
79	3.0000
80	3.0000
81	3.0000
82	3.0000
83	3.0000
84	3.0000
85	3.0000
86	3.0000
87	3.0000
88	3.0000
89	3.0000
90	3.0000
91	3.0000
92	3.0000
93	3.0000
94	3.0000
95	3.0000
96	3.0000
97	3.0000
98	3.0000
99	3.0000
100	3.0000
101	3.0000
102	3.0000
103	3.0000
104	3.0000
105	3.0000
106	3.0000
107	3.0000
108	3.0000
109	3.0000
110	3.0000
111	3.0000
112	3.0000
113	3.0000
114	3.0000
115	3.0000
116	3.0000
117	3.0000
118	3.0000
119	3.0000
120	3.0000
121	3.0000
122	3.0000
123	3.0000
124	3.0000
125	3.0000
126	3.0000
127	3.0000
128	3.0000
129	3.0000
130	3.0000
131	3.0000
132	3.0000
133	3.0000
134	3.0000
135	3.0000
136	3.0000
137	3.0000
138	3.0000
139	3.0000
140	3.0000
141	3.0000
142	3.0000
143	3.0000
144	3.0000
145	3.0000
146	3.0000
147	3.0000
148	3.0000
149	3.0000
150	3.0000
151	3.0000
152	3.0000
153	3.0000
154	3.0000
155	3.0000
156	3.0000
157	3.0000
158	3.0000
159	3.0000
160	3.0000
161	3.0000
162	3.0000
163	3.0000
164	3.0000
165	3.0000
166	3.0000
167	3.0000
168	3.0000
169	3.0000
170	3.0000
171	3.0000
172	3.0000
173	3.0000
174	3.0000
175	3.0000
176	3.0000
177	3.0000
178	3.0000
179	3.0000
180	3.0000
181	3.0000
182	3.0000
183	3.0000
184	3.0000
185	3.0000
186	3.0000
187	3.0000
188	3.0000
189	3.0000
190	3.0000
191	3.0000
192	3.0000
193	3.0000
194	3.0000
195	3.0000
196	3.0000
197	3.0000
198	3.0000
199	3.0000
200	3.0000
201	3.0000
202	3.0000
203	3.0000
204	3.0000
205	3.0000
206	3.0000
207	3.0000
208	3.0000
209	3.0000
210	3.0000
211	3.0000
212	3.0000
213	3.0000
214	3.0000
215	3.0000
216	3.0000
217	3.0000
218	3.0000
219	3.0000
220	3.0000
221	3.0000
222	3.0000
223	3.0000
224	3.0000
225	3.0000
226	3.0000
227	3.0000
228	3.0000
229	3.0000
230	3.0000
231	3.0000
232	3.0000
233	3.0000
234	3.0000
235	3.0000
236	3.0000
237	3.0000
238	3.0000
239	3.0000
240	3.0000
241	3.0000
242	3.0000
243	3.0000
244	3.0000
245	3.0000
246	3.0000
247	3.0000
248	3.0000
249	3.0000
250	3.0000
251	3.0000
252	3.0000
253	3.0000
254	3.0000
255	3.0000
256	3.0000
257	3.0000
258	3.0000
259	3.0000
260	3.0000
261	3.0000
262	3.0000
263	3.0000
264	3.0000
265	3.0000
266	3.0000
267	3.0000
268	3.0000
269	3.0000
270	3.0000
271	3.0000
272	3.0000
273	3.0000
274	3.0000
275	3.0000
276	3.0000
277	3.0000
278	3.0000
279	3.0000
280	3.0000
281	3.0000
282	3.0000
283	3.0000
284	3.0000
285	3.0000
286	3.0000
287	3.0000
288	3.0000
289	3.0000
290	3.0000
291	3.0000
292	3.0000
293	3.0000
294	3.0000
295	3.0000
296	3.0000
297	3.0000
298	3.0000
299	3.0000
300	3.0000
301	3.0000
302	3.0000
303	3.0000
304	3.0000
305	3.0000
306	3.0000
307	3.0000
308	3.0000
309	3.0000
310	3.0000
311	3.0000
312	3.0000
313	3.0000
314	3.0000
315	3.0000
316	3.0000
317	3.0000
318	3.0000
319	3.0000
320	3.0000
321	3.0000
322	3.0000
323	3.0000
324	3.0000
325	3.0000
326	3.0000
327	3.0000
328	3.0000
329	3.0000
330	3.0000
331	3.0000
332	3.0000
333	3.0000
334	3.0000
335	3.0000
336	3.0000
337	3.0000
338	3.0000
339	3.0000
340	3.0000
341	3.0000
342	3.0000
343	3.0000
344	3.0000
345	3.0000
346	3.0000
347	3.0000
348	3.0000
349	3.0000
350	3.0000
351	3.0000
352	3.0000
353	3.0000
354	3.0000
355	3.0000
356	3.0000
357	3.0000
358	3.0000
359	3.0000
360	3.0000
361	3.0000
362	3.0000
363	3.0000
364	3.0000
365	3.0000
366	3.0000
367	3.0000
368	3.0000
369	3.0000
370	3.0000
371	3.0000
372	3.0000
373	3.0000
374	3.0000
375	3.0000
376	3.0000
377	3.0000
378	3.0000
379	3.0000
380	3.0000
381	3.0000
382	3.0000
383	3.0000
384	3.0000
385	3.0000
386	3.0000
387	3.0000
388	3.0000
389	3.0000
390	3.0000
391	3.0000
392	3.0000
393	3.0000
394	3.0000
395	3.0000
396	3.0000
397	3.0000
398	3.0000
399	3.0000
400	3.0000
401	3.0000
402	3.0000
403	3.0000
404	3.0000
405	3.0000
406	3.0000
407	3.0000
408	3.0000

