



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**SIMULACIÓN DE PROCESOS DE
PRODUCCIÓN DE POLIETILENO DE BAJA
DENSIDAD**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERA QUÍMICA

P R E S E N T A:

ANETE JOCELINE BENITEZ CARREÓN



MÉXICO, CD. DE MX.

2017



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: **Profesor: Dr. Enrique Rodolfo Bazúa Rueda**

VOCAL: **Profesor: Dr. Eduardo Vivaldo Lima**

SECRETARIO: **Profesor: Dr. Martin Rivera Toledo**

1er. SUPLENTE: **Profesor: Dr. Alberto Rosas Aburto**

2° SUPLENTE: **Profesor: Ing. Daniel Bobadilla Ocampo**

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA: UNAM, FACULTAD DE QUÍMICA, LABORATORIO D-324B

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Eduardo Vivaldo Lima

SUPERVISOR TÉCNICO:

M. en C. René Yamamoto Arana

SUSTENTANTE

Anete Joceline Benitez Carreón

Agradecimientos:

Al Laboratorio D-324B por todo el apoyo brindado

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), por la beca de asistente de investigador nacional nivel 3 y financiamiento de los proyectos de investigación CB 239364, PEI 220695 y FIT 235803 cuyo responsable es el asesor de tesis, así como a DGAPA-UNAM (Proyecto PAPIIT IG100815) y a la FQ-UNAM por el presupuesto de investigación PAIP del asesor de tesis.

Al Complejo Petroquímico Morelos por las facilidades brindadas.

A la UNAM por todas las oportunidades que me ha brindado.

Dedicatoria

**A Ana Bertha Carreón Cruz quien es
madre, padre e inspiración, por todos
sus sacrificios.**

**A mis abuelos Adelfa Cruz Nolasco y
Juan Carreón Soto por todo.**

**A mi hermana Fanny Krystel Benitez
Carreón por su gran apoyo.**

Contenido

Presentación.....	1
1. INTRODUCCIÓN	11
1.1 Preámbulo	11
1.2 Antecedentes.....	12
1.2.1 Polietileno.....	13
1.2.2 Polietileno de Baja Densidad PEBD (LDPE Low Density Polyethylene).....	16
1.2.3 Polietileno Lineal de Baja Densidad PELBD (LLDPE Linear Low Density Polyethylene).....	26
1.3 Objetivo y alcance	37
2. BASES DEL PROCESO DE SIMULACIÓN	38
3. SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIETILENO DE BAJA DENSIDAD (LDPE)	40
3.1 Creación del documento de simulación	40
3.2 Especificación de componentes	41
3.3 Especificación del polímero.....	43
3.3.1 Identificación del segmento	43
3.3.2 Identificación del polímero.	44
3.4 Selección del método de cálculo de propiedades termodinámicas	45
3.4.1 Ejecución del cálculo de propiedades	47
3.5 Definición de la reacción química	47
4. SIMULACIÓN DEL PROCESO GLOBAL DEL LDPE	53
5. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIETILENO LINEAL DE BAJA DENSIDAD (LLDPE)	67
5.1 Creación del documento de simulación.	67
5.2 Especificación de componentes	68
5.3 Especificación del polímero.....	72
5.3.1 Identificación del segmento.	72
5.3.2 Identificación del polímero	73
5.4. Características del catalizador.....	74
5.5 Elección del método de cálculo de propiedades termodinámicas.....	75
5.5.1 Ejecución del cálculo de propiedades.	76
5.6 Definición de la reacción química.	76
5.6.1 Comparación de la distribución en peso de tamaño de cadena con Predici®	88
6. SIMULACIÓN DEL PROCESO GLOBAL DEL LLDPE.	90

7. CONCLUSIONES.....	102
8. REFERENCIAS.....	104
9. ANEXOS.....	109
I. Modelos Termodinámicos.....	109
I.II PC-SAFT.....	111
I.III Sanchez-Lacombe.....	112
II. LDPE (Low Density Polyethylene).....	114
II.I Balance de materia molar para el proceso de producción de LDPE.....	114
II.II Balance de materia másico para el proceso de producción de LDPE.....	117
II.III Condiciones principales para las corrientes del proceso de producción de LDPE.....	123
II.IV Información de los equipos del proceso de producción de LDPE.....	126
II.V Información generada por ASPEN PLUS para la serie de reactores Simulados.....	128
III. LLDPE (Linear Low Density Polyethylene).....	153
III.I Información generada por ASPEN PLUS para el proceso de producción de LLDPE.....	153
IV. Nomenclatura.....	156

Índice de Tablas

Tabla 1-1. Propiedades físicas de las variantes de polietileno. 190°C=463.15K, 230°=503.15K.....	15
Tabla 1-2. Principales características del polietileno de baja densidad.....	17
Tabla 1-3. Principales tipos de polietileno de baja densidad producidos por PEMEX.....	17
Tabla 1-4. Principales tipos de polietileno de baja densidad producidos por Braskem-IDESSA.....	18
Tabla 1-5. Tipos de proceso de producción de polietileno de baja densidad.....	20
Tabla 1-6. Principales características del polietileno lineal de baja densidad. 20°=293.15K.....	27
Tabla 1-7. Principales tipos de polietileno lineal de baja densidad comercializados en el país.....	28
Tabla 1-8. Tipos de proceso de polietileno lineal de baja densidad.....	29
Tabla 3-1. Información básica para el modelo termodinámico Sanchez-Lacombe.....	46
Tabla 3-2. Constantes cinéticas.....	49
Tabla 3-3. Balance de materia másico del reactor sin recirculación.....	51
Tabla 4-1. Datos másicos del proceso de base.....	54
Tabla 4-2. Variables de proceso conocidas del caso base.....	54
Tabla 4-3. Constantes cinéticas del artículo de Mavridis y Kiparissides (1985). ...	57
Tabla 4-4. Balance de materia molar (kmol/h) de entrada y salida del proceso y del reactor.....	58
Tabla 4-5. Balance de materia másico (kg/h) de entrada y salida del proceso y del reactor.....	58
Tabla 4-6. Conjunto de rangos de conversión reportados en la literatura.....	59
Tabla 4-7. Rangos de polidispersidad y conversión reportados en la literatura (Kehinde et al., 2012).....	66
Tabla 5-1. Información básica para el modelo termodinámico PC-SAFT.....	75
Tabla 5-2. Constantes cinéticas de la polimerización etileno-buteno (McAuley et al. 1990).....	79
Tabla 5-3. Constantes cinéticas de reacción de Khare et al. (2003).....	80
Tabla 5-4. Constantes cinéticas de reacción de Scarola.(1985).....	81
Tabla 5-5. Constante cinética del ejemplo de HDPE de ASPEN PLUS POLYMERS.....	82
Tabla 5-6. Balance de materia másico (kg/h) del reactor sin recirculación.....	83
Tabla 5-7. Principales datos de la distribución polimérica.....	84
Tabla 6-1. Condiciones de las corrientes de entrada.....	91
Tabla 6-2. Constantes cinéticas de ajuste para datos en planta.....	92
Tabla 6-3. Balance molar (Kmol/h) del proceso de producción de LLDPE.....	94
Tabla 6-4. Balance de materia másico (kg/h) del proceso de producción de LLDPE.....	95
Tabla 6-5. Variables de proceso.....	96
Tabla 6-6. Datos del intercambiador.....	97
Tabla 6-7. Datos del Reactor.....	97
Tabla 6-8. Datos del compresor.....	97

Tabla 6-9. Calculo del MI.	101
Tabla 9-1. Métodos de cálculo de propiedades termodinámicos.....	109
Tabla 9-2. Balance de materia molar (kmol/h) para el proceso global de producción de LDPE.....	114
Tabla 9-3. Balance de materia molar (kmol/h) para el conjunto de reactores auxiliares (Reactores en Serie).	116
Tabla 9-4. Balance molar de las corrientes de intercambio de calor para los reactores auxiliares (Reactores en Serie).	117
Tabla 9-5. Balance de materia másico (kg/h) para el proceso global de producción de LDPE.....	117
Tabla 9-6. Balance de materia másico (kg/h) para el conjunto de reactores auxiliares (Reactores en Serie).	121
Tabla 9-7. Balance molar (kmol/h) de las corrientes de intercambio de calor para los reactores auxiliares (Reactores en Serie).....	122
Tabla 9-8. Balance másico (kg/h) de las corrientes de intercambio de calor para los reactores auxiliares (Reactores en Serie).	122
Tabla 9-9. Principales datos de las corrientes del proceso LDPE.	123
Tabla 9-10. Información básica de los intercambiadores del proceso de producción de LDPE.....	126
Tabla 9-11. Información básica de los compresores del proceso de producción de LDPE.....	126
Tabla 9-12. Información básica de los tanques Flash del proceso de producción de LDPE.....	127
Tabla 9-13. Resumen de constantes cinéticas de reacción.....	156
Tabla 9-14. Resumen del significado de las siglas del reporte de ASPEN PLUS para los reactores.....	157

Índice de Figuras:

Figura 1-1. Composición del mercado de polímeros en el 2014	12
Figura 1-2. Clasificación de polímeros con descripción breve.....	13
Figura 1-3. Clasificación principal del polietileno según su composición y densidad.	14
Figura 1-4. Esquema representativo del LDPE.	16
Figura 1-5. Pellets de polietileno de baja densidad.	19
Figura 1-6. Diagrama de proceso de LDPE (Cervantes et al., 2000 y 2002).	22
Figura 1-7. Cadena polimérica de LLDPE.	26
Figura 1-8. Pellets de polietileno lineal de baja densidad.....	28
Figura 1-9. Base del proceso de reacción (Alizadeh, 2004).....	31
Figura 1-10. Mecanismo de reacción Ziegler-Natta.....	34
Figura 2-1. Requerimientos principales que cubre ASPEN PLUS para la simulación del proceso de polimerización.	39
Figura 3-1. Ventana de selección del paquete Polymers de ASPEN PLUS.....	40
Figura 3-2. Ambiente de simulación de propiedades.	41
Figura 3-3. Especificación de componentes. Monómero, polímero, iniciadores....	42
Figura 3-4. Fragmento C_2H_4-R	43
Figura 3-5. Especificación del segmento.....	43
Figura 3-6. Definición de tipo de segmentos.	44
Figura 3-7. Especificación del tipo de reacción.	45
Figura 3-8. Selección del método termodinámico.	46
Figura 3-9. Resultados disponibles.	47
Figura 3-10. Creación de la reacción química.	47
Figura 3-11. Selección de componentes clave.....	48
Figura 3-12. Comprobación de las reacciones de polimerización.	48
Figura 3-13. Constantes cinéticas.	49
Figura 3-14. Reactor sin recirculación.....	50
Figura 3-15. Distribución en peso de pesos moleculares.....	52
Figura 4-1. Diagrama de proceso: Producción de LDPE.....	53
Figura 4-2. Reactor independiente al ciclo.	55
Figura 4-3. Configuración del reactor.	55
Figura 4-4. Reactor con fluido térmico contracorriente.....	56
Figura 4-5. Reactor adiabático.	56
Figura 4-6. Distribuciones en peso de tamaño de cadena de los 4 reactores en serie.	60
Figura 4-7. Distribuciones en peso de pesos moleculares de los 4 reactores en serie.	60
Figura 4-8. Perfil general de temperatura comparado con los datos de Gupta(1987).	61
Figura 4-9. Perfil de temperatura de los datos de planta y optimización reportados por Asteasuain y Brandolin (2007) para el reactor de LDPE.	62
Figura 4-10. Perfil de composición en función de la longitud para el primer reactor generado por ASPEN PLUS.....	63
Figura 4-11. Polidispersidad en función de la longitud para el primer reactor.	64
Figura 4-13. Distribución en peso de pesos moleculares para la resina obtenida.	65

Figura 5-1. Ventana de selección del paquete Polymers de ASPEN PLUS.....	67
Figura 5-2. Ambiente de simulación de propiedades.	68
Figura 5-3. Especificación de componentes. Monómero y comonómero; Catalizador y Cocatalizador; Polímero	71
Figura 5-4. Especificación de segmentos.....	72
Figura 5-5. Especificación del tipo de segmento.....	73
Figura 5-6. Identificación de mecanismo de reacción.	74
Figura 5-7. Características del catalizador.	74
Figura 5-8. Elección del método termodinámico.	75
Figura 5-9. Cálculo de propiedades termodinámicas con resultados disponibles.	76
Figura 5-10. Creación de una reacción química.....	76
Figura 5-11. Identificación de componentes claves en la reacción.	77
Figura 5-12. Comprobación de reacciones de polimerización.....	77
Figura 5-13. Constantes de reacción desde el formato de ASPEN PLUS.	78
Figura 5-14. Reactor sin recirculación.....	82
Figura 5-15. Distribución en peso de pesos moleculares del caso R1, sin recirculación.	85
Figura 5-16. Distribución en peso de pesos moleculares del caso R2, sin recirculación.	86
Figura 5-17. Distribución en peso de pesos moleculares del caso R3, sin recirculación.	87
Figura 5-18. Comparación de la distribución de tamaño de cadena al tiempo 0.40664 horas de Predici y ASPEN PLUS	89
Figura 6-1. Diagrama de proceso LLDPE.	90
Figura 6-2. Distribución en peso de tamaño de cadena.	98
Figura 6-3. Distribución en peso de tamaño de cadena para el LLDPE (Alizadeha, 2004).	99
Figura 6-4. Distribuciones en peso de tamaño de cadena.	100

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Preámbulo.

Gran parte de las soluciones de nuestras vidas se basa en los polímeros, desde la ropa que usamos o la pluma con la que escribimos, hasta las partes de equipos especializados. La gran ventaja que ofrecen los polímeros sintéticos es su obtención masiva con propiedades únicas para un fin específico, siendo el de mayor producción a nivel mundial el polietileno de baja densidad, al ser usado en diversos empaques.

Actualmente en México existen dos productores principales de polietileno de baja densidad Petróleos Mexicanos (PEMEX) y Braskem-IDESSA. A pesar de esto, en México existe un margen de demanda no cubierto que crea la necesidad de importación.

La simulación de los procesos poliméricos da la posibilidad de determinar las condiciones de operación necesarias para obtener un polímero con características específicas. La exactitud de estas predicciones se basa en la calidad de la información experimental que se posea y en la naturaleza de los modelos matemáticos empleados.

1.2 Antecedentes.

Actualmente, la mayoría de los artículos que cubren nuestras necesidades diarias son hechos de polímeros, en su totalidad o parcialmente. El polietileno es el polímero de mayor consumo a nivel global. En el 2014 representó el 40% del mercado mundial. Tan solo México tiene una demanda interna de 2000 kton/año con una producción interna de aproximadamente 1050 kton/año debido a la entrada en operación de la compañía Braskem-Idesa. Aún así, se presenta un déficit que cubrimos con importaciones provenientes de Estados Unidos de América.

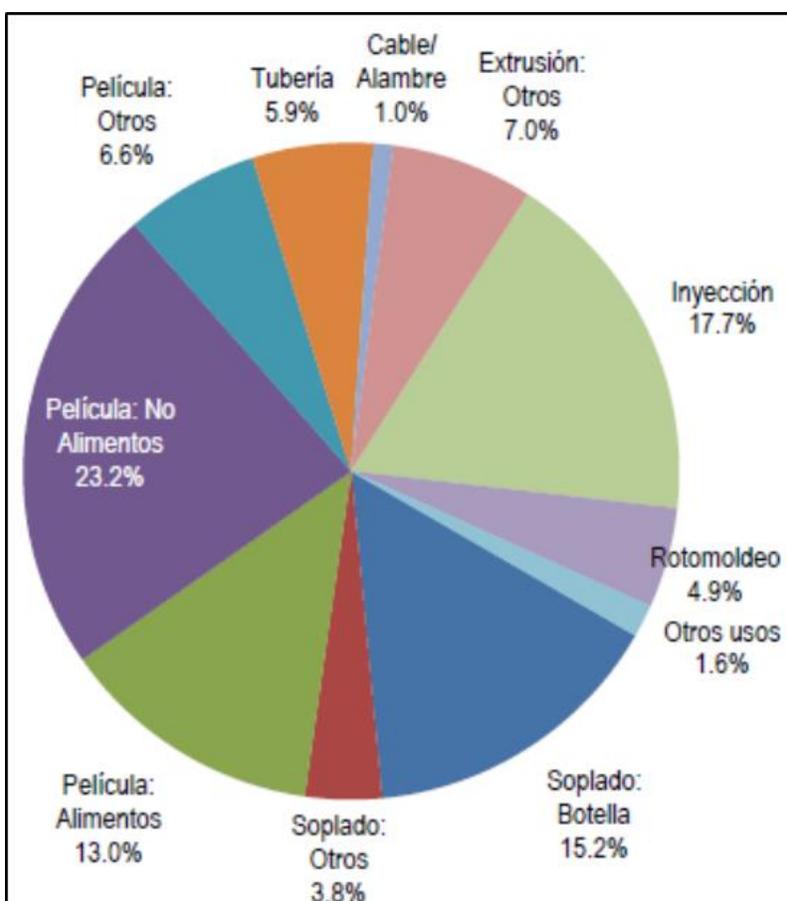


Figura 1-1. Composición del mercado de polímeros en el 2014 **Fuente:** En base al Sistema de Información de Comercio Exterior (SICM) de la Secretaría de Economía.

Hacia el 2019 se prevé un aumento de la capacidad de producción de la industria del plástico en casi 11 millones de toneladas para Canadá, Estados Unidos de América y México. En México se espera un crecimiento en una tasa promedio

anual de 3.8%, centrándose en la producción de polietileno de baja densidad (Nick Vafiadi, director Senior de Global Polyolefins and Plastics, El Economista, 2014).

1.2.1 Polietileno.

Los polímeros son macromoléculas construidas mediante la combinación de un gran número de moléculas más pequeñas, miles o millones, llamadas monómeros (Odián, 1991). Los polímeros se suelen clasificar de la siguiente manera:

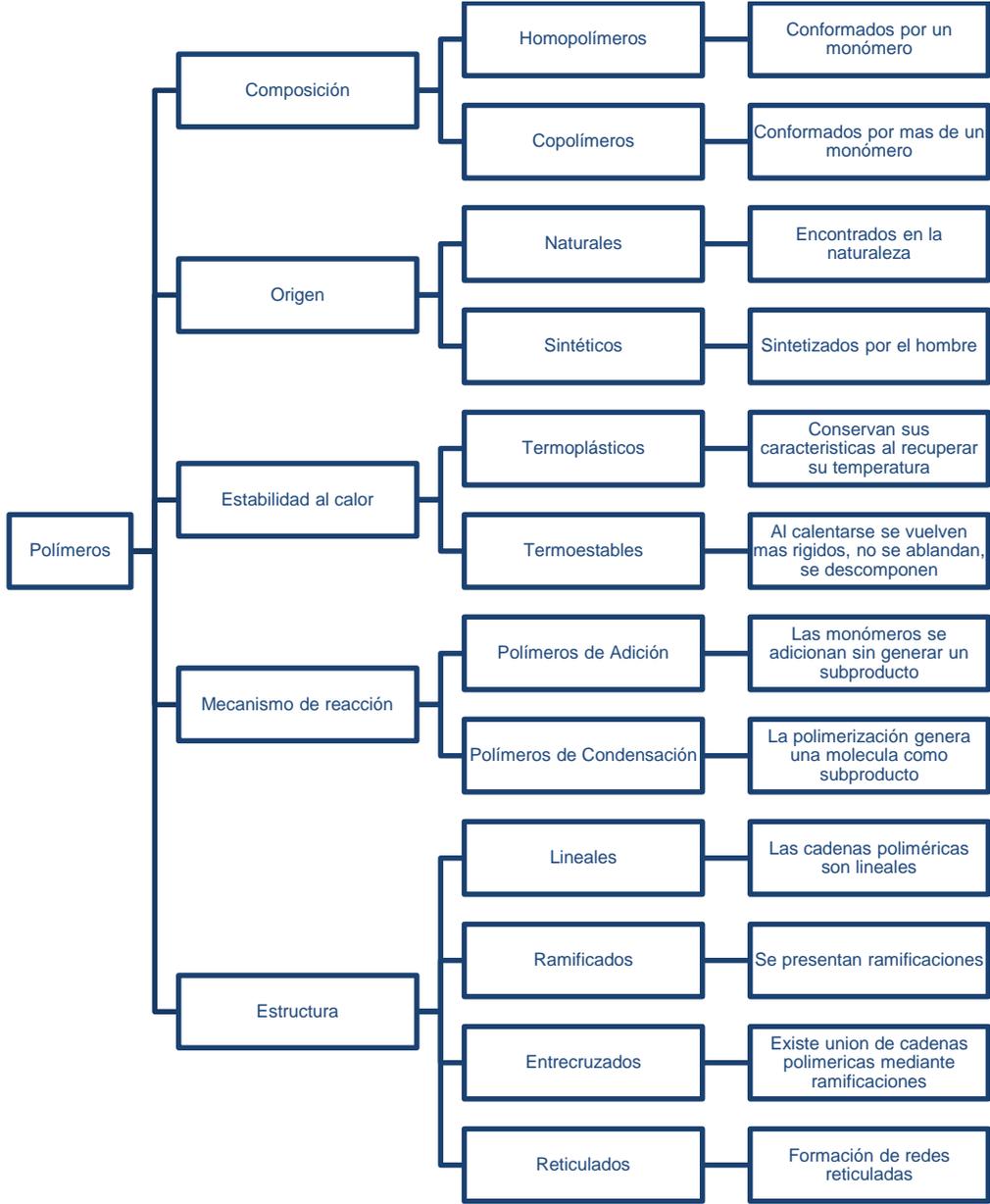


Figura 1-2. Clasificación de polímeros con descripción breve (Orea,2014).