T A B L A 12 (CONT.)

NÚM. DE EQUIPO	30	33	40
NOMBRE EXTERNO	H-7	H-3	H-9
1	150,0000	150,0000	200,0000
AREA	412,0000	350,2173	2043,5254
4. DE CORAZAS	1,0000	1,0000	1,0000
PASOS POR CORAZA	1,0000	1,0000	1,0000
PASOS POR TUBOS	1,0000	1,0000	1,0000
TUBO	50,0000	50,0000	50,0000
1. TUBO			
2. TUBO			
3. TUBO			
4. TUBO			
5. TUBO			
6. TUBO			
7. TUBO			
8. TUBO			
9. TUBO			
10. TUBO			
11. TUBO			
12. TUBO			
13. TUBO			
14. TUBO			
15. TUBO			
16. TUBO			
17. TUBO			
18. TUBO			
19. TUBO			
20. TUBO			
21. TUBO			
22. TUBO			
23. TUBO			
24. TUBO			
25. TUBO			
26. TUBO			
27. TUBO			
28. TUBO			
29. TUBO			
30. TUBO			
31. TUBO			
32. TUBO			
33. TUBO			
34. TUBO			
35. TUBO			
36. TUBO			
37. TUBO			
38. TUBO			
39. TUBO			
40. TUBO			
41. TUBO			
42. TUBO			
43. TUBO			
44. TUBO			
45. TUBO			
46. TUBO			
47. TUBO			
48. TUBO			
49. TUBO			
50. TUBO			
51. TUBO			
52. TUBO			
53. TUBO			
54. TUBO			
55. TUBO			
56. TUBO			
57. TUBO			
58. TUBO			
59. TUBO			
60. TUBO			
61. TUBO			
62. TUBO			
63. TUBO			
64. TUBO			
65. TUBO			
66. TUBO			
67. TUBO			
68. TUBO			
69. TUBO			
70. TUBO			
71. TUBO			
72. TUBO			
73. TUBO			
74. TUBO			
75. TUBO			
76. TUBO			
77. TUBO			
78. TUBO			
79. TUBO			
80. TUBO			
81. TUBO			
82. TUBO			
83. TUBO			
84. TUBO			
85. TUBO			
86. TUBO			
87. TUBO			
88. TUBO			
89. TUBO			
90. TUBO			
91. TUBO			
92. TUBO			
93. TUBO			
94. TUBO			
95. TUBO			
96. TUBO			
97. TUBO			
98. TUBO			
99. TUBO			
100. TUBO			
101. TUBO			
102. TUBO			
103. TUBO			
104. TUBO			
105. TUBO			
106. TUBO			
107. TUBO			
108. TUBO			
109. TUBO			
110. TUBO			
111. TUBO			
112. TUBO			
113. TUBO			
114. TUBO			
115. TUBO			
116. TUBO			
117. TUBO			
118. TUBO			
119. TUBO			
120. TUBO			
121. TUBO			
122. TUBO			
123. TUBO			
124. TUBO			
125. TUBO			
126. TUBO			
127. TUBO			
128. TUBO			
129. TUBO			
130. TUBO			
131. TUBO			
132. TUBO			
133. TUBO			
134. TUBO			
135. TUBO			
136. TUBO			
137. TUBO			
138. TUBO			
139. TUBO			
140. TUBO			
141. TUBO			
142. TUBO			
143. TUBO			
144. TUBO			
145. TUBO			
146. TUBO			
147. TUBO			
148. TUBO			
149. TUBO			
150. TUBO			
151. TUBO			
152. TUBO			
153. TUBO			
154. TUBO			
155. TUBO			
156. TUBO			
157. TUBO			
158. TUBO			
159. TUBO			
160. TUBO			
161. TUBO			
162. TUBO			
163. TUBO			
164. TUBO			
165. TUBO			
166. TUBO			
167. TUBO			
168. TUBO			
169. TUBO			
170. TUBO			
171. TUBO			
172. TUBO			
173. TUBO			
174. TUBO			
175. TUBO			
176. TUBO			
177. TUBO			
178. TUBO			
179. TUBO			
180. TUBO			
181. TUBO			
182. TUBO			
183. TUBO			
184. TUBO			
185. TUBO			
186. TUBO			
187. TUBO			
188. TUBO			
189. TUBO			
190. TUBO			
191. TUBO			
192. TUBO			
193. TUBO			
194. TUBO			
195. TUBO			
196. TUBO			
197. TUBO			
198. TUBO			
199. TUBO			
200. TUBO			

NÚM. DE EQUIPO	42	45
NOMBRE EXTERNO	H12	H12
1	250,0000	150,0000
AREA	139,5499	331,7849
4. DE CORAZAS	1,0000	1,0000
PASOS POR CORAZA	1,0000	1,0000
PASOS POR TUBOS	1,0000	1,0000
TUBO	40,0000	50,0000
1. TUBO		
2. TUBO		
3. TUBO		
4. TUBO		
5. TUBO		
6. TUBO		
7. TUBO		
8. TUBO		
9. TUBO		
10. TUBO		
11. TUBO		
12. TUBO		
13. TUBO		
14. TUBO		
15. TUBO		
16. TUBO		
17. TUBO		
18. TUBO		
19. TUBO		
20. TUBO		
21. TUBO		
22. TUBO		
23. TUBO		
24. TUBO		
25. TUBO		
26. TUBO		
27. TUBO		
28. TUBO		
29. TUBO		
30. TUBO		
31. TUBO		
32. TUBO		
33. TUBO		
34. TUBO		
35. TUBO		
36. TUBO		
37. TUBO		
38. TUBO		
39. TUBO		
40. TUBO		
41. TUBO		
42. TUBO		
43. TUBO		
44. TUBO		
45. TUBO		
46. TUBO		
47. TUBO		
48. TUBO		
49. TUBO		
50. TUBO		
51. TUBO		
52. TUBO		
53. TUBO		
54. TUBO		
55. TUBO		
56. TUBO		
57. TUBO		
58. TUBO		
59. TUBO		
60. TUBO		
61. TUBO		
62. TUBO		
63. TUBO		
64. TUBO		
65. TUBO		
66. TUBO		
67. TUBO		
68. TUBO		
69. TUBO		
70. TUBO		
71. TUBO		
72. TUBO		
73. TUBO		
74. TUBO		
75. TUBO		
76. TUBO		
77. TUBO		
78. TUBO		
79. TUBO		
80. TUBO		
81. TUBO		
82. TUBO		
83. TUBO		
84. TUBO		
85. TUBO		
86. TUBO		
87. TUBO		
88. TUBO		
89. TUBO		
90. TUBO		
91. TUBO		
92. TUBO		
93. TUBO		
94. TUBO		
95. TUBO		
96. TUBO		
97. TUBO		
98. TUBO		
99. TUBO		
100. TUBO		
101. TUBO		
102. TUBO		
103. TUBO		
104. TUBO		
105. TUBO		
106. TUBO		
107. TUBO		
108. TUBO		
109. TUBO		
110. TUBO		
111. TUBO		
112. TUBO		
113. TUBO		
114. TUBO		
115. TUBO		
116. TUBO		
117. TUBO		
118. TUBO		
119. TUBO		
120. TUBO		
121. TUBO		
122. TUBO		
123. TUBO		
124. TUBO		
125. TUBO		
126. TUBO		
127. TUBO		
128. TUBO		
129. TUBO		
130. TUBO		
131. TUBO		
132. TUBO		
133. TUBO		
134. TUBO		
135. TUBO		
136. TUBO		
137. TUBO		
138. TUBO		
139. TUBO		
140. TUBO		
141. TUBO		
142. TUBO		
143. TUBO		
144. TUBO		
145. TUBO		
146. TUBO		
147. TUBO		
148. TUBO		
149. TUBO		
150. TUBO		
151. TUBO		
152. TUBO		
153. TUBO		
154. TUBO		
155. TUBO</		