El polietileno está formado esencialmente por unidades repetitivas de etileno, se clasifica como termoplástico siendo de origen sintético, puede ser tanto un homopolímero lineal o ramificado como un copolímero ramificado. Su polimerización puede darse por radicales libres o por coordinación. Además, podemos clasificar los tipos de polietileno por composición y densidad, como se muestra a continuación:

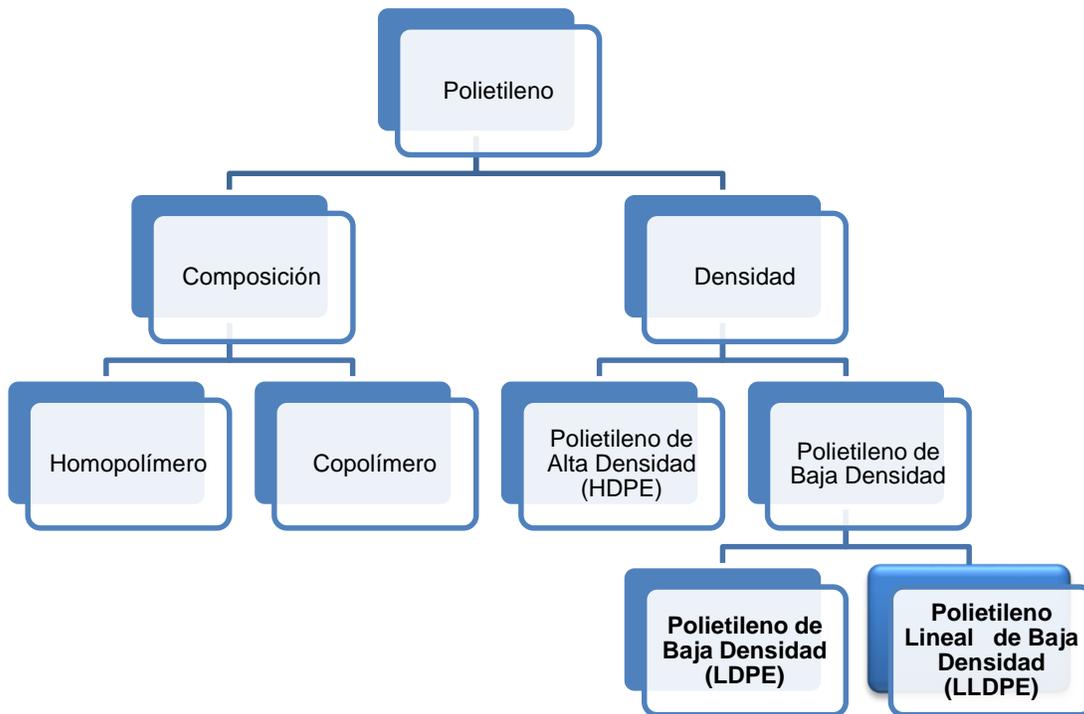


Figura 1-3. Clasificación principal del polietileno según su composición y densidad.

En muchas ocasiones se considera al Polietileno de Baja Densidad como LDPE y LLDPE sin hacer distinción (Xie et al., 1994). Existen otros tipos de polietileno de menor volumen de producción comercial, por su uso especializado (Malpass, 2010):

- Polietileno de ultra alto peso molecular (UHMWPE) 0.930-0.935g/cm³.
- Polietileno reticulado (PEX o XLPE).
- Polietileno de media densidad (MDPE) 0.926-0.940g/cm³

- Polietileno de muy baja densidad (VLDPE) 0.880-0.915g/cm³
- Polietileno de ultra bajo peso molecular (ULMWPE) 0.93-0.95g/cm³.

A continuación, se presenta una tabla donde definimos las principales características de los tipos más comunes de polietileno, además de mostrar su número CAS (Handbook of Polymers, Wypych, 2016).

Tabla 1-1. Propiedades físicas de las variantes de polietileno. 190°C=463.15K, 230°=503.15.

Característica	HDPE	LDPE	LLDPE
Numero CAS	25213-02-9 (hexeno); 26221-73.8 (octano)	9002-88-4	26221-73-8 (octeno) 25087-34-7 (buteno) 25213-02-9 (hexeno; metaloceno)
Pureza, %	99	99.9	99
Mw Dalton, g/mol	Baja: 1,000-100,000 Media: 100,000-180,000 Alta: 250,000-750,00 Extra alta: 750,000- 1,500,000	69,000-411,000	94,000-208,000
Polidispersidad	1 a menor de 10	4-30	1.6-3.5
Grado de ramificación	5/1000C*	7.8-33 metil/1000C*	2-4 %mol
Densidad, 20°C (298.15K) kg/m³	940-965; 996-1000 (cristalino)	915-929; 855(amorfo); 1000-1014 (cristalino)	905-942
Color	Blanco	Variable	Blanco claro
Índice de fluidez	Bajo: 10-100 Medio: 0.6-10 Alto: 0.06-0.15 (190°C/2.16kg)	0.25-55 g/10min (230°C/3.8kg)	0.2-160g/10min

*1000C=1000 Carbonos

La similitud entre las propiedades de LDPE y LLDPE hace que ambos compitan en un mismo mercado. Mientras el LLDPE tiene su principal uso en películas, para el LDPE es en empaques y películas (Vaughan et al., 2012).

1.2.2 Polietileno de Baja Densidad PEBD (LDPE Low Density Polyethylene).

El polietileno de baja densidad o PEBD (en inglés LDPE) la mayoría de las veces es un polímero ampliamente ramificado sin uniformidad.

La baja densidad es debido a que sus amplias ramificaciones evitan un compactamiento entre las cadenas. Sus ramificaciones suelen ser metilos, etilos, butilos, amilos y cadenas más largas. De los tres tipos principales de polietileno es el que presenta menor densidad.

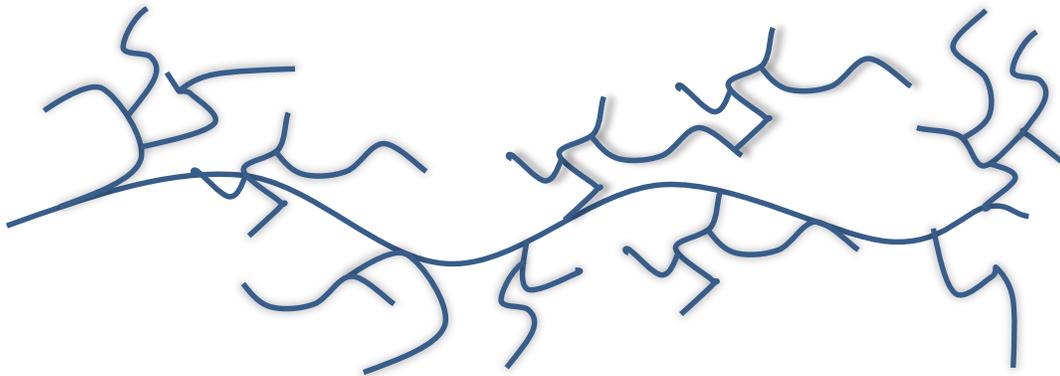


Figura 1-4. Esquema representativo del LDPE.

El LDPE fue producido por primera vez en 1939 por la compañía ICI (Fawcett y Perry, 1939). Su principal ventaja frente al LLDPE es su mayor ductibilidad. En la Tabla 1-2 se resumen las principales características del LDPE.

Tabla 1-2. Principales características del polietileno de baja densidad.

Características Principales	
Grado de cristalización %	28.8-60
Densidad kg/m³ a 20°C (293.15 K)	915-929; 855(amorfo) 1000-1014(cristalino)
Temperatura de Cristalización rápida °C (K)	96-100 (369.15-373.15)
Estabilidad química	Buena
Esfuerzo de ruptura MPa (Pa)	10 a 20 (10E+5 a 20E+5)
Elongación a ruptura % 0.025 mm	130-270(densidad media) 490-570(densidad alta)
Coefficiente de Expansión lineal (C⁻¹) 23-80°C (296.15-353.15 K)	1-5*10 ⁻⁴

En México los principales productores de este tipo de polietileno son Braskem-Idesa (Proyecto siglo XXI) y PEMEX. En Petróleos Mexicanos se produce por el proceso ICI de alta presión. La Tabla 1-3 muestra los tipos de resina que se producen.

Tabla 1-3. Principales tipos de polietileno de baja densidad producidos por PEMEX. **Fuente:** Polímeros. Productos. PEMEX petroquímica. 190°C=463.15K.

Grado	Índice de fluidez (190°C/2.16kg) g/10min	Densidad g/cm³ (kg/m³)	Uso
PX20020P	2.0	0.920 (920)	Bolsas impresas de pañales. Laminación. Película tubular, plana y termoencogible. Recubrimiento para alambre y cable. Tapas flexibles para botellas. Perfiles en general. Bolsas de uso general.
PX20020X	2.0	0.9205 (920.5)	Película en general. Película para bolsa de uso general. Empaques y envases de alimentos.

			Inyección de tapas inviolables. Juguetes. Perfiles. Manguera de baja presión.
PX22004C	0.40	0.9220 (922)	Película y empaque de alta resistencia para uso industrial y agrícola. Película para invernadero. Sacos industriales. Perfiles. Tubería flexible para riego. Película termoencogible.

Braskem-IDESA con el proyecto Siglo XXI pretenden tener una producción de 300 mil toneladas anuales. La tecnología de producción es LupoTech T alta presión (Licensed polyolefin technologies and Services: LupoTech, Lyondellbasell, 2016). Las principales resinas de comercialización son las que se indican en la Tabla 1-4.

*Tabla 1-4. Principales tipos de polietileno de baja densidad producidos por Braskem-IDESA. Fuente: <http://www.braskem.com.br/idesa/catalogos.Productos>. Braskem-IDESA. *Variación en la resistencia. 190°C=463.15K.*

Grado	Índice de fluidez (190°C/2.16kg) g/10min	Densidad g/cm³ (kg/m³)	Uso
LDI2020	20	0.920 (920)	Tapas y tapones. Artículos para el hogar.
LDI7022	7	0.922 (922)	Piezas moldeadas por inyección de gran área plana.
LDF2023	2	0.923 (923)	Bolsas y sacos. Película termoencogible.
LDF2023S1*	2	0.923 (923)	Película soplada. Película plana. Películas para embalaje de alimentos.
LDF0823	0.8	0.923 (923)	Película de resistencia media para empacado de diversos productos. Película termoencogibles de resistencia media. Capa posterior de pañales.

LDF0223	0.25	0.923 (923)	Bolsas de trabajo pesado. Película termoencogible. Bolsas y sacos. Película soplada. Botellas para bienes de consumo. Mezclas con PEAD y PELBD para procesos de extrusión y moldeo.
LDF0323	0.34	0.922 (922)	Bolsas industriales. Películas agrícolas y termoencogibles. Tubos y mangueras.

A pesar de entrar en la competencia nacional el proyecto Etileno XXI aún se requiere importación, debido al déficit existente. La Figura 1-5 ilustra los pellets de polietileno de baja densidad.



Figura 1-5. Pellets de polietileno de baja densidad.

1.2.2.1 Procesos de producción de LDPE.

El proceso de producción de polietileno de baja densidad se realiza a altas presiones, a través de un mecanismo de polimerización vinílica por radicales libres. Existen dos variantes principales debido al reactor: autoclave y tubular. En la Tabla 1-5 se resumen sus principales características.

Tabla 1-5. Tipos de proceso de producción de polietileno de baja densidad.

Característica	Alta presión	
Reactor	Autoclave	Tubular
Compañía	ICI	ICI
Solvente	Benceno/clorobenceno	-
Catalizador	Oxígeno, peróxidos orgánicos	Oxígeno, peróxidos orgánicos
Temperatura-°C	130-350	130-350
Presión-atm	1200-3000	1200-3000
Fase de reacción	Monómero	Monómero
Densidad g/cm³	0.910-0.930	0.910-0.930
Índice de fluidez g/10min	0.10-100	0.10-100

El proceso simulado en esta tesis corresponde al sistema de alta presión con reactor tubular de la compañía Lupotech T, similar al que se emplea actualmente para la producción de polietileno de baja densidad en Etileno XXI.

1.2.2.2 Descripción del proceso general Lupotech T.

El proceso industrial Lupotech T consiste en las siguientes áreas:

- a) Pre-compresión de etileno.
- b) Compresión.
- c) Reactor.
- d) Separación de polímero/gas.
- e) Reciclo de gases.
- f) Extrusión.
- g) Peletizado.
- h) Desgasificación.
- i) Almacenamiento y empaque.

1.2.2.2.1 Área de Reacción.

Nos enfocaremos al área de reacción (Compresión, reactor y reciclo de gases), en la cual podemos identificar las siguientes zonas (Figura 1-6):

- **Reactor tubular:** Es donde se lleva a cabo la polimerización. Cuenta con tres áreas de inyección de los iniciadores a lo largo del reactor, aparte de la principal. La relación entre su longitud y su diámetro (L/D) es de 10,000 a 40,000. Opera a un rango de presión de 2000 a 3100 bar (2E+8 a 3.1E+8 Pa) y a una temperatura que va desde 150 a 170 °C (423.15-443.15 K), dependiendo del tipo de resina que se desea obtener (variación de índice de fluidez y densidad, principalmente). El reactor cuenta con una chaqueta cuya finalidad es mantener la temperatura en el rango de operación.
- **Válvula:** Permite mantener la presión del reactor dentro de los límites establecidos. Tiene un efecto directo sobre la resina obtenida porque el cambio de presión afecta la rapidez de reacción, provocando variación del tiempo de residencia por cambios de flujo, así como cambios de los coeficientes de temperatura por variación la velocidad (Zabisky et al., 1992).
- **Separador de alta presión:** Separa la resina de los gases. La resina pasa a un segundo separador, mientras que los gases son recirculados a la sección de Reciclo de alta presión.
- **Separador de baja presión:** Separa el resto de los gases de la resina, la cual pasa a la sección de extrusión. Los gases esta vez son recirculados a la sección de Reciclo de baja presión.
- **Reciclo de alta presión:** Los gases provenientes del separador de alta presión son apartados de las posibles impurezas semi-liquidas (ceras) y restos de sólidos del gas, para ser recirculados justo antes de la hipercompresión.
- **Reciclo de baja presión:** Los gases provenientes del separador de baja presión son apartados de las posibles impurezas líquidas (oligómeros y cadenas de menor peso molecular) y restos sólidos del gas, para ser llevados al área de compresión.
- **Compresión (Compresión primaria):** Comprime los gases del reciclo de baja presión hasta 255 bar (2.55E+7Pa). Posteriormente pasan a la hipercompresión.

- **Hipercompresión:** Los gases provenientes de la compresión y del reciclo de alta presión son comprimidos a altas presiones variantes entre 2000 y 3100 bar ($2E+8$ a $3.1E+8$ Pa).

Es importante recalcar que en todas las secciones se cuenta con intercambiadores, de los cuales algunos realizan cambios importantes de temperatura y otros se encargan de ajustes pequeños de calor. La Figura 1.6 muestra el proceso de producción, descrito por Cervantes (2000), para 90,000 ton/año (0.298 kg/s) de LDPE usando oxígeno o iniciadores tipo peróxidos, donde podemos apreciar claramente las zonas del área de reacción.

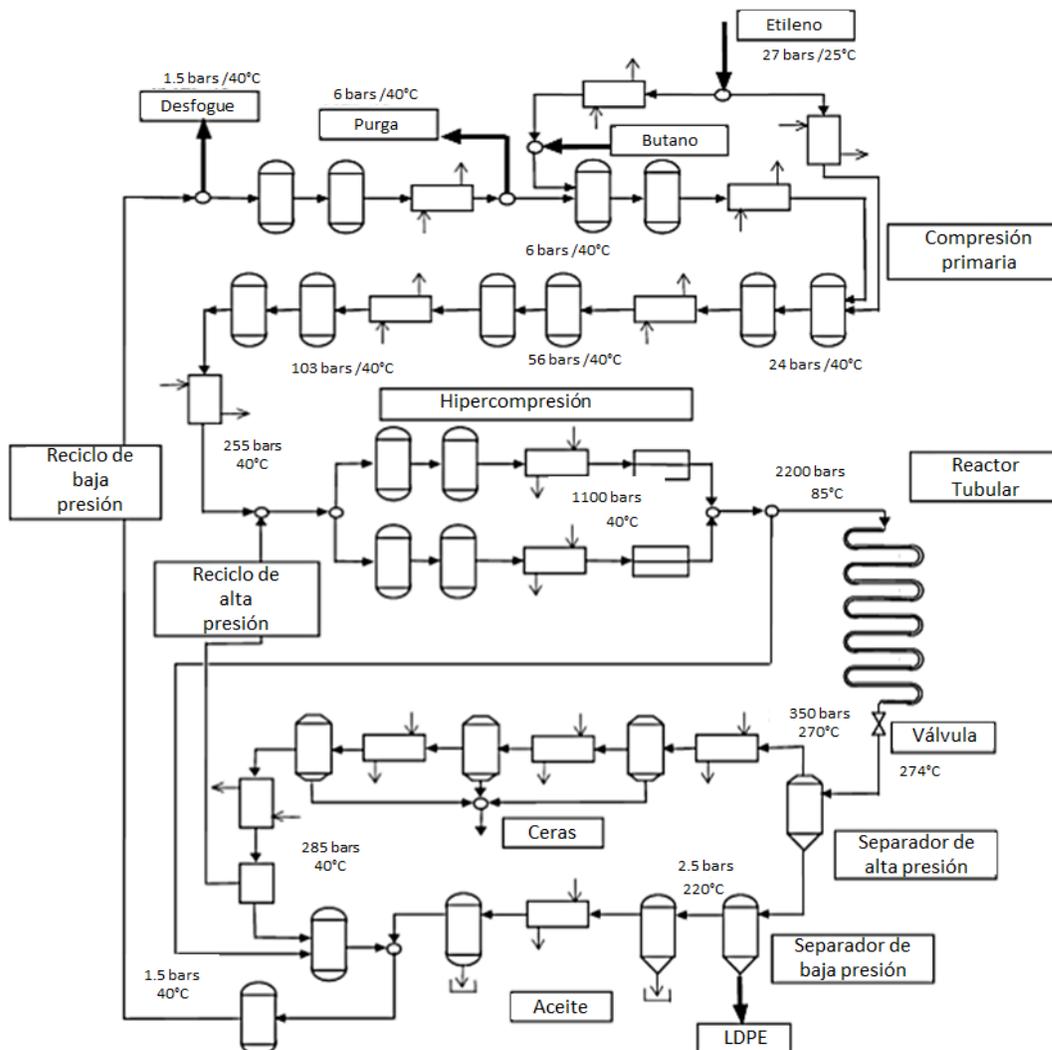


Figura 1-6. Diagrama de proceso de LDPE (Cervantes et al., 2000 y 2002).

Reprinted from Computers & Chemical Engineering, 24, A. Cervantes, S. Tonelli, A. Brandolin, A. Bandoni, L Biegler, Large-scale dynamic optimization of a low density polyethylene plant, Pages No.983-989 , Copyright (2016), with permission from Elsevier " Also Lancet special credit - "Reprinted from The Lancet, Vol. 24,A. Cervantes, S. Tonelli, A. Brandolin, A. Bandoni, L. Biegler ,Large-scale dynamic optimization of a low density polyethylene plant , Pages No. 983-989, Copyright (2016), with permission from Elsevier.

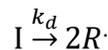
1.2.2.3 Catálisis. Mecanismo de reacción.

La polimerización de LDPE se lleva a cabo mediante un mecanismo de reacción por radicales libres. Toda polimerización por radicales libres cuenta con tres reacciones base: iniciación, propagación y terminación. En nuestro caso, el mecanismo incluye algunas reacciones cinéticas secundarias adicionales (Zabisky et al., 1992):

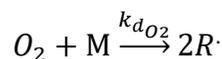
- Iniciación

Descomposición del iniciador en 2 radicales libres:

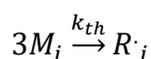
*Peróxido orgánico



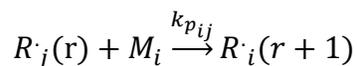
*Oxígeno (Fawcett et al., 1938)



Descomposición térmica debido a altas temperaturas:



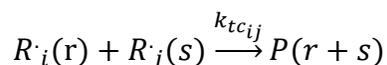
- Propagación



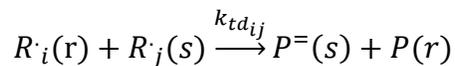
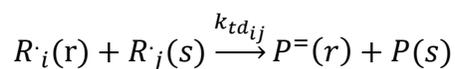
Para el caso de homopolimerización $j=i$.