T A B L A 12 (CONT.)

*** DIFERENCIALES ***

NO. DE EQUIPO	14	33
HONOR. EXTERNO	P-1	P-2
ETAPAS DE COMP.	5.0000	1.0000
CAPACIDAD (ETU/HR)	1787.4343	4333.5233
PRES. SAL.	10	33
PUERNA TIPO :	15000000	15000000
(+) - 1000		
(-) - 1000		
H-M. (SAL.)	1274.0000	1274.0000
(ETU/HR)		
USO DE AGUA	147512.062	3543.2012
(GAL/HR)		
USO DE VAPOR	67.5621	1.6964
(MED/HR)		

*** ADSORBEDOR ***

NO. DE EQUIPO	43
HONOR. EXTERNO	391
NO. DE ETAPAS	17.0000
CONSUMO (PIES)	1.0000
(ETU/PIES)	2.0000
VELOCIDAD DEL	1733.0114
REPORT (PIES/SEG)	

CAPITULO V

ANALISIS DE RESULTADOS

ANALISIS DE RESULTADOS

Como se puede observar de los resultados obtenidos de la simulación de la planta de metanol son congruentes con los obtenidos por una planta en operación.

Las diferencias existentes entre ambos, serán función de la precisión o rigurosidad con que sean llevadas a cabo el modelado - de las operaciones principales del proceso; así como también de los modelos termodinámicos utilizados en la simulación.

Por otro lado, tenemos que los resultados de la simulación, son elementos fundamentales para el análisis o diseño del proceso, ya que como lo demuestran las tablas 11 y 12, se genera una matriz de las corrientes del proceso y los detalles individuales de cada operación, los cuales pueden ser utilizados tanto para la evaluación económica del proceso, como para el diseño y dimensionamiento de cada etapa del mismo.

CAPITULO VI

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

Las conclusiones generadas durante el desarrollo del presente trabajo, pueden ser resumidas en lo siguiente:

Es importante para poder llevar a cabo la simulación de un proceso, el contar con una estructura base o sea un simulador de procesos para el cual solo se tenga que desarrollar los módulos particulares del proceso en estudio. Esta estructura base deberá tener alguno de los enfoques para llevar a cabo la simulación, ya sea secuencial modular, modular simultáneo u orientado a ecuaciones.

De estos tres enfoques podemos concluir que el enfoque-secuencial modular es el mas similar a una planta de proceso, ya que el flujo de información sigue la misma dirección que el flujo de proceso. Por otra parte, cada unidad de procesamiento puede ser modelada con el nivel de rigurosidad que se desee, además este enfoque es transparente ya que en caso de fallas en la simulación, se puede detectar con facilidad el origen de las mismas.

Con lo que respecta a los resultados generados por la simulación, estos pueden servir de base para llevar a cabo el dimensionamiento del equipo de proceso y posteriormente-

la evaluación económica del mismo.

La confiabilidad de los resultados, dependen del grado de rigurosidad de los modelos utilizados en la simulación de un proceso. En el presente trabajo, debido a que las ecuaciones tomadas de la literatura para el desarrollo de los modelos matemáticos son simples, existen diferencias al comparar los resultados obtenidos de la simulación del proceso y los que se tienen en realidad en la planta de Metanol; ya que únicamente se simuló el equipo clave del proceso, para poder conocer su comportamiento teórico.

De igual manera la simulación de procesos a través del enfoque secuencial modular puede ser útil para el estudio paramétrico de la planta de proceso, para determinar las condiciones óptimas de operación.