- Terminación

*Combinación. Terminación de dos radicales.

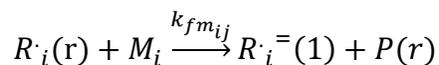


*Desproporción. Terminación de la cadena con doble enlace.

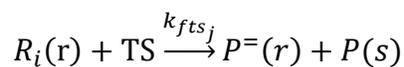


- Transferencia de cadena:

*Al monómero:

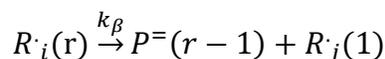


*Al agente de transferencia:

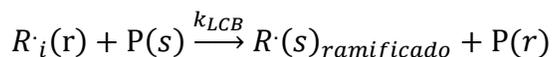


- Ruptura β en radicales terminales

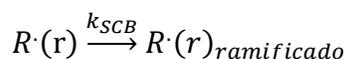
Es probable en las zonas de alta temperatura.



- LCB-Transferencia de cadena al polímero que conduce a ramificación de cadena larga

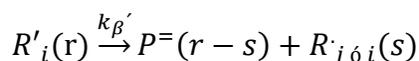
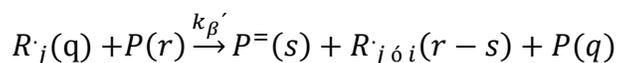


- SCB-Transferencia de cadena al polímero que conduce a ramificación de cadena corta



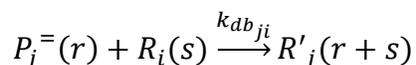
- Ruptura β en centros de radicales internos

El primer paso es la formación de un radical interno debido al ataque de un radical a una cadena de polímero muerto. Posteriormente ocurre la ruptura β , lo cual se resume en un solo paso:



- Reacción de doble enlace terminal

Esta reacción ocurre por el ataque de un radical libre de una cadena de polímero vivo al doble enlace terminal de una cadena de polímero muerto, originando un radical libre interno (R').



Nota: Otras reacciones que pueden ocurrir son las de descomposición explosiva a causa de las altas temperaturas, originando principalmente carbono e hidrógeno. Suelen suceder cuando existen presiones elevadas en el reactor.

1.2.3 Polietileno Lineal de Baja Densidad PELBD (LLDPE Linear Low Density Polyethylene).

El polietileno lineal de baja densidad o PELBD (LLDPE en inglés) es un polímero con un esqueleto lineal con ramificaciones laterales muy cortas y uniformes.

La baja densidad es provocada por las ramificaciones de la cadena de LLDPE. Estas pequeñas ramas hacen más difícil la organización de las cadenas poliméricas, dando como resultado una menor densidad al ocupar un mayor volumen. Además, provocan que su temperatura de fusión, su resistencia a la tracción y al agrietamiento sean superiores a las del polietileno de baja densidad. La longitud y posición de las cadenas laterales también afecta las propiedades del producto.



Figura 1-7. Cadena polimérica de LLDPE.

Las propiedades mecánicas del polietileno lineal de baja densidad (LLDPE) son superiores que las de LDPE y HDPE. Posee una excelente resistencia a la tracción, al impacto a temperaturas muy bajas (-95°C , 178.15 K), al rasgado, a la perforación o punción, fuerzas en el sellado al calor; en películas posee excelente elongación y al agrietado por efectos ambientales. La Tabla 1-6 resume las principales características del LLDPE.

*Tabla 1-6. Principales características del polietileno lineal de baja densidad.
20°=293.15K.*

Características Principales	
Grado de cristalización %	30 a 53
Densidad g/cm³(kg/m³) a 20°C	0.905 a 0.942 (905 a 942)
Temperatura de Cristalización rápida °C (K)	107-123 (380.15-397.15)
Estabilidad química	Buena
Esfuerzo de ruptura MPa (Pa) 0.25mm	25-45 (25E+5-45E+5)
Elongación %	300-830
Coeficiente de Expansión lineal (C⁻¹)	1.6*10 ⁻⁴

Las características de mayor influencia en sus propiedades físicas son el promedio másico de peso molecular, cristalinidad, distribución de pesos moleculares y el tipo de comonomero. El promedio másico de pesos moleculares es de 94,000 a 208,000 dalton ó g/mol, su polidispersidad va desde 1.6-3.5 y el grado de ramificación varia de 2-4%mol, como se mencionó previamente.

El proceso básico de obtención del polietileno lineal de baja densidad ocurre mediante la copolimerización de etileno con alfa-olefinas de 3 a 8 átomos de carbono, usando un catalizador de Ti y/o Cr. En México el proceso de mayor producción de polietileno de baja densidad lo lleva a cabo PEMEX en la planta Swing ubicada en el Complejo Petroquímico Morelos, donde se producen 4 tipos distintos como se muestra en la Tabla 1-7.

Tabla 1-7. Principales tipos de polietileno lineal de baja densidad comercializados en el país. **Fuente:** Polímeros. Productos. PEMEX petroquímica. **MI(190°C/2.16kg).**

Grado	Índice de fluidez g/10min	Densidad g/cm ³ (kg/m ³)	Uso
BDL92010S	1.0	0.9180 (918.0)	Coextrusión. Bolsas. Película tubular y sacos.
BDL92010C	1.0	0.9214 (921.4)	Coextrusión. Bolsas. Película tubular y sacos.
BDL92020S	2.0	0.9180 (918.0)	Películas para empaqueo. Bolsas. Película tubular. Coextrusión, películas estirables "poly-stretch".
BDL92020C	2.0	0.9214 (921.4)	Películas para empaqueo automático. Bolsas. Película tubular. Coextrusión.

El polietileno lineal de baja densidad (LLDPE) es comercializado en forma de pellets. Se denomina industrialmente como "resina de polietileno lineal de baja densidad". La Figura 1-8 muestra pellets de LLDPE producidos en la planta Swing.



Figura 1-8. Pellets de polietileno lineal de baja densidad.

1.2.3.1 Procesos de producción de LLDPE.

Los procesos de producción de LLDPE se clasifican de acuerdo a la fase en que se lleva a cabo la polimerización:

- Slurry: La polimerización se realiza en suspensión.
- En Solución: La polimerización ocurre en el solvente orgánico, se genera una solución.
- En fase Gaseosa: Existe un gas fluidizante encargado de homogenizar el lecho, no existe una fase líquida en la zona de polimerización.

En la Tabla 1-8 se muestra un resumen sobre el tipo de proceso y las compañías que los usan actualmente, o que son dueñas de las patentes.

Tabla 1-8. Tipos de proceso de polietileno lineal de baja densidad (Yamamoto,2016).

	Slurry		Solución	Gas	
Compañía	Philips Solvay	Dow Hoschst Mitsubishi Montediso Nissan Asahi	Dow Dupont Stamicarbon	AMOCO BASF	BP Union Carbide (actualmente Univation)
Reactor	Circuito (Loop)	Tanque Agitado Continuo (CSTR)	Tanque Agitado Continuo (CSTR)	Cama agitada	Lecho fluidizado
Diluyente/ Solvente	i-butano N-hexano	N-hexano	N-hexano ciclohexano		
Catalizador	Ti o Cr soportado	Ti soportado	Ti/V	Ti o Cr soportado	Ti o Cr soportado
Temperatura °C (K)	80-100 (353.15 -373.15)	80-90(353.15 - 363.15)	130-250 (403.17 -523.15)	700-1000 (973.15- 1273.15)	85-100(358.15- 373-15)
Presión Atm (Pa)	30-35 (3,039,750- 3,546,375)	8-35 (810,600- 3,546,375)	30-200 (3,039,750- 20,265,000)	20-35 (2,026,500- 3,546,375)	20-30 (2,026,500- 3,039,750)
Tiempo de residencia-h	1.5-2.5	2.0-.7	0.08-0.17		3-5

El proceso de producción simulado en esta tesis es el proceso Univation, para producción de polietileno lineal de baja densidad en fase gaseosa (proceso en lecho fluidizado) desarrollado por Union Carbide, en 1960. Las principales características de operación son $T=75$ a 110°C (348.15 - 383.15 K), cerca del punto de fusión del polímero, y a $P= 0.7$ a 2 MPa ($7e+4$ a $2e+5$ Pa).

La gran ventaja que presenta es su versatilidad, puesto que se pueden manejar distintas especificaciones técnicas del producto, desde polietileno de baja hasta de alta densidad, en base a las condiciones de operación (composición de la alimentación, temperatura y presión). El rango de densidad va desde 0.910 a 0.970g/cm^3 (910 - 970 kg/m^3), mientras que el índice de fluidez (MI) llega a ser menor de 0.01 hasta alcanzar un valor de $200\text{g}/10\text{min}$.

1.2.3.2 Descripción General del Proceso UNIVATION.

La tecnología Univation posee una gran flexibilidad al permitir obtener polietileno de distintos grados, desde HDPE hasta LLDPE, empleando un mismo reactor, solo variando temperatura, catalizador y comonomero, según sea el caso.

La base del proceso consiste en un reactor de lecho fluidizado con domo expandido, el cual es alimentado constantemente de las materias primas e inertes en la parte inferior, mientras que el catalizador y el cocatalizador se alimentan a la altura del área de reacción. El catalizador es activado con el cocatalizador para posteriormente formar la cadena polimérica con el etileno y con el comonomero. La resina formada es separada por acción de su peso y extraída para continuar con el proceso de extrusión. Los gases se extraen en la parte superior del domo, el cual gracias a su área expandida evita que los sólidos, catalizador o resina, formen parte del gas de recirculación. A continuación, es necesario que la recirculación posea presión y temperatura adecuadas, las cuales son ajustadas mediante un compresor y un intercambiador; antes de entrar al reactor se combinará con la materia prima de las líneas de alimentación del proceso (Figura 1-9).

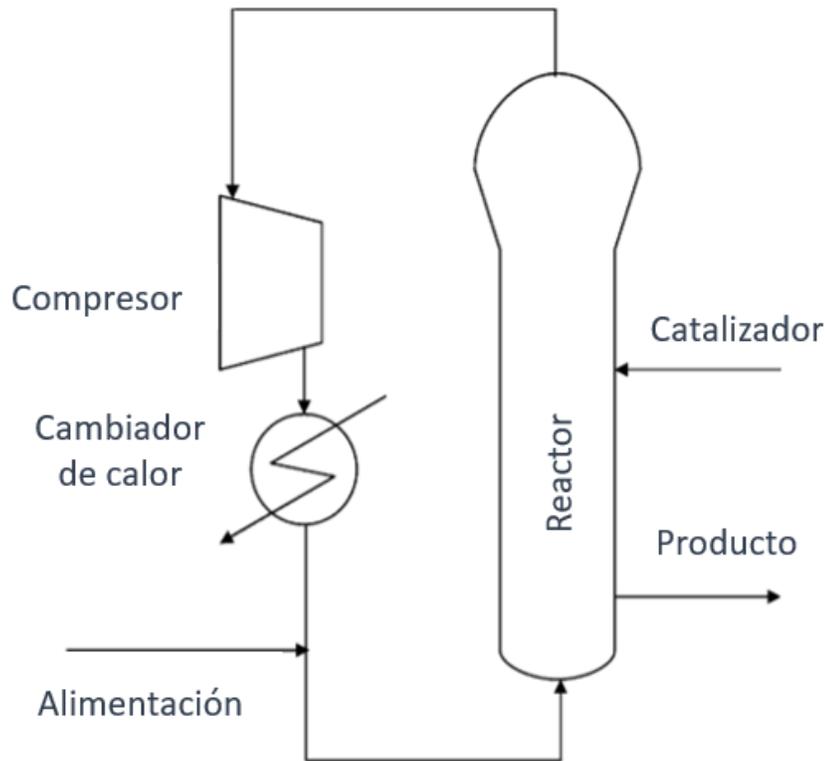


Figura 1-9. Base del proceso de reacción (Alizadeh, 2004). Reprinted from *Chemical Engineering Journal*, 97/1, Mahmood Alizadeh, Navid Mostoufi, Saeed Pourmahdian, Rahmat Sotudeh-Gharebagh, *Modeling of fluidized bed reactor of ethylene polymerization*, Pages No. 27-35, Copyright (2016), with permission from Elsevier "Also Lancet special credit- "Reprinted from *The Lancet*, Vol. 97, Mahmood Alizadeh, Navid Mostoufi, Saeed Pourmahdian, Rahmat Sotudeh-Gharebagh, *Modeling of fluidized bed reactor of ethylene polymerization*, Pages No. 27-35, Copyright (2016), with permission from Elsevier.

En el reactor existen dos zonas:

- 1- Zona de reacción: Sección tubular del reactor donde se lleva a cabo la reacción. Su altura es de 6 a 7.5 veces su diámetro.
- 2- Zona Expandida: Sección expandida cuyo fin es disminuir la velocidad del gas, el sólido que es arrastrado tiende a caer. El radio es alrededor de 1 a 2 veces su altura.

Otras consideraciones de diseño que deben tomarse en cuenta son:

- El flujo de gas fluidizante debe ser entre 2 a 6 veces el flujo mínimo requerido para homogenizar el lecho, con el fin de evitar conglomeraciones debido a puntos calientes.
- El catalizador es inyectado entre $\frac{1}{4}$ a $\frac{3}{4}$ de la altura de la cama.

El proceso tiene como materias primas etileno (monómero), 1-buteno y 1-hexeno (comonómeros) e hidrógeno; el catalizador es tetracloruro de titanio (TiCl_4) y el cocatalizador es tetraetilaluminio; los inertes son: isopentano (medio fluidizante) y nitrógeno (de purga y enfriamiento). Además, se usan nitrógeno de alta presión y aire para instrumentos de medición y control.

El proceso basado en la tecnología Univation requiere purificación previa de los componentes suministrados en el límite de batería por medio de filtros. El acondicionamiento requiere también al uso de bombas y cambiadores de calor. Debido a que el catalizador empleado es muy sensible a la humedad y compuestos de alta polaridad, es esencial la eliminación de agua en el proceso de purificación por medio de membranas; de lo contrario, el envenenamiento del catalizador sería a tal grado que el proceso dejaría de ser rentable. El nitrógeno sería el único componente que no requeriría purificación adicional a su obtención a partir del aire.

Posteriormente, es importante que las corrientes que alimentan los reactivos e inertes al proceso tengan una presión mayor a la de la corriente de recirculación a donde serán suministrados, lo cual se logra mediante el uso de bombas.

La temperatura es determinante en la reacción para lograr que el producto cumpla con las especificaciones deseadas, por lo cual será necesario el uso de cambiadores e intercambiadores de calor, estos últimos ayudan a aprovechar las corrientes calientes. El reactor cuenta con múltiples termómetros que se encargan de monitorear la temperatura. Es importante recalcar que la polimerización es muy exotérmica y un descontrol de la temperatura podría causar una explosión. Además, de las pérdidas materiales, podría haber pérdidas humanas. Cuando se encuentra

en operación el reactor debe estar totalmente aislado del exterior, fuera de la respectiva alimentación y la salida. Los termómetros medirán la temperatura de la pared externa del reactor, pero se estima que exista un máximo de diferencia de 5°C respecto a la temperatura de la reacción.

Se considera que el lecho es homogéneo, debido a que la variación de temperatura en distintos puntos de la zona de reacción es de 2°C (2K) máximo.

La resina formada es retirada constantemente, pasando al sistema de pelletizado. La sección expandida del reactor tiene como fin disminuir la velocidad del gas por lo cual la resina arrastrada por el gas tiende a caer. El gas es extraído por la parte superior del domo y comprimido para su uso como gas de reciclo.

Los pellets obtenidos serán almacenados en costales para su venta. Dependiendo del cliente, la resina deberá ser adicionada con algunos aditivos que aseguren su estabilidad química, color y resistencia a condiciones atmosféricas.

El catalizador es muy reactivo; es explosivo al contacto con el agua, por lo cual debe ser almacenado y suministrado evitando humedad. El lugar debe estar estrictamente restringido y contar con efluentes independientes al resto de la planta.

Se emplea agua como medio de enfriamiento. Este sistema también se emplea para calentar el reactor en el arranque.

1.2.3.3 Catálisis. Mecanismo de reacción.

La polimerización se lleva a cabo mediante un mecanismo de reacción de coordinación, más específicamente mediante un mecanismo Ziegler-Natta, el cual se describe a continuación (Figura 1-10):

El proceso en conjunto inicia con la activación del catalizador, donde un cloro del $TiCl_4$ es sustituido por una cadena de etileno debido a la doble interacción del orbital libre en el Ti con el grupo Etil y el Cl con el Al del tetraetilaluminio. Posteriormente el orbital libre del Titanio interactúa con el doble enlace. Los electrones del doble enlace atacan al Ti; éste desplaza al grupo R', el que a su vez

forma un enlace covalente homo con el electrón que quedó libre. Aquí radica la importancia de haber seleccionado al tetraetilaluminio. Este proceso se repite en forma similar, hasta la desactivación del catalizador o de la cadena radicalaria. En la Figura 1-10, para el Etileno R' es igual a H, mientras que para el buteno R' es igual CH₂CH₃ (Soga & Shiono, 1997; Vaughan et al., 2012).

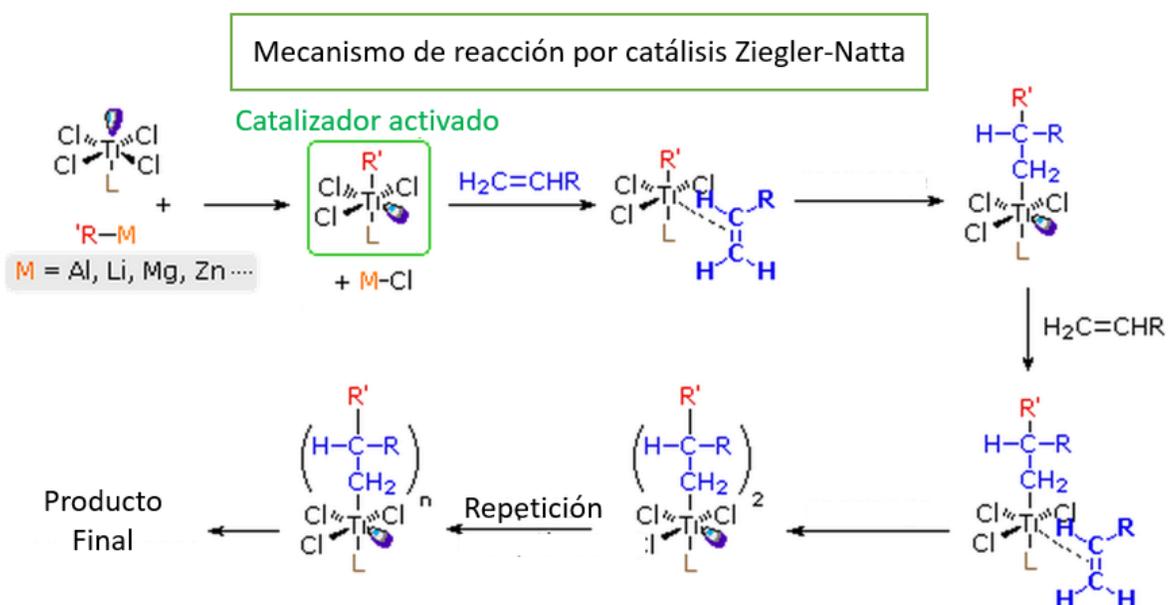
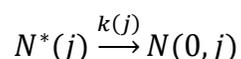


Figura 1-10. Mecanismo de reacción Ziegler-Natta. Reprinted with permission from Virtual Textbook of Organic Chemistry. William Reusch. Boundless.com.

McAuley et al. (1990) propusieron un mecanismo de reacción considerando los efectos del monómero terminal, sitios activos múltiples y diferentes comonómeros, similar al propuesto por Kissin (1987) y Carvalho (1989).

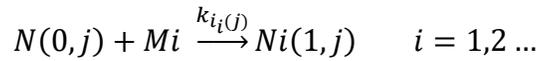
Formación e iniciación de sitios activos

Formación de sitios activos (j) por reacción del catalizador con el cocatalizador:



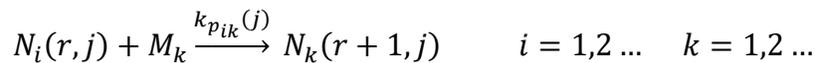
Donde N* representa un sitio potencialmente activo.

Iniciación de polimerización: El catalizador activo N con cero moléculas de monómero con un sitio activo j ataca a una molécula de monómero Mi.



Propagación

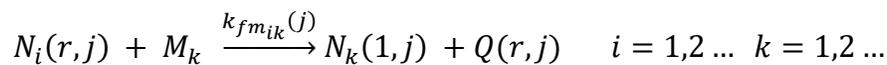
Una cadena polimérica viviente N, con el grupo terminal i de una longitud r con un sitio activo tipo j, reacciona con un monómero k para generar una cadena de polímero viviente con un grupo terminal k que ahora tendrá un número de monómeros r+1, con un sitio activo del tipo j.



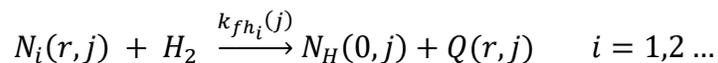
Transferencia de cadena

La transferencia de cadena puede ser:

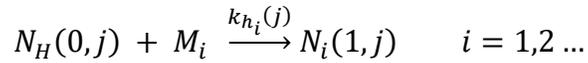
- *Transferencia de cadena al monómero:* Una cadena de polímero viviente N, con un grupo terminal tipo i, que contiene un número de monómeros r, en un sitio activo tipo j reacciona con un monómero k, existiendo una transferencia del radical al monómero k, por lo que se genera una cadena de polímero muerto de longitud r y del sitio activo tipo j.



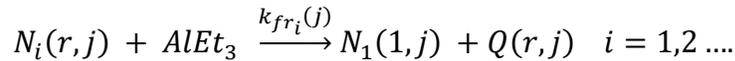
- *Transferencia de cadena a H₂:* La cadena de polímero viviente N, con longitud r del sitio activo j, transfiere el radical al hidrógeno, generando el polímero muerto correspondiente.



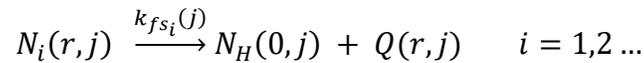
La especie N_H puede reiniciar la polimerización al reaccionar con un monómero o con el propio cocatalizador.



- *Transferencia de cadena al cocatalizador:* La cadena de polímero viviente transfiere el radical al cocatalizador y genera la cadena de polímero muerto correspondiente.

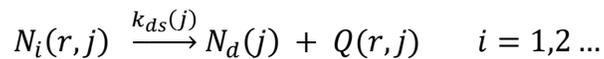


- *Transferencia de cadena espontánea:* La cadena de polímero viviente pierde un hidrógeno radical y se obtiene una cadena de polímero muerto.



Desactivación espontánea de reacción.

Los sitios activos decaen espontáneamente si se originan a partir de una cadena viviente. Además, se genera una molécula de polímero muerto. Al contrario, si proviene de un sitio activo sin reaccionar, o de un hidrógeno radical, simplemente genera un sitio inactivo.



Nota: También incluye contaminación por monóxido de carbono u otras impurezas, mas para esta simulación no son tomadas en cuenta.

1.3 Objetivo y alcance.

El objetivo de esta tesis es desarrollar la simulación de los dos principales procesos de producción de polietileno de baja densidad en México, con el uso del simulador comercial ASPEN PLUS y con el apoyo del simulador comercial Predici®.

Se inició esta tesis con una breve descripción del panorama mundial de producción y consumo de polietileno. Posteriormente se describieron características generales de estos polímeros e información de los procesos industriales de producción de polietileno de baja densidad. A continuación, se prosigue con la descripción del desarrollo de la simulación de los dos procesos, dedicando un capítulo para presentar los resultados y su análisis para cada uno, comparando la primera simulación con la información reportada en la literatura y el segundo con datos de planta. Finalmente, se plasman las conclusiones obtenidas y se enlistan las referencias consultadas.

2. BASES DEL PROCESO DE SIMULACIÓN

Para simular los reactores de polimerización de LDPE y LLDPE se empleó el paquete "Polymers" del simulador comercial ASPEN PLUS, versiones 8.2 y 8.8. Este paquete incluye:

- Base de datos.
- Propiedades de métodos y modelos.
- Modelos cinéticos de reacciones.

Se compone principalmente por tres módulos:

- Caracterización de la estructura molecular del polímero.
- Cálculo de propiedades reológicas y mecánicas.
- Seguimiento de estas propiedades a lo largo del diagrama de flujo.

Es capaz de simular todo el proceso de producción de polímeros:

1. Síntesis y purificación de monómero.
2. Polimerización.
3. Separación.
4. Procesamiento.

La versión 8 de ASPEN PLUS incluye, a diferencia de versiones anteriores, la oportunidad de simular al polímero como un sólido polimérico.

El desarrollo de la simulación se llevó a cabo con los siguientes pasos:

1. Creación del documento de simulación.
2. Especificación de componentes.
3. Especificación del polímero.
4. Selección del método de cálculo de propiedades termodinámicas.
5. Reacción de polimerización.
6. Simulación del proceso de polimerización.
7. Simulación del proceso global con resultados validados.

En la Figura 2-1 se muestra el desglose de los principales requerimientos para simular un proceso industrial de polimerización (ASPEN PLUS, versión 8.8).

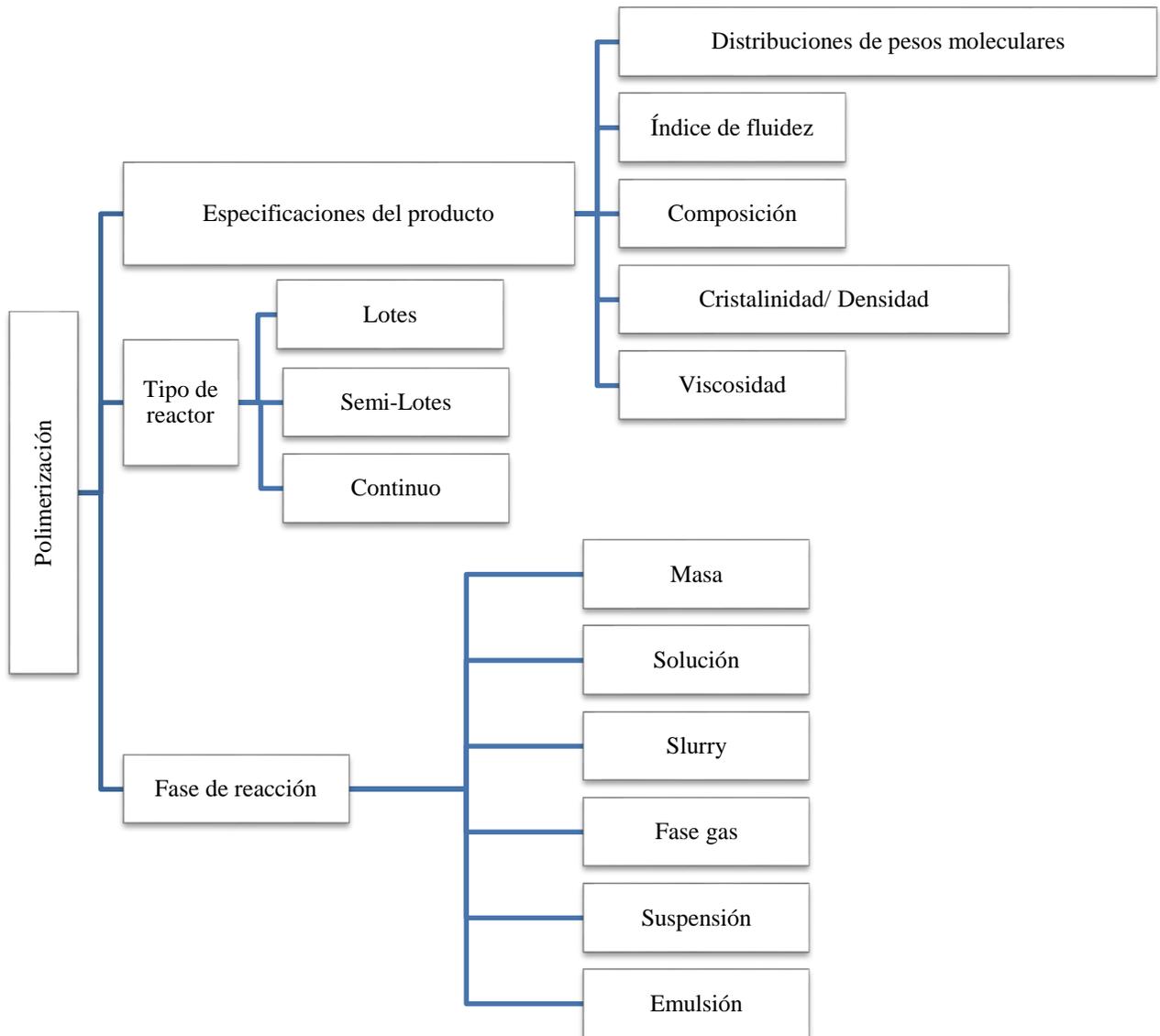


Figura 2-1. Requerimientos principales que cubre ASPEN PLUS para la simulación del proceso de polimerización.

3. SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIETILENO DE BAJA DENSIDAD (LDPE)

En esta sección se desarrolla la simulación del proceso de producción de polietileno lineal de baja densidad (LDPE) en fase gas en base a la tecnología LupoTech.

3.1 Creación del documento de simulación.

Existe la opción de generar la simulación en el paquete “Polymers” en 3 sistemas de unidades: Ingles, Métrico decimal y Met-C-Bar ($^{\circ}\text{C}$, bar, kg/h, kcal/h, l/min). En el ambiente de ASPEN PLUS fue seleccionado el sistema de unidades Met-C-Bar, como muestra la Figura 3. 1.

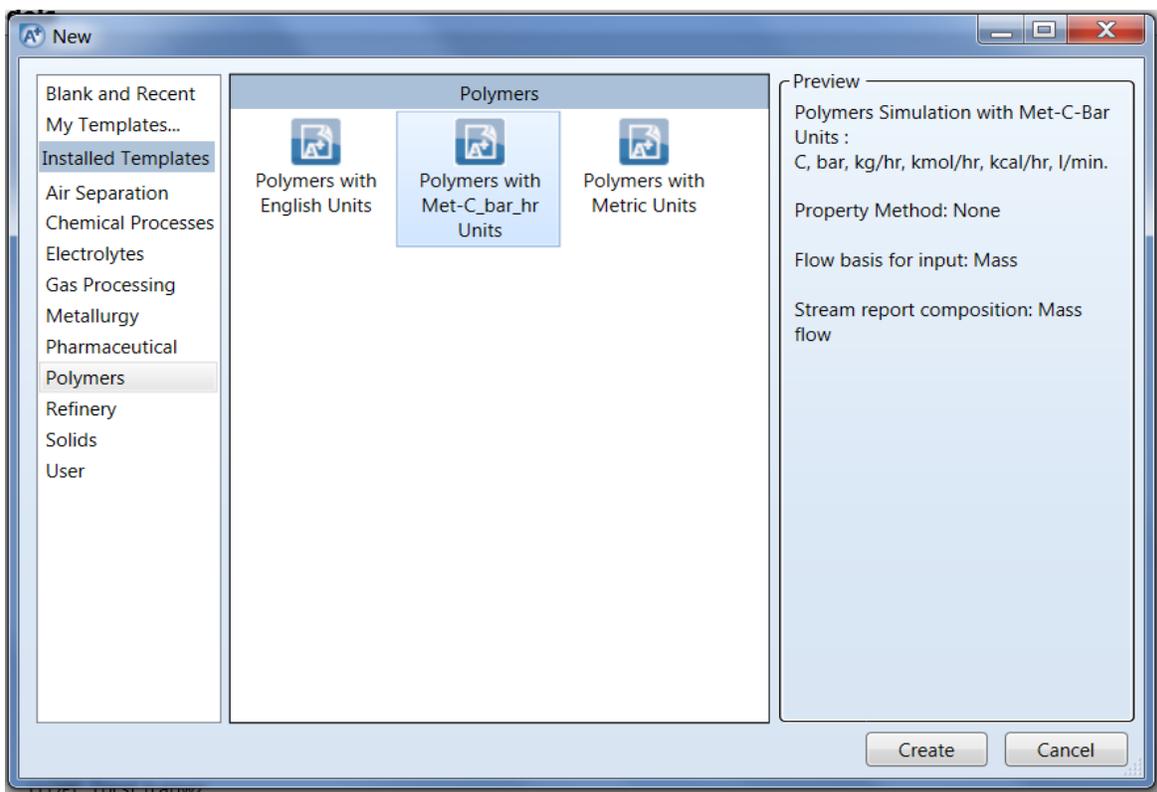


Figura 3-1. Ventana de selección del paquete Polymers de ASPEN PLUS.

3.2 Especificación de componentes.

Al crear el archivo, ASPEN direcciona al usuario a la ventana de propiedades, donde se especifican los componentes, el polímero y el método de cálculo de propiedades termodinámicas (Figura 3-2).

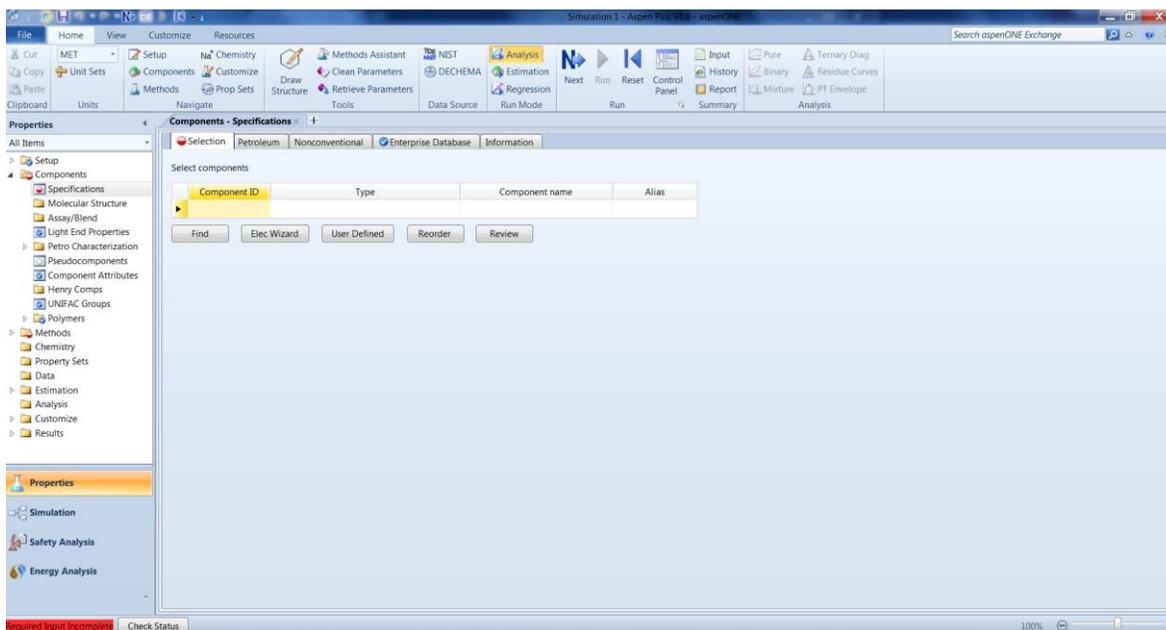


Figura 3-2. Ambiente de simulación de propiedades.

De acuerdo a su función los componentes se clasifican en:

3.2.1 Materia Prima.

Etileno (27 bar y 25°C, 2.7E+6 Pa y 298.15K, condiciones normales de entrada): Reactivo base de la polimerización. Compuesto orgánico inflamable de 2 carbonos. Presenta doble ligadura; en condiciones normales se encuentra en estado gaseoso.

3.2.2 Iniciador.

Peróxidos orgánicos (2200 bar y 40 °C, 2.2E+8Pa y 314.15K): Compuestos orgánicos que contienen un enlace oxígeno-oxígeno originando el grupo peróxido R-O₂-R'. R' puede ser una cadena orgánica o hidrógeno (hidroperóxidos). Se encuentran en estado sólido a condiciones ambientales.

Oxígeno (2200 bar y 40°C, 2.2E+8Pa y 314.15K): Compuesto de dos átomos de oxígeno unidos con doble enlace. En condiciones ambientales se encuentra en estado gaseoso. Forma aproximadamente el 22% mol de la atmosfera terrestre.

3.2.3 Agente de transferencia de cadena.

Butano (27 bar y 25°C, 2.7E+6 Pa y 298.15K, condiciones normales de entrada): Gas inflamable formado por 4 carbonos unidos únicamente con enlaces sencillos, sin ramificaciones.

En la Figura 3-4 se observan los componentes ya especificados en el ambiente de ASPEN PLUS, siendo congruentes con el orden de clasificación anterior.

Component ID	Type	Component name	Alias
ETHYLENE	Conventional	ETHYLENE	C2H4
BUTANE	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1
C2H4-R	Segment	ETHYLENE-R	C2H4-R
LDPE	Polymer	LOW-DENSITY-POLY(ETHYLENE)	LDPE
O2	Conventional	OXYGEN	O2
IN1	Conventional	BENZOYL-PEROXIDE	C14H10O4
IN2	Conventional	DI-T-BUTYL-PEROXIDE	C8H18O2
IN3	Conventional	N-BUTYLHYDROPEROXIDE	C4H10O2-D10
IN4	Conventional	BENZOYL-PEROXIDE	C14H10O4
CH4	Conventional	METHANE	CH4
H2O	Conventional	WATER	H2O

Figura 3-3. Especificación de componentes. *Monómero, polímero, iniciadores.*

El simulador requiere la especificación de los fragmentos que conforman el polímero. En el caso del polietileno, el fragmento es el monómero de etileno (C₂H₄), con el doble enlace diseminado en dos radicales libres (Figura 3-4).



Figura 3-4. Fragmento C₂H₄-R.

La Figura 3-5 muestra al segmento C₂H₄-R debajo del monómero y comonómero como recomienda el Manual de ASPEN PLUS V.7.

Component ID	Type	Component name	Alias
ETHYLENE	Conventional	ETHYLENE	C2H4
BUTANE	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1
C2H4-R	Segment	ETHYLENE-R	C2H4-R
LDPE	Polymer	LOW-DENSITY-POLY(ETHYLENE)	LDPE
O2	Conventional	OXYGEN	O2
IN1	Conventional	BENZOYL-PEROXIDE	C14H10O4
IN2	Conventional	DI-T-BUTYL-PEROXIDE	C8H18O2
IN3	Conventional	N-BUTYLHYDROPEROXIDE	C4H10O2-D10
IN4	Conventional	BENZOYL-PEROXIDE	C14H10O4
CH4	Conventional	METHANE	CH4
H2O	Conventional	WATER	H2O

Figura 3-5. Especificación del segmento.

3.3 Especificación del polímero.

La especificación del polímero se divide en dos secciones por el tipo de información requerida:

3.3.1 Identificación del segmento: Intermedio (Repeat) o Final (End).

La primera parte de la especificación del polímero fue volver a definir el segmento como intermediario (Figura 3-6).

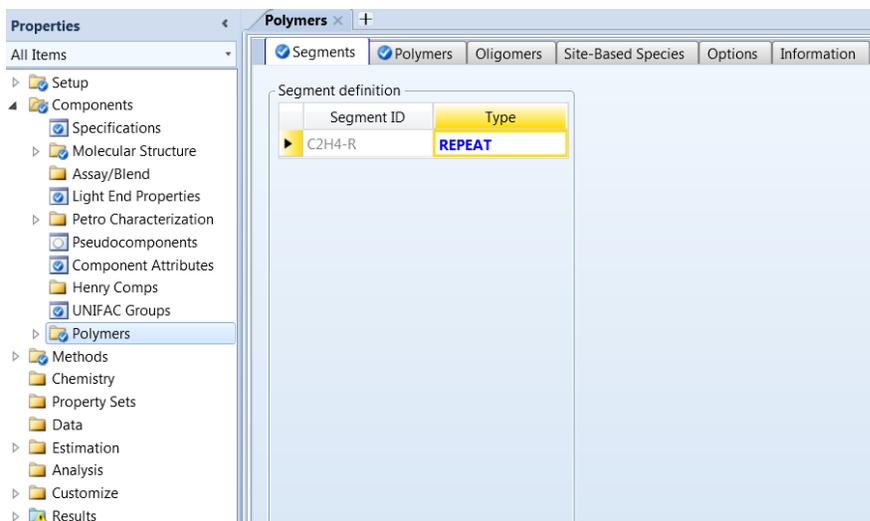


Figura 3-6. Definición de tipo de segmentos.

El segmento C2H4-R es un segmento intermedio, el cual se repite a lo largo de toda la cadena polimérica. Las constantes cinéticas que definiremos más adelante ya consideran el efecto del grupo terminal, por lo que no es necesario definirlo en esta sección.

3.3.2 Identificación del polímero.

En la pestaña “Polymers”, Figura 3-7, se identificó:

1. Polímero: LDPE.
2. Tipo de polimerización: radicales libres.
3. Lista de atributos: promedio en número de tamaño de cadena (DPN), promedio peso de peso molecular (MWW) y polidispersidad (PDI).

La lista automática de atributos corresponde al grupo de atributos “Free-radical selection”, siendo coherente con el mecanismo de polimerización por radicales libres.