Las recomendaciones generadas en este trabajo, es la utilización de un modelo termodinámico que represente con más exactitud el comportamiento del metanol, en lugar del método de CHAO-SEADER utilizado en este trabajo; por otra parte el realizar un análisis de las posibles recuperaciones de energía a través de un análisis de segunda ley para determinar las irreversibilidades del proceso; y por último se debe realizar un estudio para conjuntar el simulador de procesos con las técnicas de optimización.

CAPITULO VII

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Ballman, S. H. and J. L. Gaddy
Optimization of Methanol Process Flowsheet Simulation
Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev. Vol. 16, No 3, Pag.337
(1977).
- 2.- Barkley, R. W. and R. L. Motard
Descomposition of Nets
Chem. Eng. Journal, Vol. 3, Pag. 265 (1972).
- 3.- Conte, S. D.
Elementary Numerical Analysis
Mc.Graw-Hill, New York, N. Y., Pag. 31 (1965).
- 4.- Evans, L. B.
Advances in Process Flowsheeting Systems
En R. S. H. Mah and W. D. Seider, - (Foundations of Computer - Aided Chemical Process Design), (1981).
- 5.- Evans, L. B., B. Joseph and W. D. Seider
Systems Structures for Process Simulation
AIChE Journal, Vol. 23, No. 5, Pag. 658 (1977).
- 6.- Evans, L. B., D. V. Steward and C. R. Sprague
Computer Aided Chemical Process Design
Chem. Eng. Progr., Vol. 64, Pag. 39 (1968).
- 7.- Evans, L. B. and W. D. Seider
The Requirements of an Advances Computing System.
Chem. Eng. Progr., Vol. 64, Pag. 80 (1976).
- 8.- Fulton, J. W. and J. R. Fair
Manufacture of Methanol and Substitute Natural Gas
Monsanto, St. Louis, Mo., (1974).

- 9.- Gaines, L. D. and J. L. Gaddy
Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., Vol. 15, No. 1, Pag. 206
(1976).
- 10.- Holland, D. R. and S. W. Wan
Chem. Eng. Progr., Vol. 59, No. 8, Pag. 69 (1963).
- 11.- Hougen, O. A., K. M. Watson and R. R. Ragatz
Chemical Process Principles
2nd ed., John Wiley, New York, N. Y., Pag. 986 (1966)
- 12.- Kehat, E. and M. Shacham
Chemical Process Simulation, Programs-1
Process Technology, Vol. 18, No. 1 y 2, Pag. 35 (1973 a)
- 13.- Kehat, E. and M. Shacham
Chemical Process Simulation, Programs-2
Process Technology, Vol. 18, No. 3, Pag. 115 (1973 b).
- 14.- Kehat, E. and M. Shacham
Chemical Process Simulation, Programs-3
Process Technology, Vol. 18, No. 4 y 5, Pag. 181 (1973 c)
- 15.- Kirk, R. E. and D. F. Othmer
Encyclopedia of Chemical Technology, "Methanol"
1st. ed., Intersc. Encycl., Ing. New York, Vol. 9, - -
Pag. 31 (1952).
- 16.- Kirk, R. E. and D. F. Othmer
Encyclopedia of Chemical Technology, "Methanol"
2nd. ed., Intersc. Publ. of John Wiley, New York, N. Y.,
Vol. 13, Pag. 370 (1967).

- 17.- Kirk, R. E. and D. F. Othmer
Encyclopedia of Chemical Technology, "Methanol"
3 th. ed., Interse. Publ. of John Wiley, New York, N. Y.,
Vol. 15, Pag. 398 (1981).
- 18.- Mehta, D. D. and D. E. Ross
Hydrocarbon Processing, Vol. 49, Nº. 11, Pag. 183 (1970)
- 19.- Mickley, H. S., T. K. Sherwood and C. E. Reed
Applied Mathematics in Chemical Engineering
2nd. ed., McGraw-Hill, New York, N. Y., Pag. 390 (1957).
- 20.- Montiel, M. C.
Análisis de Secuencias de Cálculo para la Simulación de -
Procesos.
Tesis Prof., Fac. de Química, U.N.A.M. (1981).
- 21.- Morse, P. L.
Hydrocarbon Processing, Vol. 52, Nº. 1, Pag. 113 (1973).
- 22.- Motard, R. L., M. Shacham and E. M. Rosen
Steady State Chemical Process Simulation
AIChE Journal, Vol. 21, Nº. 3, Pag. 417 (1975).
- 23.- Naphtali, L. M. and D. P. Sandholm
Multicomponent Separation Calculations by Linearization
AIChE Journal, Vol. 17, Nº. 1, Pag. 148 (1971).
- 24.- Natta, G.
Synteris of Methanol
Catalysis, Vol. 3, New York, N. Y., Pag. 349 (1955).