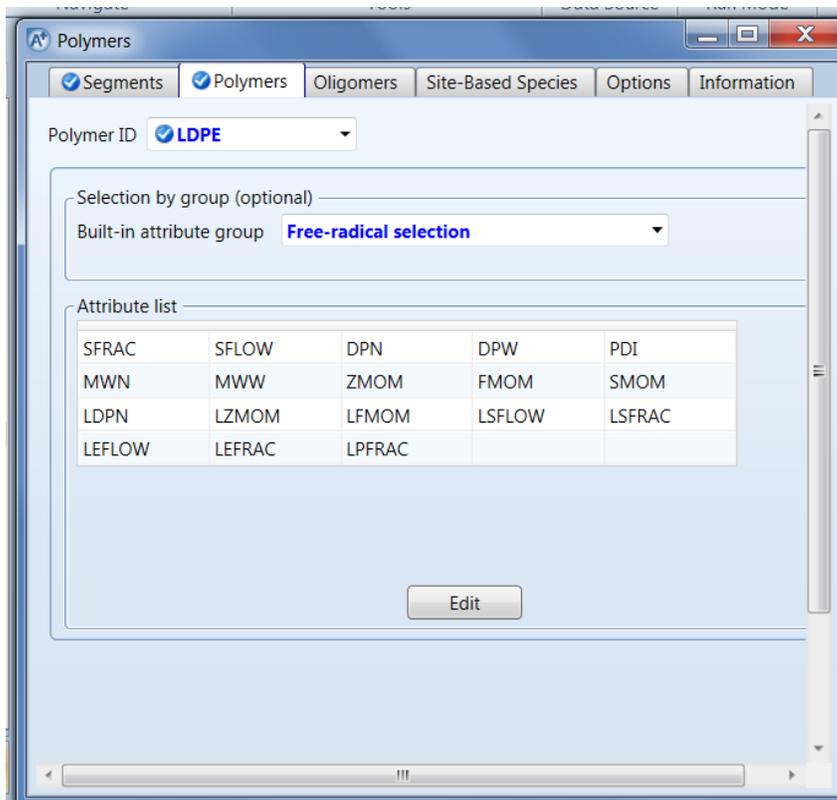


Figura 3-7. Especificación del tipo de reacción.

3.4 Selección del método de cálculo de propiedades termodinámicas.

Los polímeros no son regidos por las mismas tendencias que las moléculas de bajo peso molecular. A pesar de la extensa base de datos que contiene ASPEN PLUS, se requiere información adicional. Existen dos maneras de cubrir esta necesidad: por la inserción de valores de tablas, o mediante información experimental.

El modelo PC-SAFT requiere como información mínima número, diámetro y energía del segmento, así como parámetros de interacción binaria. Los valores fueron reportados por Gross y Sadowski (2002). Sin embargo, en este caso el ajuste no fue el deseado por lo que es necesaria la información experimental: densidades de líquidos y presiones de vapor, tanto como del polímero como del iniciador.

Para el modelo SAFT la información mínima es el número, volumen y energía del segmento. Estos parámetros fueron reportados por Huang y Radosz (1990).

Se requiere la misma información experimental que en PC-SAFT más la capacidad calorífica en estado líquido.

En el caso del modelo termodinámico de Sanchez-Lacombe es necesario adicionar densidad, temperatura y presión del segmento, polimero e iniciadores. Para ello se empleó la información referente en la literatura de ASPEN PLUS V8.4 (Tabla 3-1).

Tabla 3-1. Información básica para el modelo termodinámico Sanchez-Lacombe.

Parámetro	Unidad	Componente					
		C2H4-R	LDPE	IN1	IN2	IN3	IN4
SLTSTR	K	333	667.7	530	530	530	530
SLPSTR	Pa	2.4E+8	3.5E+8	3.04E+8	3.04E+8	3.04E+8	3.04E+8
SLRSTR	kg/cum	631	894	1120	1120	1120	1120

En la Figura 3-8 se muestra el método seleccionado en el ambiente de ASPEN PLUS:

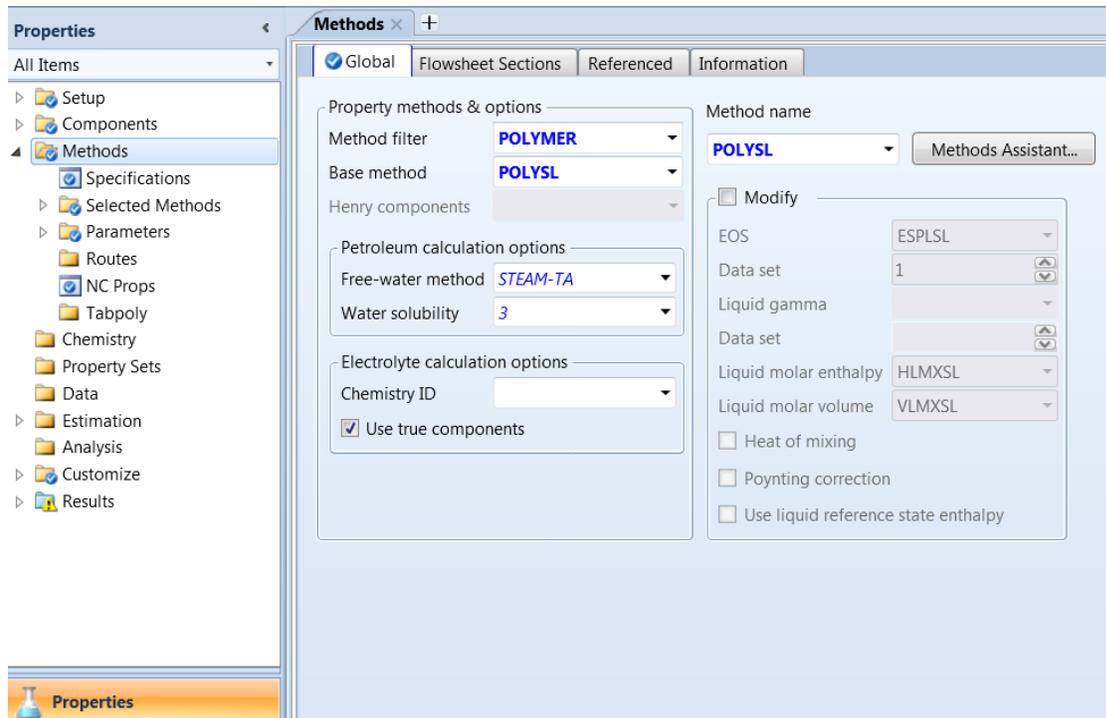


Figura 3-8. Selección del método termodinámico.

En el Anexo I se incluye la ecuación de estado de método termodinámico.

3.4.1 Ejecución del cálculo de propiedades.

Al contar con toda la información básica se ejecutó la simulación de propiedades. La exactitud y coherencia de la simulación depende en gran parte del uso adecuado de los modelos termodinámicos. Como se muestra en la Figura 3-9, en la esquina inferior izquierda la leyenda “Results Available” indica que fue posible el cálculo de manera coherente.

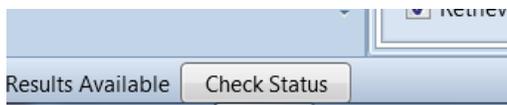


Figura 3-9. Resultados disponibles.

3.5 Definición de la reacción química.

El siguiente paso fue continuar con la simulación. Una vez en el ambiente de simulación nos dirigimos a la sección de reacción “Reaction”, posteriormente “New”, donde creamos una nueva reacción química, para este caso por radicales libres.

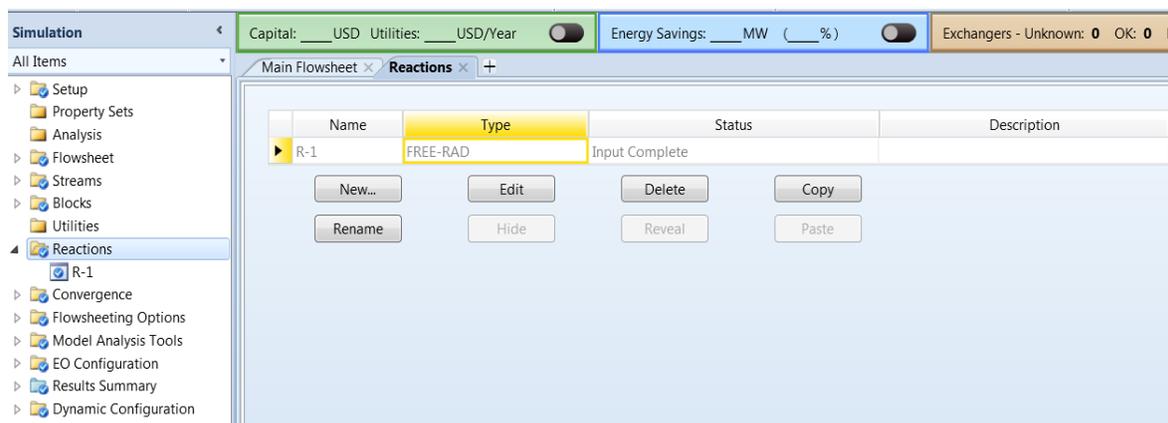


Figura 3-10. Creación de la reacción química.

Se prosiguió a la selección de especies: LDPE como polímero, etileno como monómero, con su respectivo segmento, cuatro iniciadores y buteno como agente de transferencia de cadena. Posteriormente se recurrió a la generación automática de reacciones (Figura 3-11).

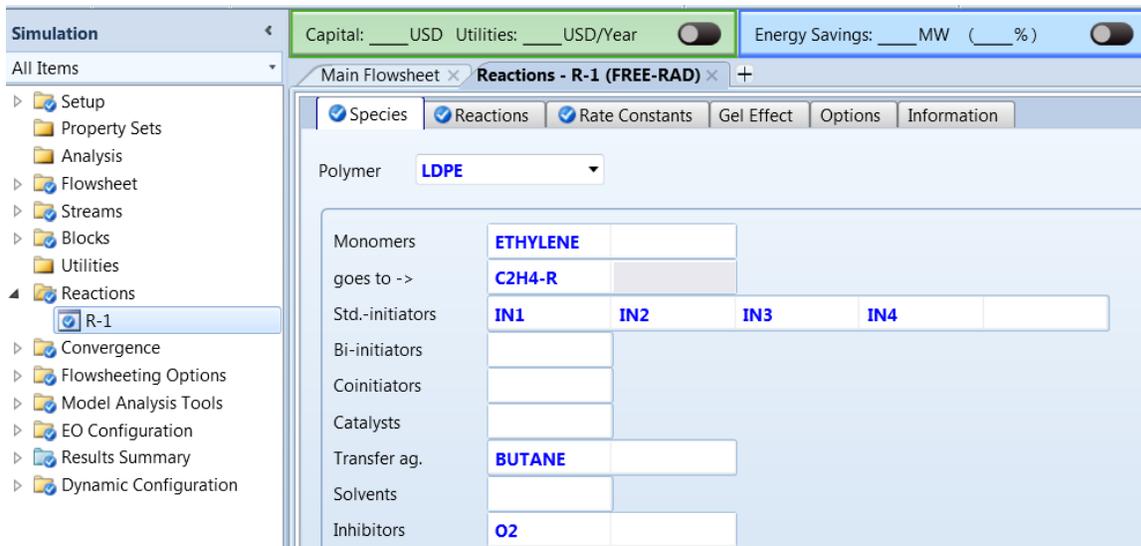


Figura 3-11. Selección de componentes clave.

Al finalizar, las reacciones químicas consideradas son las que se muestran en la Figura 3-12.

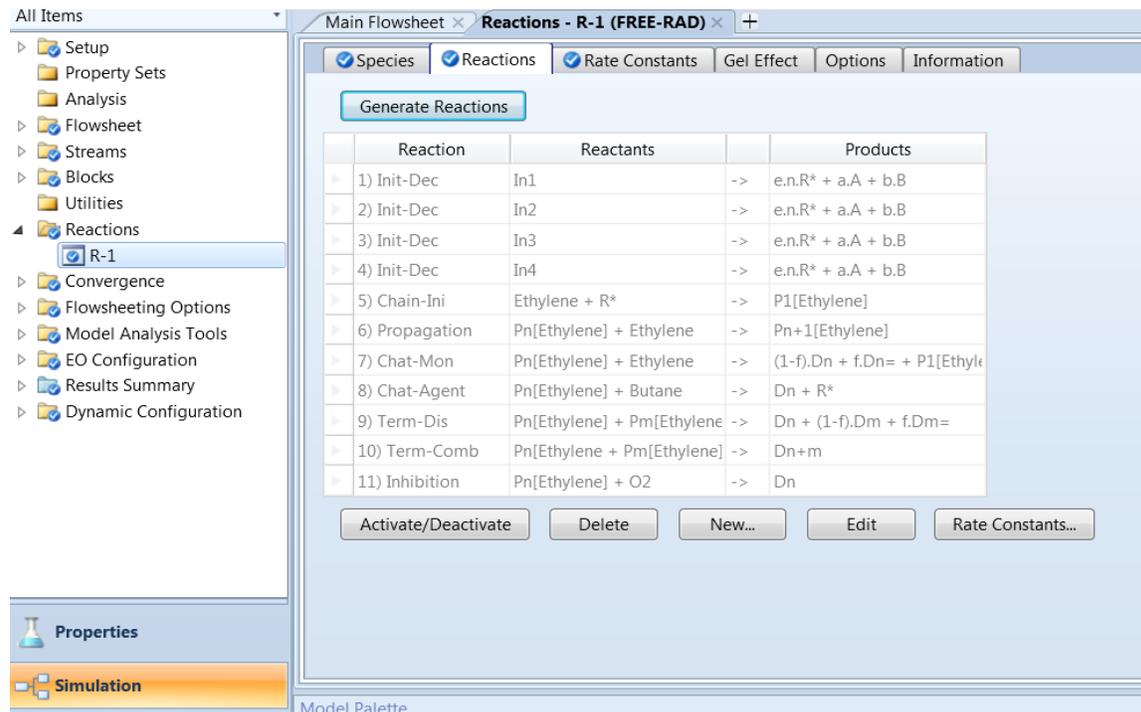


Figura 3-12. Comprobación de las reacciones de polimerización.

El orden en que son seleccionados los iniciadores es el mismo con el que aparecen en la generación de reacciones.

En la Tabla 3-2 se enlistan las constantes cinéticas de reacción consideradas.

Tabla 3-2. Constantes cinéticas.

Tipo	Comp1	Comp2	Pre-Exp (1/s)	Energía de Act. J/Kmol	Fuente
Iniciación Termal	IN1		3.81E-06	1.27E+08	**
Iniciación Termal	IN2		3.79E-09	1.53E+08	**
Iniciación Termal	IN3		0.043		***
Iniciación Termal	IN4		0.043		***
Iniciación de cadena	Etileno	Etileno	3.57E-04		*
Propagación	Etileno	Etileno	26.2		*
Terminación por desproporción	Etileno	Etileno	12.6		*

*Zabisky et al. (1992). **Datos extraídos de ASPEN PLUS.

***Datos basados en Cervantes et al. (2000).

La captura de las constantes se realizó en la pestaña “Rate Constants”. Por cada grupo de constantes se creó una reacción independiente.

Type	Comp 1	Comp 2	Pre-Exp	Act-Energy	Act-Volume	Ref. Temp.	No. Rads	[n]	TDB fraction [f]	Gel Effect	Efficiency [e]	Efficiency Gel Effect
INIT-DEC	IN1		3.81e-06	1.2721e+08	0	C	2			0	0.4	0
INIT-DEC	IN2		3.79e-09	1.5346e+08	0		2			0	0.4	0
INIT-DEC	IN3		0.043	0	0		2			0	0.45	0
INIT-DEC	IN4		0.043	0	0		2			0	0.35	0
CHAIN-INI	ETHYLENE		0.000356796	0	0					0		
PROPAGATION	ETHYLENE	ETHYLENE	26.2	0	0					0		
CHAT-MON	ETHYLENE	ETHYLENE	0	0	0			1		0		
CHAT-AGENT	ETHYLENE	BUTANE	0	0	0					0		
TERM-DIS	ETHYLENE	ETHYLENE	12.6	0	0			1		0		
TERM-COMB	ETHYLENE	ETHYLENE	0	0	0					0		
INHIBITION	ETHYLENE	O2	0	0	0					0		

Figura 3-13. Constantes cinéticas.

Para la comprobación del ajuste de parámetros cinéticos, se simuló el reactor considerando el flujo de entrada más el flujo de recirculación, sin mostrarla físicamente. El reactor simulado cuenta con una entrada de materia prima, iniciador y agente de transferencia con una sólo salida, como se muestra en la siguiente Figura 3-14.

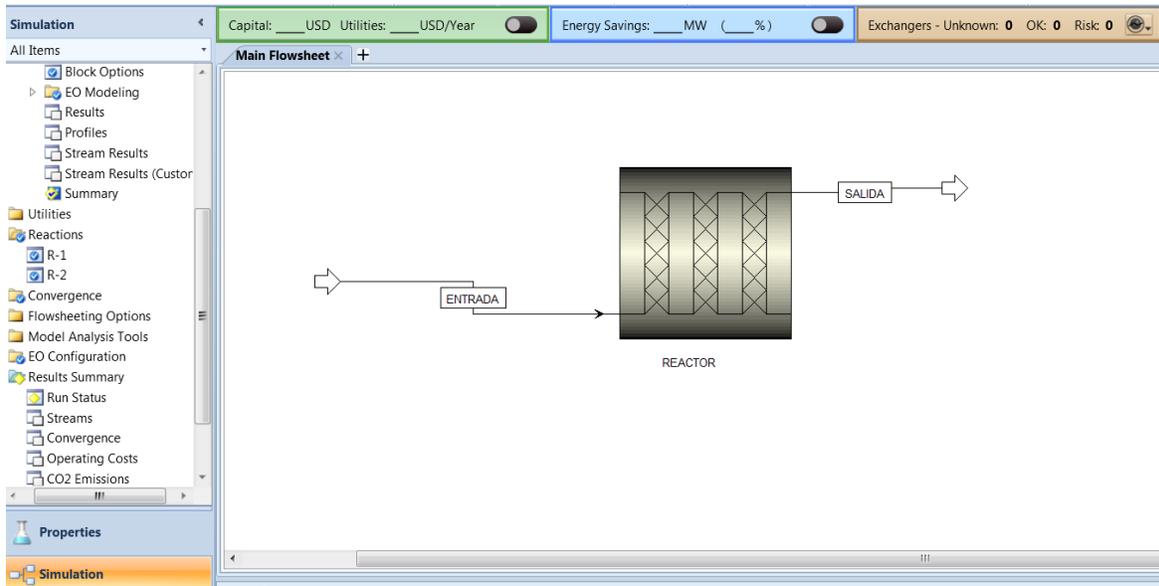


Figura 3-14. Reactor sin recirculación.

Las condiciones de entrada al reactor son 85 °C (358 K) con una presión de 2200bar (2.2E+8 Pa). El reactor se operó en condiciones adiabáticas. Posteriormente se consideró una corriente de transferencia de energía que evitaba que la temperatura se elevara.

En la Tabla 3-3 se muestra el balance de materia generado con el arreglo anterior. Es importante señalar que esta aproximación no aseguró el cumplimiento de las condiciones del proceso general, pero es un primer avance para el diseño del proceso. Es la manera de darnos cuenta rápidamente si los cálculos termodinámicos, debido a los datos que alimentamos en la sección de propiedades, son coherentes o si se requiere de mayor información al respecto.

Tabla 3-3. Balance de materia másico del reactor sin recirculación.

Componente	ENTRADA (kg/h)	SALIDA (kg/h)
ETILENO	12334	0
LDPE	0	12334
IN1	65	65
IN2	65	65
IN3	65	65
IN4	65	65
O2	0	0
BUTANO	12	12
CH4	0	0
Total	12606	12606

En la Figura 3-3 se muestra la distribución en peso de pesos moleculares generada por la simulación.

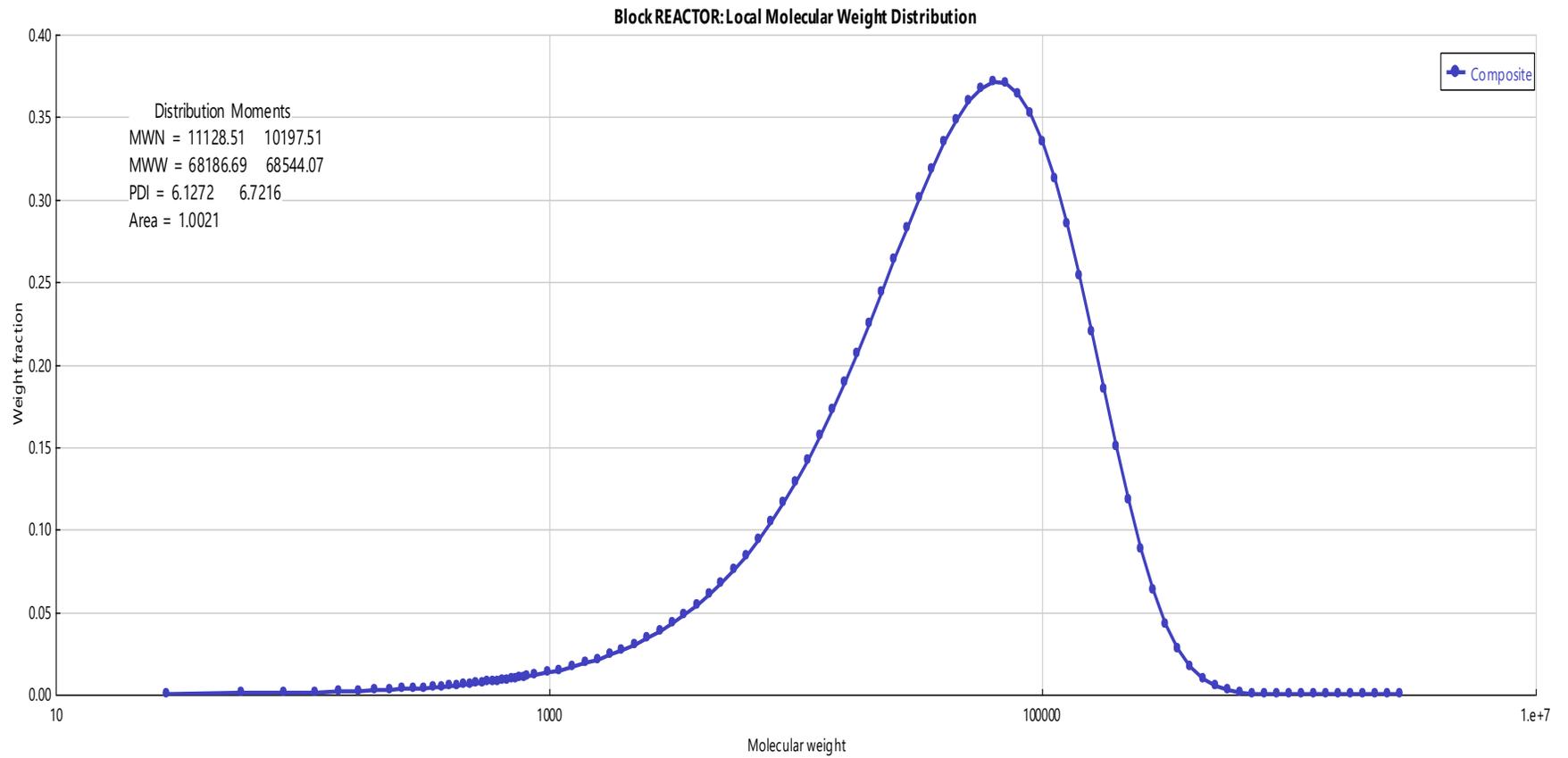


Figura 3-15. Distribución en peso de pesos moleculares.

4. SIMULACIÓN DEL PROCESO GLOBAL DEL LDPE

El proceso simulado es el reportado por Cervantes et al. (2000), Figura 4-1. Se consideran tres entradas: Etileno (P-101), Butano (P-104) e Iniciadores (P-124). Se tienen siete salidas de las cuales una corresponde a la Resina de LDPE (P-128), tres a aceites (P-128, P-130, P-133), una a ceras (P-159), otra a desfogue (P-138) y por último una a fuga (P-143). El proceso de hipercompresión se representa en un solo block (H-101), a diferencia del resto de las secciones que son constituidas por cada uno de sus equipos.

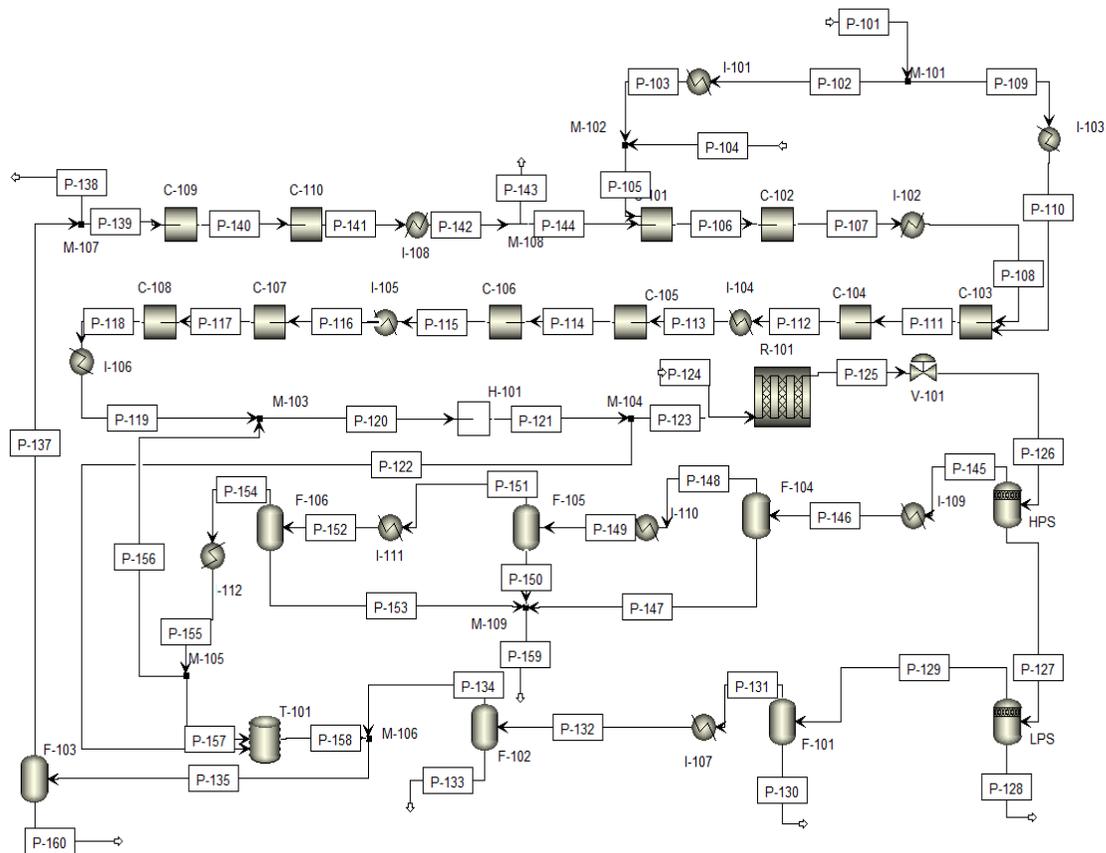


Figura 4-1. Diagrama de proceso: Producción de LDPE.

Los aceites son una mezcla de butano con oligómeros ligeros, mientras que las ceras son principalmente butano con residuos. Sólo se supuso una entrada del Co-Catalizador.

Las condiciones de operación, basadas en el artículo de Cervantes et al. (2002) se reportan en la Tabla 4-1.

Tabla 4-1. Datos másicos del proceso de base.

Componente	kg/h
Etileno	12334
Butano	12
Purga	355

Se considera que la fracción en masa del butano de baja presión es de 0.0205.

Tabla 4-2. Variables de proceso conocidas del caso base.

Variable	Etileno	Butano	Desfogue	Purga	Reactor	C-101	C-103
Presión (Pa)	2.70E+07	2.70E+07	1.50E+06	6.00E+06	2.20E+09	6.00E+06	2.40E+07
Temperatura (K)	298.15	298.15	313.15	313.15	358.15	313.15	313.15

Variable	C-105	C-107	I-106	V-101	HPS	LPS	I-112
Presión (Pa)	5.60E+07	1.03E+08	2.55E+08	-	3.50E+08	2.50E+06	2.85E+08
Temperatura (K)	313.15	313.15	313.15	547.15	543.15	493.15	313.15

El reactor tubular tiene un diámetro de 0.059m con una longitud total de 1000m, cumpliendo con el intervalo de la tecnología Lupotech (Licensed polyolefin technologies and Services: Lupotech, Lyondellbasell, 2016).

Para minimizar el tiempo de cálculo de la simulación fue necesario realizar una transferencia en el reactor (R-101). La corriente de entrada (P-124) se transfería a la corriente de entrada (JENTRADA) de un reactor (R1), el cual forma parte de una serie de reactores independientes al diagrama de proceso principal donde se realizaba la polimerización. Posteriormente, la corriente de salida (JSALIDA) es transferida a la corriente de salida del reactor del ciclo (P-125).

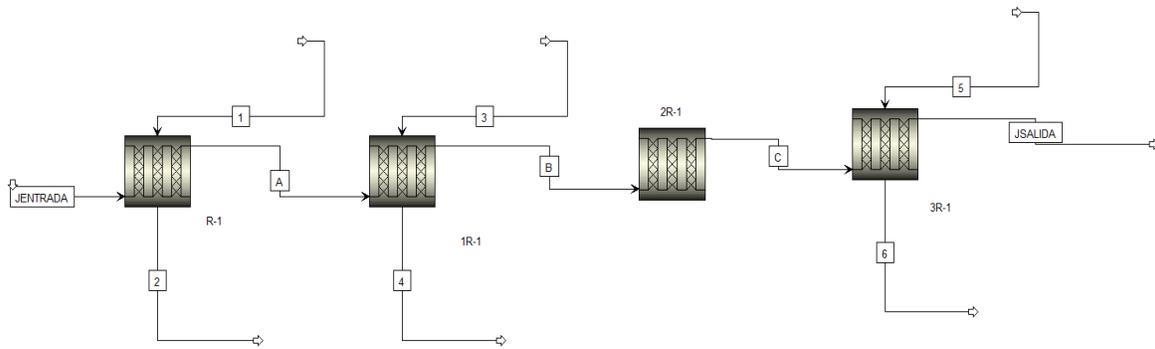


Figura 4-2. Reactor independiente al ciclo.

En esta serie de reactores, el primero representa la zona de reacción y el segundo la zona de reacción con temperatura controlada; el tercero y el cuarto son la zona de enfriamiento de producto. Cada reactor tiene una longitud de 250m que sumados dan los 1000m considerados con un diámetro de 0.059m (Cervantes et al., 2000; Gupta,1987).

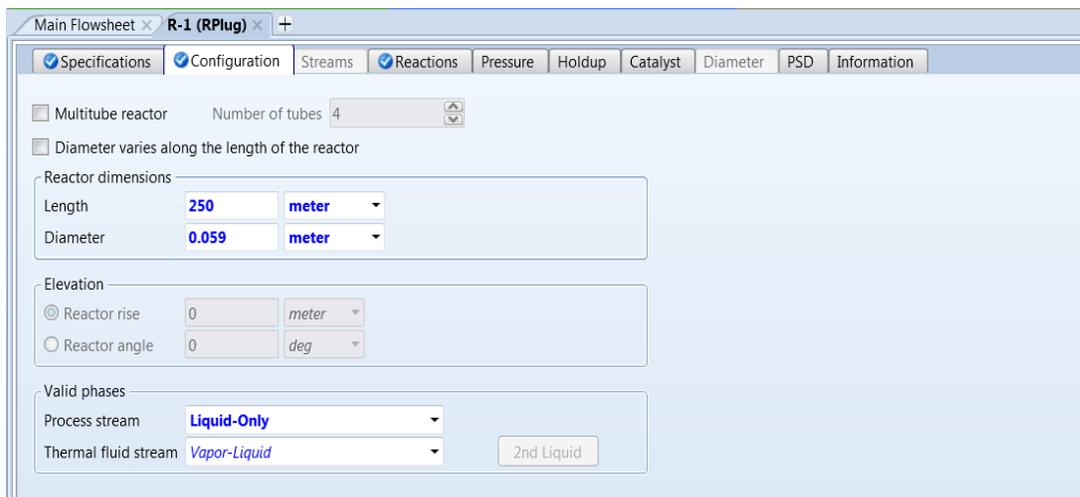


Figura 4-3. Configuración del reactor.

Existen dos tipos de diseño de reactor:

- Con fluido térmico contra corriente. El fluido térmico es agua aproximadamente 160,000 l/h (Figura 4-4).

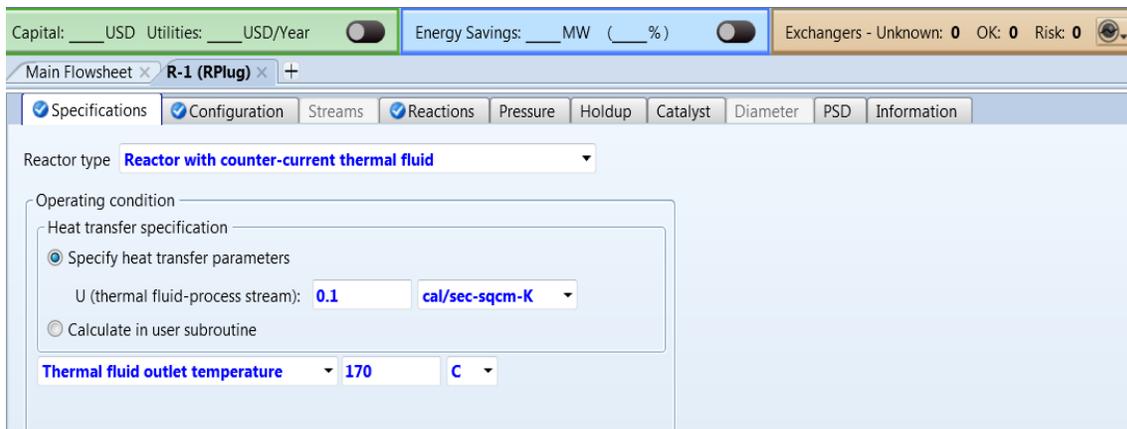


Figura 4-4. Reactor con fluido térmico contracorriente.

- Adiabático (Figura 4-5).

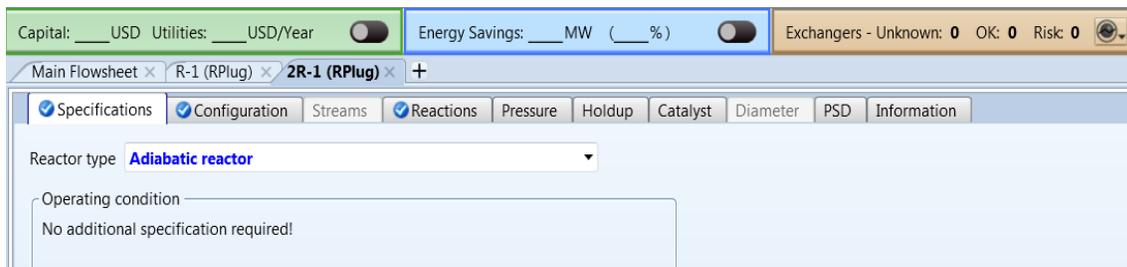


Figura 4-5. Reactor adiabático.

Aunque el reactor (R-101) ilustrado en el proceso global no sea considerado para los cálculos, sino solo en forma representativa, es necesario definirlo para poder ejecutar la simulación, optando por rapidez por un reactor tipo adiabático.

El grupo de constantes cinéticas previamente empleadas en el caso sin recirculación (Tabla 3-14) impedían el cálculo de las distribuciones de tamaño de cadena más allá de 10^5 dalton cuando existía recirculación, es decir, en nuestro proceso global. Por lo tanto, se optó por otro conjunto de constantes cinéticas, tomadas ahora de Mavridis y Kiparissides (1985) (Ver Tabla 4-3).

Tabla 4-3. Constantes cinéticas del artículo de Mavridis y Kiparissides (1985).

Tipo	Comp 1	Comp 2	Pre-Exp	Energía de Act.	Volumen de Act.
			1/sec	J/mol	cum/mol
Iniciación	IN1		3.81E-06	1.27E+08	0
Iniciación	IN2		3.79E-09	1.53E+08	0
Iniciación de cadena	Etileno		250000000	3.53E+10	0
Propagación	Etileno	Etileno	250000000	3.53E+10	2.13E+01
Transf. Monómero	Etileno	Etileno	1250000	4.54E+10	0
Transf. Polímero	Etileno	Etileno	1240000	3.04E+10	1.60E+00
Rompimiento β	Etileno		60700000	4.53E+10	0
Terminación por Desproporción	Etileno	Etileno	2500000000	4.19E+09	1.00E+00
Terminación por Combinación	Etileno	Etileno	2500000000	4.19E+09	0
Ramas cortas	Etileno	Etileno	1300000000	4.16E+10	0

La simulación generó los resultados mostrados en las Tablas 4-4 y 4-5. Debido a la extensión de los balances de materia y de los equipos simulados, los detalles se presentan en el ANEXO II.I.

Tabla 4-4. Balance de materia molar (kmol/h) de entrada y salida del proceso y del reactor.

Componente	P-101	P-104	P-124	P-138	P-130	P-133	P-128	P-143	P-159	P-160	JENTRADA	JSALIDA
Etileno	439.6559	0	0	0	0	0	26.5038	2.9083	0	0	3311.591	2901.344
LDPE	0	0	0	0	0	0	413.7934	0	0	0	0	413.793
IN1	0	0	0.3922	0	0	0	0	3.96E-06	0	0	0.392	0
IN2	0	0	0.03077	0	0	0	0	3.11E-07	0	0	0.031	0
IN3	0	0	0.1054	0	0	0	0.1013	0.0040358	0	0	4.096	4.096
IN4	0	0	0.2969	0	0	0	0.2926	0.022138	0	0	22.207	22.207
BUTANO	0	0.2065	0	0	0	0	0.177	0.019248	0	0	19.231	19.231
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CH4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla 4-5. Balance de materia másico (kg/h) de entrada y salida del proceso y del reactor.

Componente	P-101	P-104	P-124	P-138	P-130	P-133	P-128	P-143	P-159	P-160	JENTRADA	JSALIDA
Etileno	12300	0	0	0	0	0	743.5313	81.5885	0	0	92900.00	81400.00
LDPE	0	0	0	0	0	0	1.16E+04	0	0	0	0.00	11600.00
IN1	0	0	95	0	0	0	0	0.00095959	0	0	95.00	0.00
IN2	0	0	4.5	0	0	0	0	4.5454E-05	0	0	4.50	0.00
IN3	0	0	9.5	0	0	0	9.1287	0.3637	0	0	369.11	369.11
IN4	0	0	9.5	0	0	0	9.3628	0.7084	0	0	710.59	710.59
BUTANO	0	12	0	0	0	0	10.2895	1.1187	0	0	1117.75	1117.75
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.00	0.00
CH4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.00	0.00
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.00	0.00
Total:	12300	12	118.5	0	0	0	12346.7123	83.780305	0	0	95196.95	95197.45

El rendimiento de reacción en masa del monómero es reportado considerando la diferencia entre la alimentación y la salida del reactor, no del proceso global.

El rendimiento obtenido en la simulación de ASPEN PLUS es del 12.38%, de la salida respecto a la entrada del reactor, que entran en el rango del 10-15% recomendado por Mavridis y Kiparissides (1985) con el fin de evitar reacciones violentas, recordando que se usaron las mismas constantes cinéticas. En la Tabla 4-6 se muestran los rangos de conversión reportados por otros autores, siendo de interés debido a las consideraciones mencionadas, o por el conjunto de datos que representan, como es el caso de Gupta (1987) y Kehinde (2012).

Tabla 4-6. Conjunto de rangos de conversión reportados en la literatura.

Autor	Rango de conversión (%)	Observaciones
Gupta (1987)	10-20%	Forma parte del rango
Cervantes (2000)	27-30%	Es inferior al rango
Höfale (2005)	30-35%	Es inferior al rango
Kehinde, et al (2012)	14-24%	Ligeramente desfasado, cercano al límite inferior

La Figura 4-6 contiene las distribuciones de tamaño de cadena de los cuatro reactores en serie. Se observa que en el primer reactor (R-1) el tamaño de cadena es menor que en el segundo (1R-1), el cual es levemente mayor que en el caso del tercer (2R-1) y cuarto reactor (3R-1), donde los tamaños de cadena son totalmente similares, por lo cual las gráficas se empalman perfectamente.