- 25.- Norman Peters
DYNYSYS: A dynamic Systems Simulation Program
En Leesley, M. E., - (Computer-Aided Process Plant Design)
(1982).
- 26.- Reid, P. C., J. M. Prausnitz and T. M. Sherwood
The Properties of Gases and Liquids
3rd. ed., McGraw-Hill, New York, N. Y. (1977).
- 27.- Rosen, E. M.
Steady State Chemical Process Simulation; State of the -
Art Review
Comp. Applications to Chem. Eng. ACS Symposium Series, --
No. 1124, Pag. 3 (1980).
- 28.- Rosen, E. M. and A. C. Pauls
Computer-Aided Chemical Process Design
Comp. and Chem. Eng., Vol. 1, No. 1, Pag. 11 (1977).
- 29.- Sargent, R. W. H.
A Review of Methods for Solving Nonlinear Algebraic --
Equations
Computer Aided Process Design, Henniker, H. J. July 6 --
(1980).
- 30.- Sargent, R. W. H. and A. W. Westerberg
SPEED UP in Chemical Engineering Design
Trans. Inst. Chem. Eng., Vol. 42, Pag. 190 (1964).
- 31.- Shah, M. J. and R. E. Stillman
Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., Vol. 62, No. 12, Pag. 59
(1970).

- 32.- Strellzoff, S.
Chem. Eng. Progr. Symposium Series, Vol. 66, No. 98 --
Pag. 55 (1970).
- 33.- Tarjan, R.
Depth-First Search and Linear Graph Algorithms SIAM J. --
Comput., Vol. 1, Pag. 146 (1972).
- 34.- Umeda, T. and M. Nishio
Comparation Between Sequential and Simultaneous Approaches
in Process Simulation
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol., 11, Pag. 153 --
(1972).
- 35.- Upadhye, R. S. and E. A. Grens
Selection of Decompositions for Chemical Process Simula--
tions.
AIChE Journal, Vol. 21, No. 1, Pag, 136 (1975).
- 36.- Wegstein, J. H.
Accelerating Convergence of Iterative Processes
Comp. M. Assoc. Computing Mach., Vol. 1 Pag. 9 (1958),
- 37.- Westerberg, A W., H. P. Hutchison, R. L. Motard an P. --
Winter
Process Flowsheeting
Combridge University Press (1979).

CAPITULO VIII

APENDICE A

INTRODUCCION

El metanol, también llamado alcohol metílico, carbinol-- ó alcohol de madera; es un líquido a presión y temperatura - ambientes, de sabor ardiente y olor picante, su fórmula es: - $\text{CH}_3\text{-OH}$ con peso molecular de 32.04

Robert Boyle en 1661, fué el primero en reconocer la existencia de una Substancia Neutral, en el producto obtenido - de la destilación destructiva de la madera.

Esta substancia fué designada por Taylor como éter piroleñoso, en 1812, e identificado finalmente en 1834 por Dumas- y Peligot, quienes lo aislaron y establecieron su fórmula.

Por décadas, la única fuente comercial para la obtención del metanol, fué el ácido piroleñoso: pero con el desarrollo, desde hace 30 años, la síntesis a presión media (100-600 atm) de óxidos de carbono e hidrógeno; el método de la destilación de la madera ha sido superado.

La oxidación directa de hidrocarburos proveen otro método para su síntesis, ya que en 1923 el metanol fué sintetizado a partir de hidrógeno y monóxido de carbono.

Al metanol se le descubrió un gran uso en la síntesis --

de formaldehído, y como anticongelante; así como también desnaturalizante y materia prima en la elaboración de productos químicos.