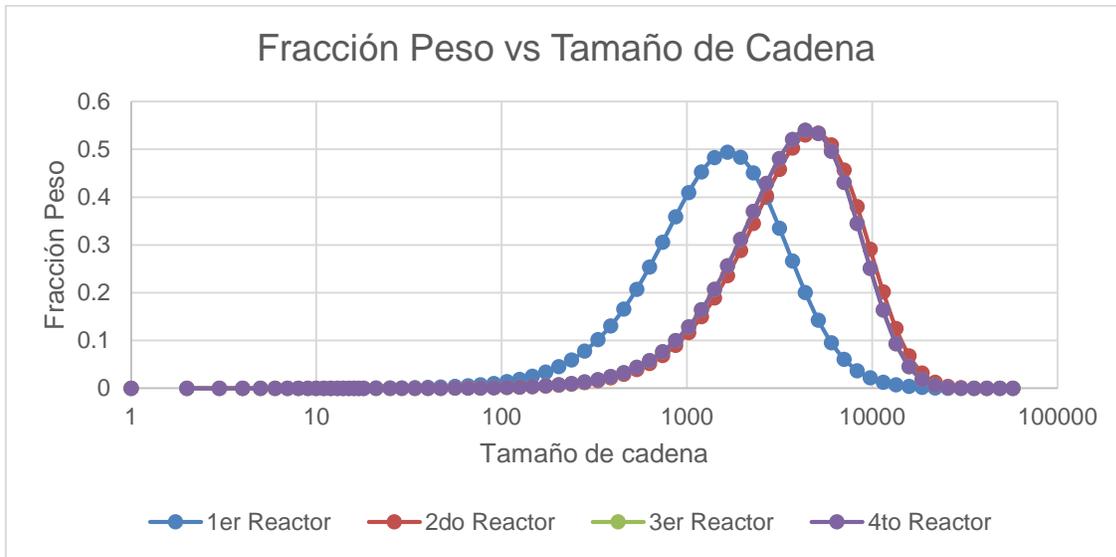


Figura 4-6. Distribuciones en peso de tamaño de cadena de los 4 reactores en serie.

En la Figura 4-7 se muestran las distribuciones en peso de pesos moleculares de los 4 reactores en serie. Nuevamente se aprecia el empalme de las gráficas del tercer y cuarto reactor.

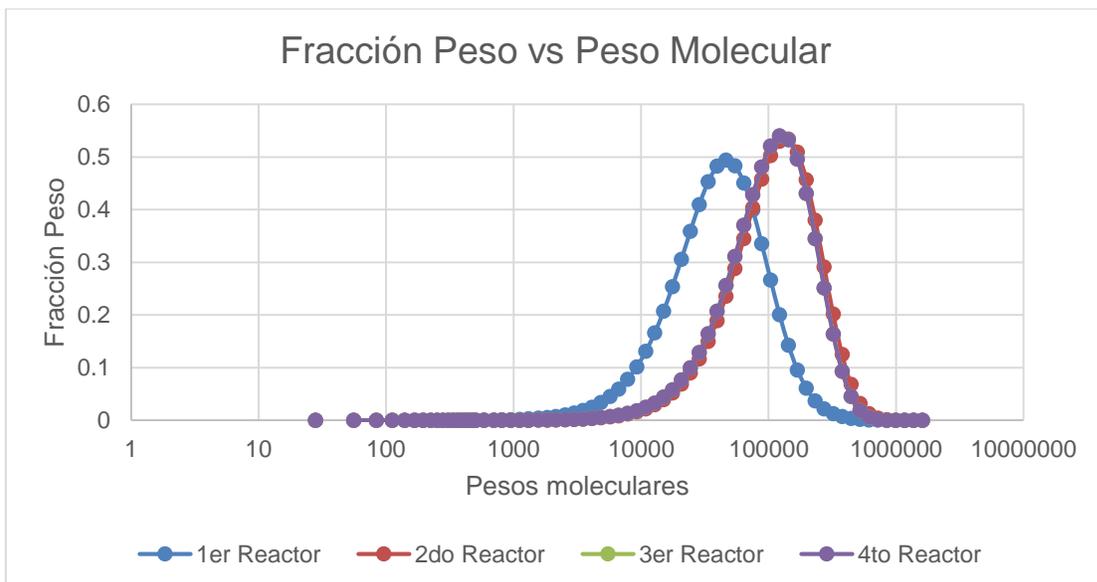


Figura 4-7. Distribuciones en peso de pesos moleculares de los 4 reactores en serie.

En la Figura 4-8 se muestra el perfil de temperatura (°C) a lo largo del reactor (1000m). Cada reactor está representado por un color diferente, como se muestra en la leyenda.

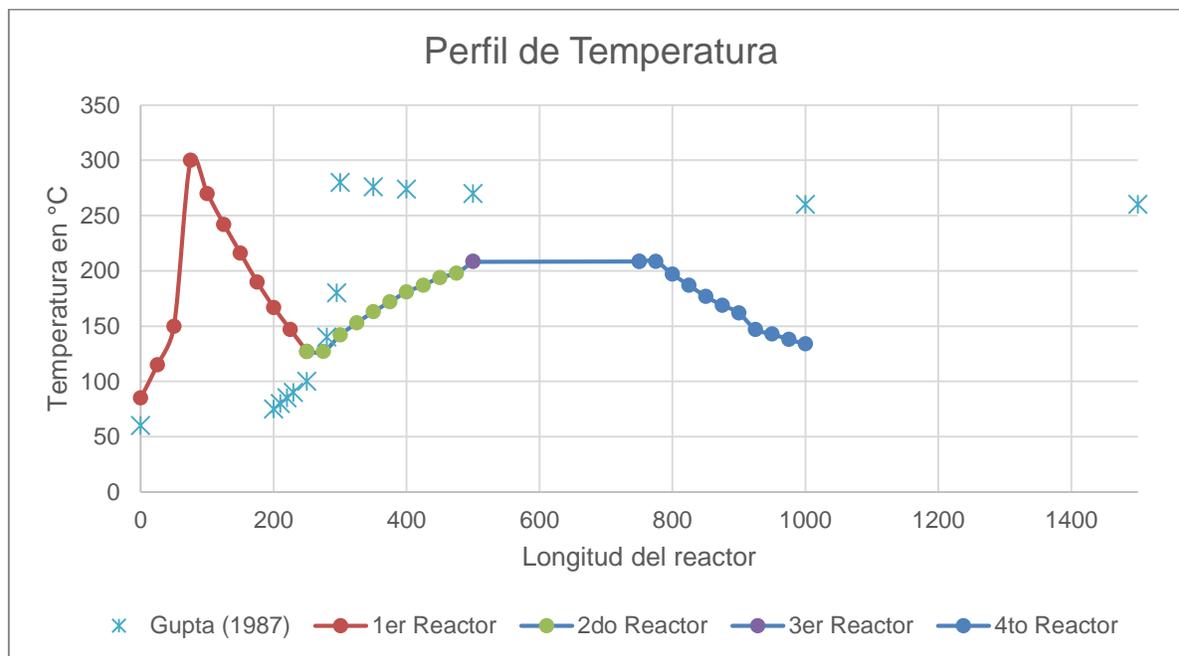


Figura 4-8. Perfil general de temperatura comparado con los datos de Gupta(1987).

El perfil es similar al reportado por Asteasuain y Brandolin (2007), como se aparecía en la Figura 4-9. El máximo en ambos casos se encuentra cercano a los 300 °C (574.15 K), solo que en el caso de Asteasuain y Brandolin se ubica alrededor del 0.20 en contraste con los obtenidos en la simulación de ASPEN PLUS que es cercano al 0.075 (75m/10000m) si consideramos el proceso global. No obstante, si solo tomamos en cuenta el área de reacción principal (primer reactor) la longitud relativa es alrededor de 0.3 (75m/250m). Las desventajas son que no se conoce la longitud total del reactor simulado por los autores y las condiciones de operación son distintas (77°C con una presión de 2300bar).

El segundo punto de inflexión de la Figura 4-9 es provocado por el proceso de absorción y desorción del monómero en el polímero, como se reporta en la literatura (Steven y Wanke, 2001). Debido a una segunda alimentación de iniciador y monómero (Figura 4-9) el segundo pico es más cercano al primero que en la

simulación de ASPEN PLUS (Figura 4-8), donde es considerada solo una alimentación (Gupta,1987).

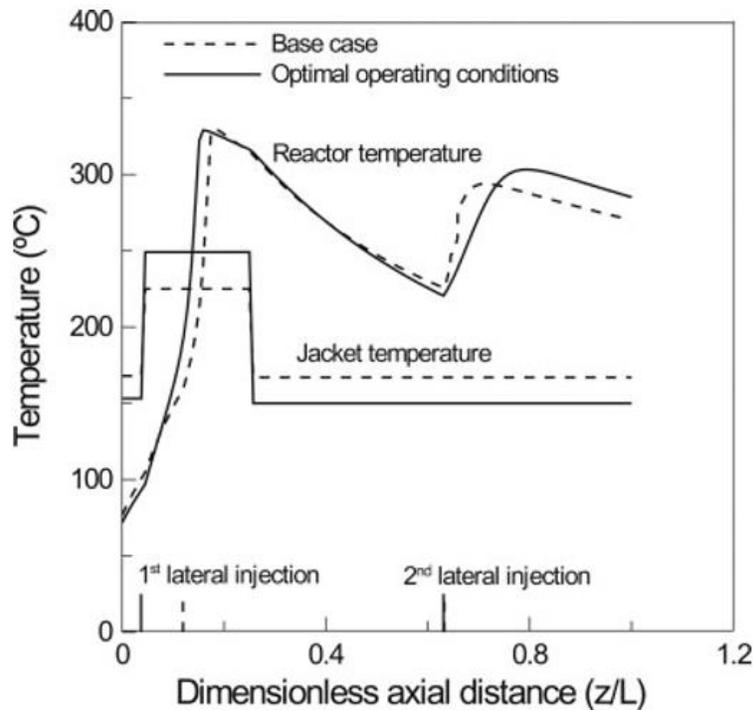


Figura 4-9. Perfil de temperatura de los datos de planta (___) y optimización (- - -) reportados por Asteasuain y Brandolin (2007) para el reactor de LDPE. Reprinted from *Journal of Applied Polymer Science*, M. Asteasuain, A. Brandolin, *Optimal operation of ethylene polymerization reactors for tailored molecular weight distribution*, Pages No.2621-2630, Copyright (2016), with permission from JOHN WILEY AND SONS." Also Lancet special credit - "Reprinted from *The Lancet*, M. Asteasuain, A. Brandolin, *Optimal operation of ethylene polymerization reactors for tailored molecular weight distribution*, Pages No.2621-2630, Copyright (2016), with permission from John Wiley and Sons.

El perfil de composición coincide con el perfil de temperatura (Figura 4-8), siendo consistente con la suposición de que el área de reacción principal se encuentra en los primeros 250 m, es decir, en el primer reactor. Para el resto del reactor global la composición se mantiene prácticamente constante (Gupta,1987).

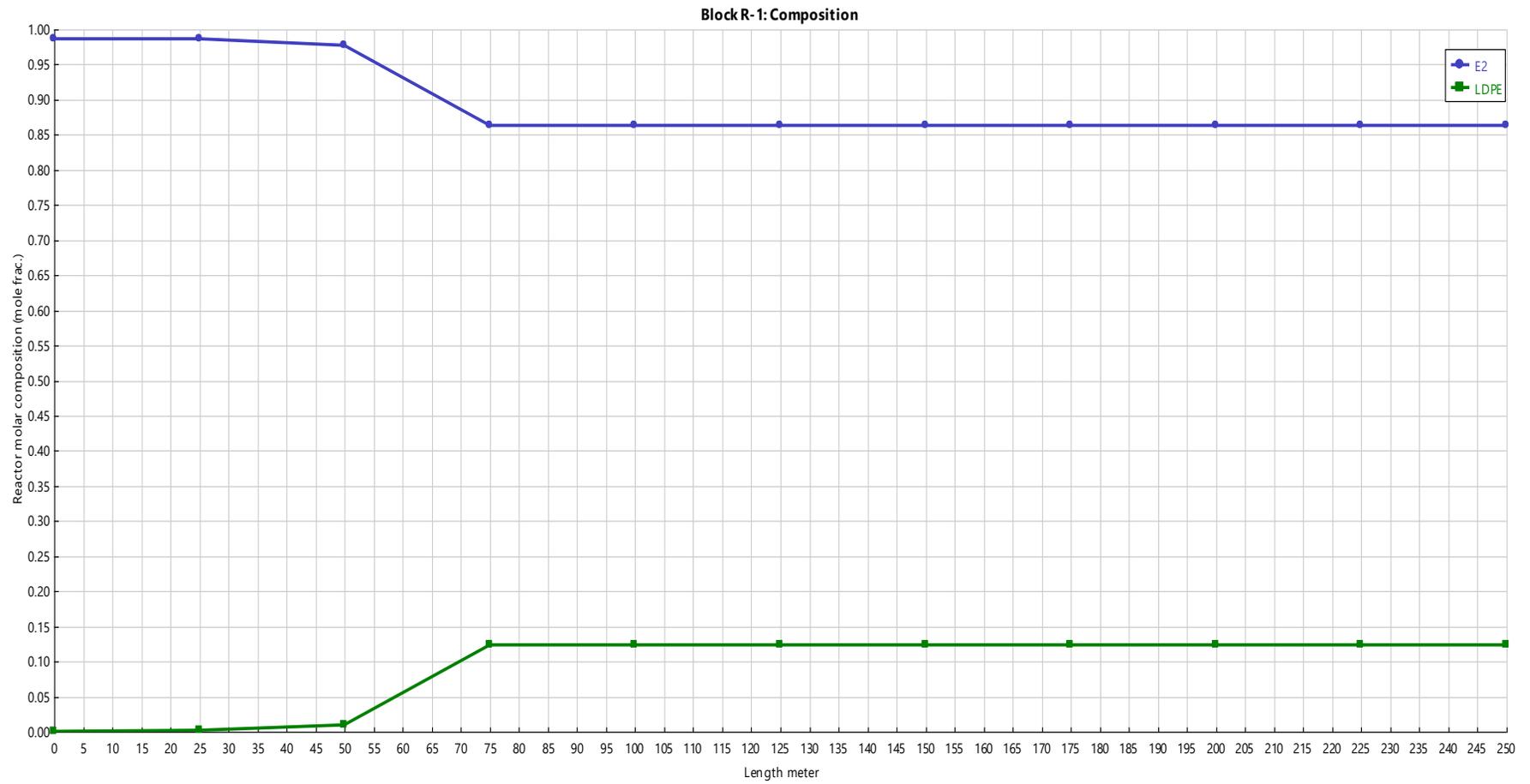


Figura 4-10. Perfil de composición en función de la longitud para el primer reactor generado por ASPEN PLUS.

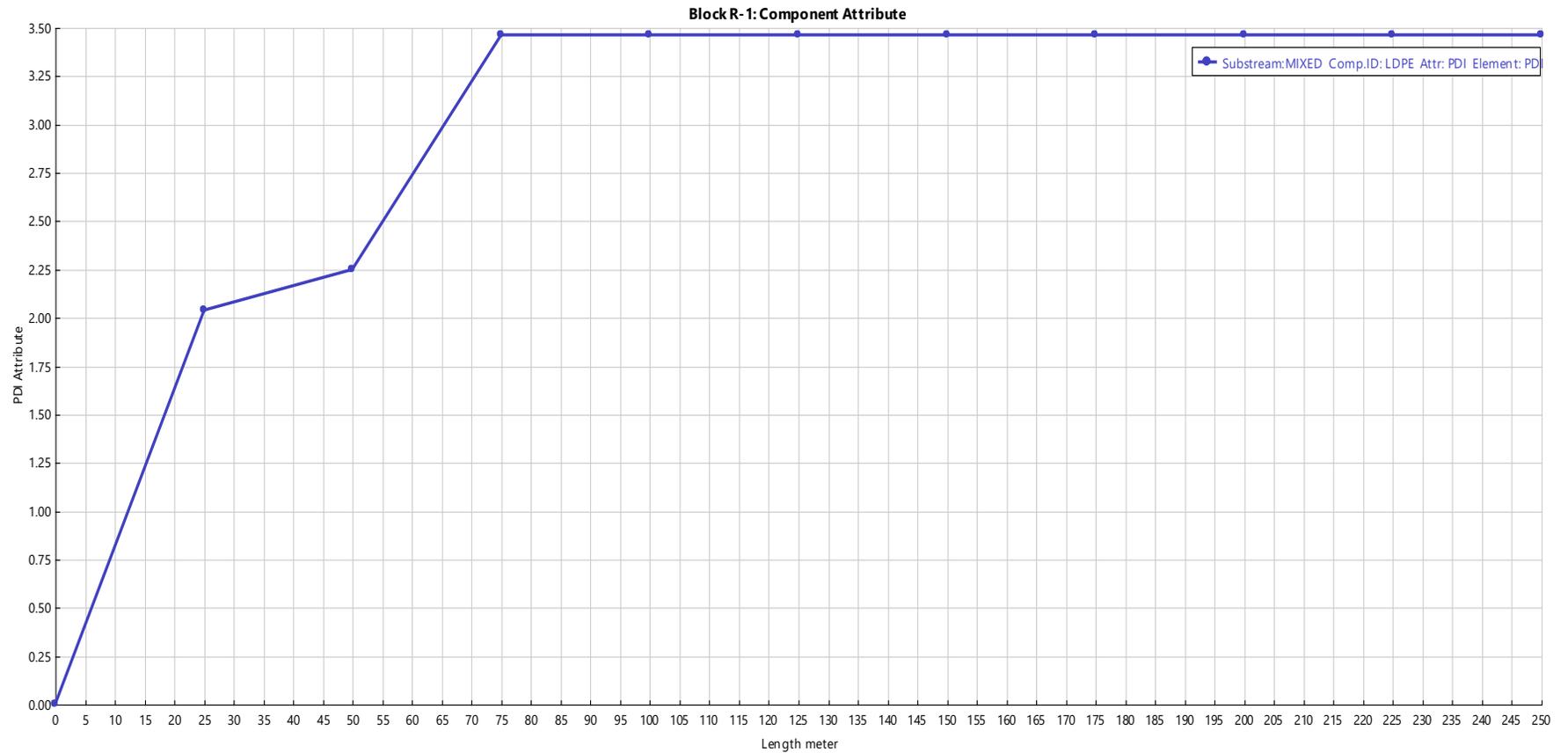


Figura 4-11. Polidispersidad en función de la longitud para el primer reactor.

La polidispersidad logra un máximo en el mismo punto que el perfil de temperatura y composición, a los 75m, para continuar constante (Gupta, 1987).

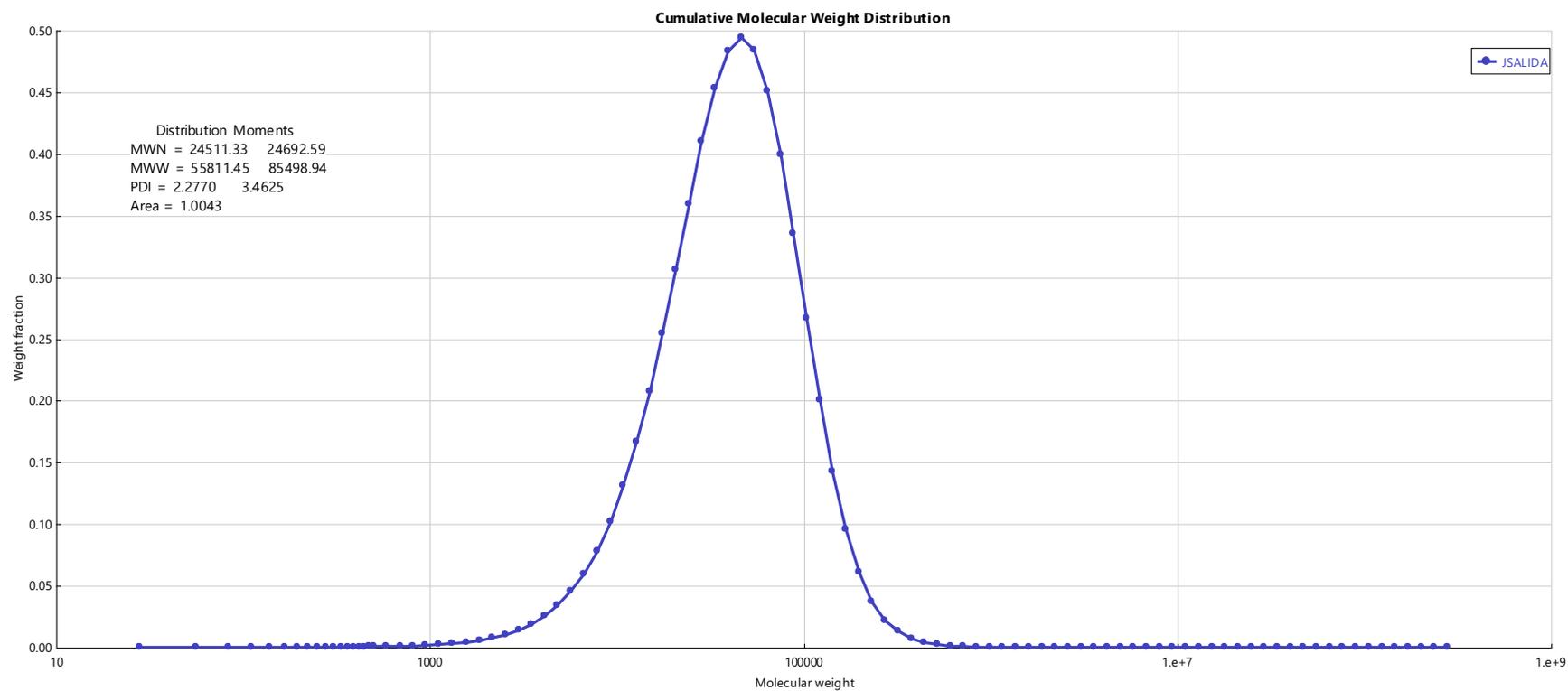


Figura 4-12. Distribución en peso de pesos moleculares para la resina obtenida.