- PROPIEDADES FISICAS

Las propiedades físicas del metanol, se enlistan en la siguiente tabla:

TABLA 13

<u>PROPIEDAD</u>	<u>VALOR</u>
Peso específico a 25°C, gr/cm ³	0.7924
Punto de fusión, °C	-79.8
Punto de ebullición, °C	64.5
Presión crítica, k Pa	8096.0
Volumen crítico, mL/mol	118.0
Temperatura crítica, °C	239.43
Factor de compresibilidad	0.224
Presión de vapor a 25°C, k Pa	16.96
Límites de flamabilidad en el aire:	
Bajo, % vol	6.0
Alto, % vol	36.0
Punto de inflamación, Copa cerrada, °C	12.0
Copa abierta, °C	16.0
Punto de autoignición, °C	

<u>PROPIEDAD</u>	<u>VALOR</u>
Calor específico	
Del vapor a 25°C, J/Kg.	1.370
Del líquido a 25°C, J/Kg.	2.533
Conductividad térmica a 25°C, W/K	0.202
Solubilidad en agua	Miscible
Viscosidad del líquido a 25°C, c.p	0.541
Tensión superficial, dinas/cm.	22.6
Índice de refracción, n_D^{20}	1.328

La presión de vapor del metanol, de 15 a 64.5°C, está -
dada por la siguiente ecuación:

$$\ln P = 15.76 - 2.846 \cdot 10^3 T^{-1} - 3.743 \cdot 10^5 T^{-2} + 2.189 \cdot 10^7 T^{-3} \quad (101)$$

Donde: P = k Pa (7.5 mm Hg.)

T = Temperatura, °K

- REACCIONES QUIMICAS

La actividad química del metanol, es muy similar a la de otros alcoholes saturados, ya que tienen la particularidad de obtener productos al reaccionar el grupo hidroxilo.

- Reacción con metales.

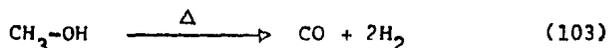
Los metales alcalinos reaccionan exotérmicamente con el metanol para producir metóxidos (metilatos).



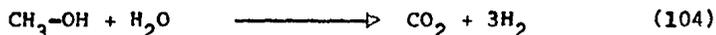
Los metóxidos son de gran uso en síntesis.

- Descomposición.

El CO y H₂, resultan de la descomposición de la síntesis catalítica del metanol a 350-400°C y a presión atmosférica.

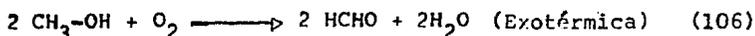
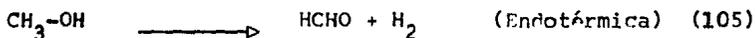


El metanol y vapor de agua, son descompuestos catalítica y endotérmicamente como CO₂ y H₂



- Deshidrogenación u oxidación parcial.

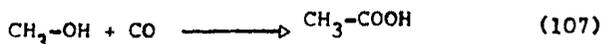
Una de las reacciones del metanol más importante comercialmente, es la deshidrogenación u oxidación parcial de éste a formaldehído, y que es llevada a cabo sin catalizador con o sin presencia del aire.



Químicamente, la reacción de oxidación puede ser considerada como la dehidrogenación, en donde el oxígeno del aire actúa como un receptor de hidrógeno y suministra el calor requerido por la reacción.

- Reacción con CO.

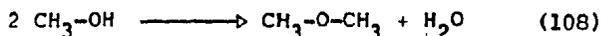
El ácido acético, se obtiene directamente de la reacción del metanol y CO a 350°C y 700 atm. en presencia de un catalizador de carbón activado.



El rendimiento de ésta reacción, es de alrededor del 90%.

- Formación de éteres.

El dimetil-éter, se forma por la deshidratación de metanol con un catalizador de Al, Th, ó Ti a 350°C, ó Cu promotor a 165-235°C.



El éter también puede ser obtenido por la deshidratación de metanol en fase líquida, empleando H₂SO₄ concentrado.

Estas son algunas de las reacciones más importantes del metanol, para la obtención de otros productos, que tienen gran utilidad en la industria.

- OBTENCION

En la actualidad el método más importante para la obtención del metanol, es por el proceso de síntesis catalítica a presión elevada o baja presión; a partir de monóxido de carbono e hidrógeno, o de bióxido de carbono e hidrógeno.

El metanol también se obtiene por combinación del ácido salicílico con el winter green (esencia de qualteria), que se encuentra en los productos de destilación de la madera.

Otro método para la obtención de metanol, es por medio de la oxidación parcial de hidrocarburos del gas natural.

Algunos otros métodos menos comunes son: Hidrogenación de 2 pasos de monóxido de carbono y formato de metilo, y de éste a metanol. Como subproducto de la síntesis de Fisher-Tropsch u otras, tales como la oxidación de metano por trióxido de azufre, hidrólisis de metilal e hidrogenación de dimetiléter.

- ESPECIFICACIONES

Las especificaciones del metanol, se dan bajo la norma-ASTM standar D 1152-58. Estas son las especificaciones gene

rales y pueden variar considerablemente dependiendo de las - necesidades de los consumidores y de su uso.

- ASTM D1152-58

- Alcohol metílico (METANOL), grado de pureza no menor- del 99.85% peso conforme a los siguientes requerimientos:

- Gravedad específica, no superior de 0.7993 (20/20°C).
- Color, no más del N^o. 5 en la escala Pt-Co.
- Rango de destilación, entre 64.0 y 65.5°C.
- Materia no volátil, no más de 0.001 gr/100 ml.
- Olor característico, sin residuos.
- Agua, no mayor de 0.15% en peso.
- Acidez no superior a 0.003% en peso (como ácido acéti- co) (equivalente a 0.028 mqr KOH/gr muestra).
- Prueba de tiempo de permanganato, color de $KMnO_4$ agre- gado, debe ser retenido por 30 min. a $15^{\circ}C \pm 0.5$, -- exento de nitritos e hidrocarburos.
- Acetona, no más de 0.003% en peso.

- TOXICIDAD

El riesgo para la salud generalmente más conocido, aso- ciado con el metanol es la ceguera, usualmente como resulta- do de su ingestión.

El metanol al ser inhalado, ingerido o al tener contac-

to con la piel puede perjudicar al organismo; cualquiera que sea la vía de absorción. Los síntomas de intoxicación que se presentan son: vértigo, dolor de cabeza, sensación de -- decaimiento, fatiga, náuseas y dolor abdominal, que son los más típicos; también pueden presentarse trastornos visuales como visiones borrosas. En casos severos, los síntomas pueden aparecer una hora después de la ingestión del producto, pero por lo general el efecto tarda de 12 a 24 horas.

En intoxicaciones agudas, puede ocasionar ceguera temporal o permanente e incluso la muerte.

La máxima concentración permisible para una jornada de 8 hrs., es de 200 ppm por 40 hrs. de trabajo a la semana.

- USOS

Históricamente, casi la mitad de todo el metanol producido, ha sido utilizado para la producción de formaldehído; una tendencia que continúa en la actualidad.

En el futuro, el formaldehído, puede perder algo de ésta posición, debido a los usos del metanol en la producción de compuestos químicos de creciente rapidez, tal como el ácido acético, metilterbutiléter (MTBE), oxinol (que es un al--

cohol combinado de metanol y alcohol terbutílico, que aumenta el octanaje de la gasolina) y otros químicos intermedios.

La producción de ácido acético vía carbonilación de metanol (Proceso Monsanto), es uno de sus grandes usos con una gran velocidad de crecimiento.

Otros mercados importantes incluyen a las síntesis orgánicas, tales como la síntesis de metacrilato de metilo, metilaminas, haluros de metilo y tereftalato de dimetilo.

El metanol, también es usado como un disolvente en general, como parte de pólvora sin humo, eliminadores de pinturas y barnices; pulimentaciones y limpieza, jabones transparentes y desinfectantes, lavado en seco y perfumería.

Un área que promete para el metanol, es su uso directo en combustibles.

Potencialmente, éste puede ser usado como un sustituto del combustible diesel y gasolina o como un aditivo de la misma.

Otros usos combustibles incluyen; la de quemador-limpiaador o como combustible de turbinas para la generación de e-

lectricidad.

El metanol, también es utilizado para la elaboración de gasolina en el proceso MTG de Movil (Metanol a Gasolina).

Aunque todos estos usos están bajo estudio, tienden a ser unos de los grandes usos del metanol para fines de los 1980's.

El metanol, también está considerado para ser utilizado en otras áreas, tales como alimentación para producir olefinas como fuente de gas reductor en la fabricación de acero y su uso en celdas combustibles.

El metanol lleva el mismo paso con el cambio de la tecnología en el pasado, y continuará así en el futuro; ya que sus usos están cambiando y adaptándose a los avances tecnológicos, además de que promete continuar como una de las principales fuentes de materias primas de procesos químicos para el sector industrial en el futuro.