La ecuación de Sinclair (1983) permite relacionar el promedio en peso de pesos moleculares ($\overline{M_w}$) con el índice de fluidez (MI) (Sinclair, 1983).

$$\ln \overline{M_w} = 11.622 - 0.288 \ln MI$$

Con $\overline{M_w}$ igual a 85, 498.94 se obtiene un índice de fluidez de 2.52g/10min.

El índice de fluidez de 2.52g/10min es coherente con la baja conversión obtenida y el rango de temperaturas de operación del reactor global reportados por Fred et al. (2004) y Zhou et al. (2001) (Ver Tabla 4-7).

Tabla 4-7. Rangos de polidispersidad y conversión reportados en la literatura (Kehinde et al., 2012).

Fuente	Temperatura(°C)	Conversión (%)	Polidispersidad
Fred et al. 2004	140-231	10.6-14.2	2.0-2.78
Zhou et al. 2001	227-357	Aprox. 10.05	1.92-2.35

El Anexo III incluye información de los reactores obtenida directamente de ASPEN PLUS.

5. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIETILENO LINEAL DE BAJA DENSIDAD (LLDPE)

En esta sección se desarrolla la simulación del proceso de producción de polietileno lineal de baja densidad (LLDPE) en fase gas, en base a la tecnología Univation.

5.1 Creación del documento de simulación.

Igual que en la simulación de LDPE, también se seleccionó el paquete de polímeros con unidades del sistema Met-C_bar_hr (Ver Figura 5-1).

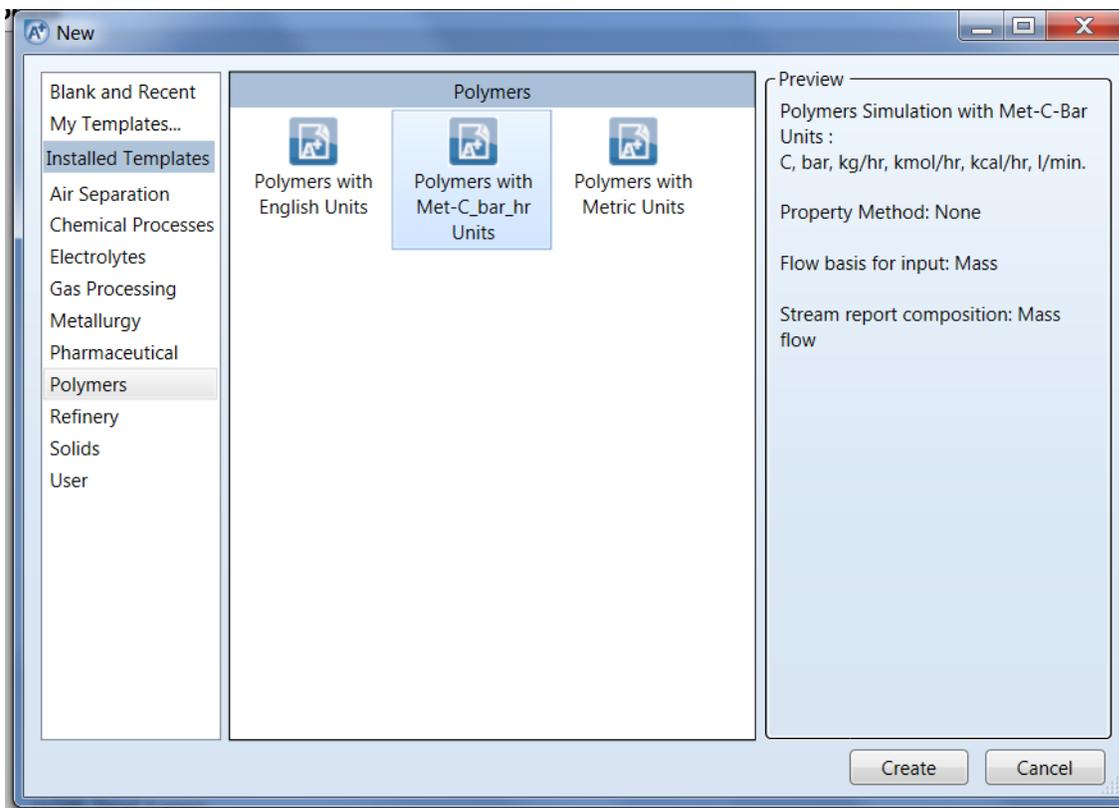


Figura 5-1. Ventana de selección del paquete Polymers de ASPEN PLUS.

5.2 Especificación de componentes.

Al crear el archivo, ASPEN direcciona al usuario a la ventana de propiedades, donde no sólo especifican los componentes sino también el polímero y se selecciona el método de cálculo de propiedades termodinámicas.

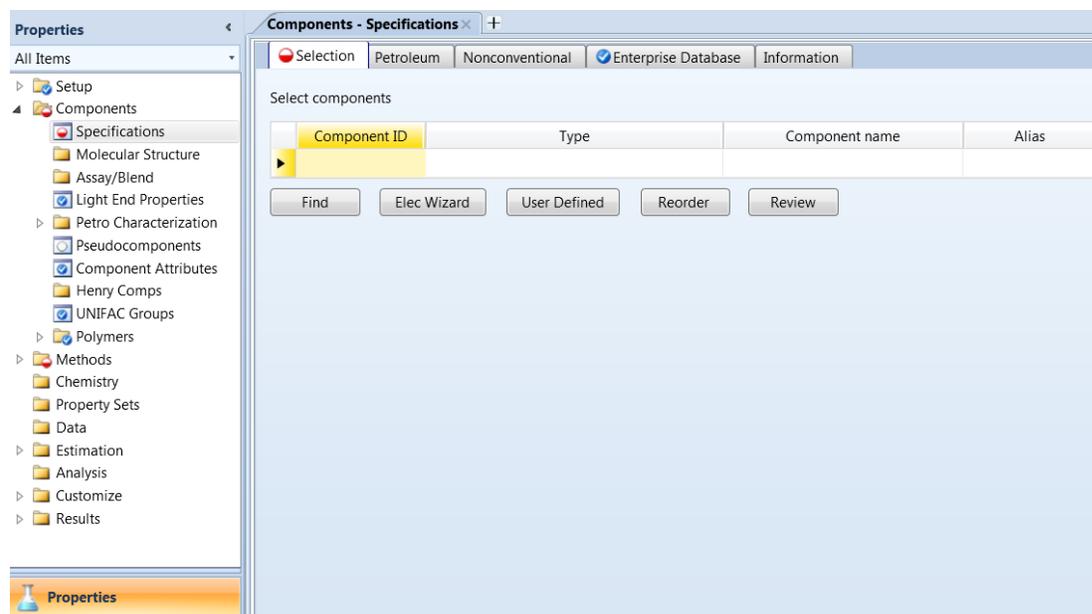


Figura 5-2. Ambiente de simulación de propiedades.

Los componentes por especificar se pueden clasificar de acuerdo a su función, igual que el orden de declaración. A continuación, se describen cada uno de los componentes.

5.2.1 Materias Primas.

Etileno (3.28 MPaG @ 30 °C, 3.28E+5 PaG @ 303.15K, condiciones normales de entrada): Reactivo base de la polimerización. Compuesto orgánico inflamable de 2 carbonos, con una doble ligadura. En condiciones normales se encuentra en estado gaseoso.

Comonomero (0.395 MPaG @ 45°C, 3.95E+4 PaG @ 319.15 K, para 1-Buteno y 0.188 MPaG @ 99°C, 1.88E+5Pa @ 372.15 K, para 1-Hexeno): Control de la densidad del polietileno, puede ser 1-buteno o 1-hexeno.

1-Buteno: Compuesto orgánico inflamable de cuatro carbonos, grado de insaturación 1 presente en el primer carbono como doble ligadura (pertenece a la familia de los alquenos). En condiciones normales se encuentra en estado gaseoso.

1-Hexeno: Compuesto orgánico inflamable de seis carbonos, grado de insaturación 1 presente en el primer carbono como doble ligadura. Pertenece a la familia de los alquenos.

Hidrógeno: Compuesto bimolecular de hidrógeno. En condiciones estándar se encuentra en estado gaseoso. Contribuye al mecanismo de desactivación del catalizador. Se emplea, además, como estabilizador de cargas iónicas en el reactor.

5.2.2 Catalizador y co-catalizador.

TiCl₄: Tetracloruro de Titanio.

TEA: Trietilaluminio.

5.2.3 Inertes.

Nitrógeno (0.71 MPaG @+ 30 °C, 7.1E+4 PaG @ 304.15, condiciones normales de entrada): Gas inerte empleando también como gas de purga y de enfriamiento. Conformar el 78% mol de la atmosfera; molécula formada por dos átomos de nitrógeno unidos por un triple enlace.

Isopentano líquido (condiciones normales de fondo 0.154 MPaG @ 57.6°C, 1.54E+4 PaG @ 330K): Gas empleado como medio fluidizante en el reactor. Compuesto orgánico inflamable de cinco carbonos; presenta solo ligaduras sencillas.

5.2.4 Servicios Auxiliares.

- Agua de enfriamiento: Es el agua tratada en torres de enfriamiento. La presión de descarga de la torre es alrededor de 4 a 4.5 kg/cm².
- Agua de calentamiento: Necesaria para el arranque del reactor.
- Vapor de agua sobrecalentado: Se suministra a una presión mayor de 600 psia (4,136,856 Pa).
- Hidrógeno: Gas empleado como estabilizador de cargas iónicas en el reactor, además de contribuir al mecanismo de desactivación del catalizador.
- Nitrógeno: Gas inerte empleando también como gas de purga y de enfriamiento a baja presión, mientras que el de alta presión es empleado en los instrumentos de medición.
- Aire: Gas empleado en instrumentación.
- Energía eléctrica: Requerida en los equipos eléctricos.
- Desfogue: Es el sistema de seguridad para la evacuación de materiales. Existen cinco escenarios de falla que originan un aumento de la presión más allá de lo permisible: incendio, bloqueo de válvulas, falla de agua, falla eléctrica y falla de reflujo.

Nota:

MPaG= Mega pascales manométricos. PaG=Pascales manométricos.

Debido a que esta planta se encuentra al nivel del mar la presión atmosférica es de 1atm=101,325 Pa.

En la Figura 5-3 se pueden observar los componentes ya especificados, en el ambiente de ASPEN PLUS.

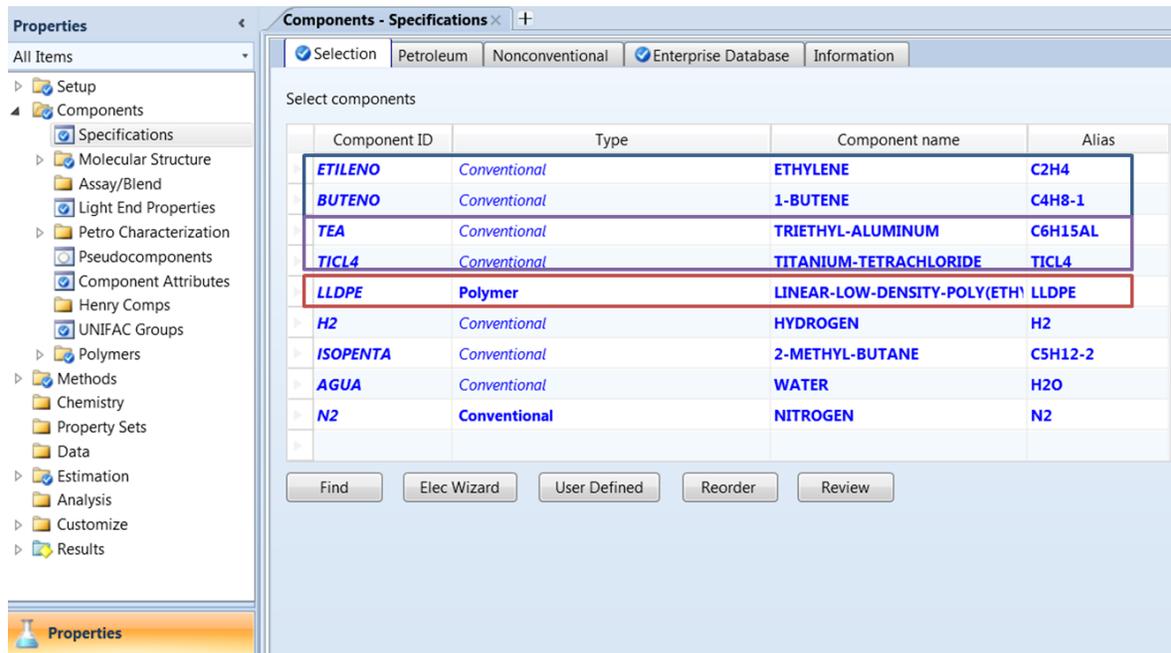
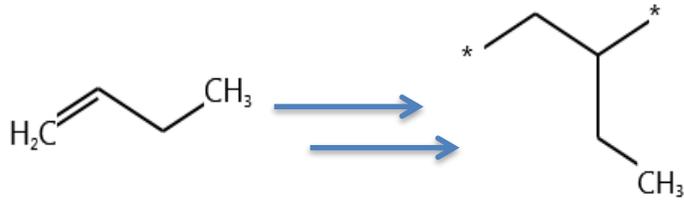


Figura 5-3. Especificación de componentes. Monómero y comonómero; Catalizador y Cocatalizador; **Polímero**.

El simulador requiere, además, especificar los fragmentos que conforman el polímero. En el caso del etileno el fragmento es C_2H_4 y para el buteno es C_4H_8 . Como se ilustra a continuación, sus dobles enlaces son diseminados en dos radicales libres:



Etileno -> -> C_2H_4-R



Buteno -> -> C₂H₈-R-1

Component ID	Type	Component name	Alias
ETILENO	Conventional	ETHYLENE	C2H4
BUTENO	Conventional	1-BUTENE	C4H8-1
TEA	Conventional	TRIETHYL-ALUMINUM	C6H15AL
TICL4	Conventional	TITANIUM-TETRACHLORIDE	TICL4
LLDPE	Polymer	LINEAR-LOW-DENSITY-POLY(ETH) LLDPE	
C2H4-R	Segment	ETHYLENE-R	C2H4-R
1-BUT-R	Segment	1-BUTENE-R	C4H8-R-1
H2	Conventional	HYDROGEN	H2
ISOPENTA	Conventional	2-METHYL-BUTANE	C5H12-2
AGUA	Conventional	WATER	H2O
N2	Conventional	NITROGEN	N2

Figura 5-4. Especificación de segmentos.

5.3 Especificación del polímero.

Para especificar al polímero es necesario definir:

5.3.1 Identificación del segmento.

Tanto C₂H₄-R (del etileno) como C₄H₈-R-1 (del buteno) son segmentos intermediarios, como se indica en la Figura 5-5.

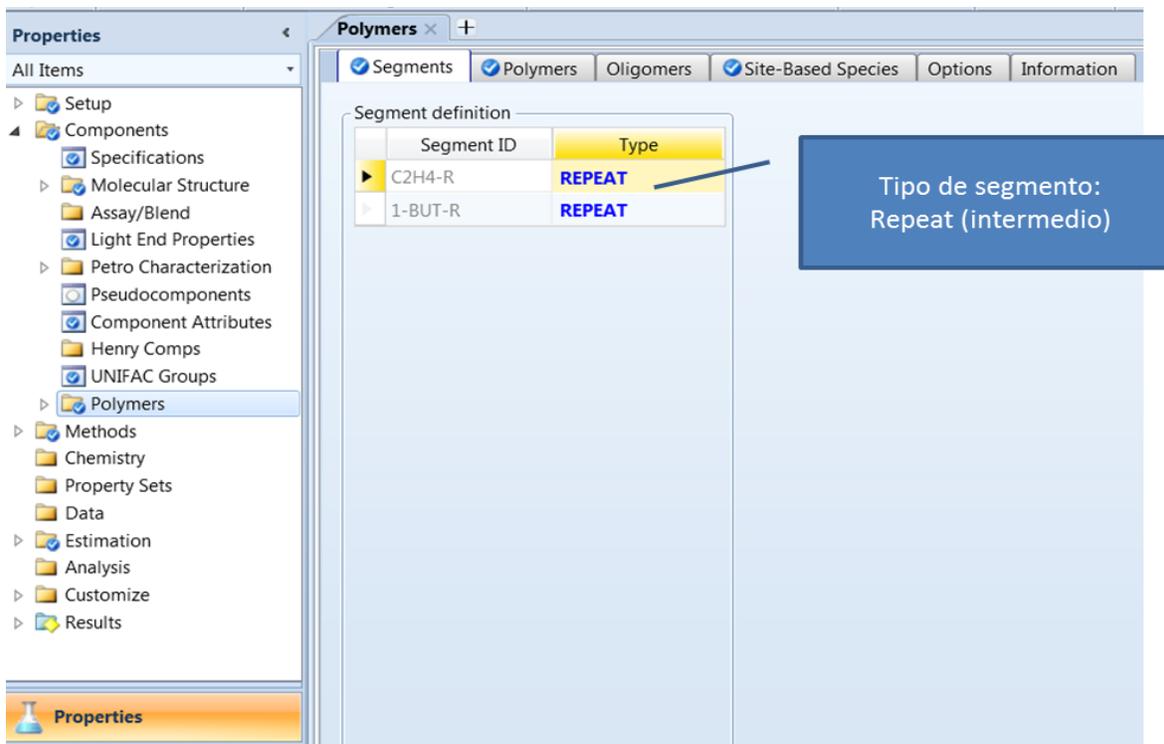


Figura 5-5. Especificación del tipo de segmento.

5.3.2 Identificación del polímero.

En la pestaña “Polymers”, Figura 5-6, se identificó:

1. Polímero: LLDPE.
2. Tipo de polimerización: Ziegler-Natta.
3. Lista de atributos: Promedio en número de tamaño de cadena (DPN), promedio peso de peso molecular (MWW) y polidispersidad (PDI).

La lista automática de atributos corresponde al grupo de atributos seleccionados en “Ziegler-Natta selection”, siendo coherente con el mecanismo de polimerización Ziegler-Natta.

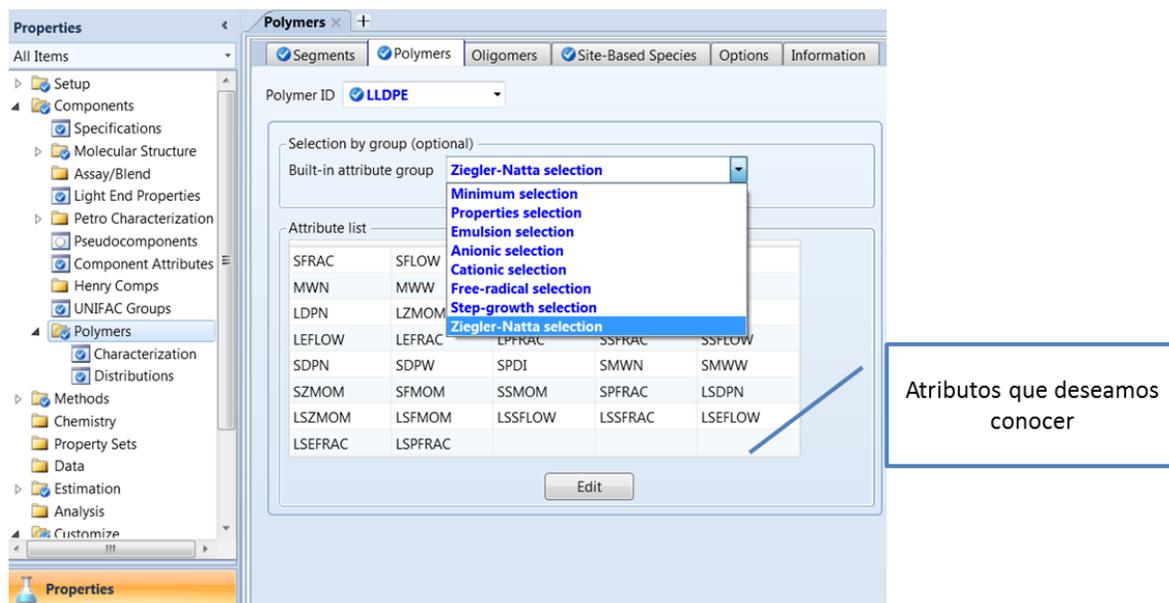


Figura 5-6. Identificación de mecanismo de reacción.

5.4. Características del catalizador.

La catálisis se realiza por un mecanismo Ziegler-Natta. Consideramos en la simulación 4 tipos de sitios activos y una concentración máxima de sitios efectivos de 0.85 (McAuley,1990; Usami et al.,1986; Hatzantonis et al.,2000).

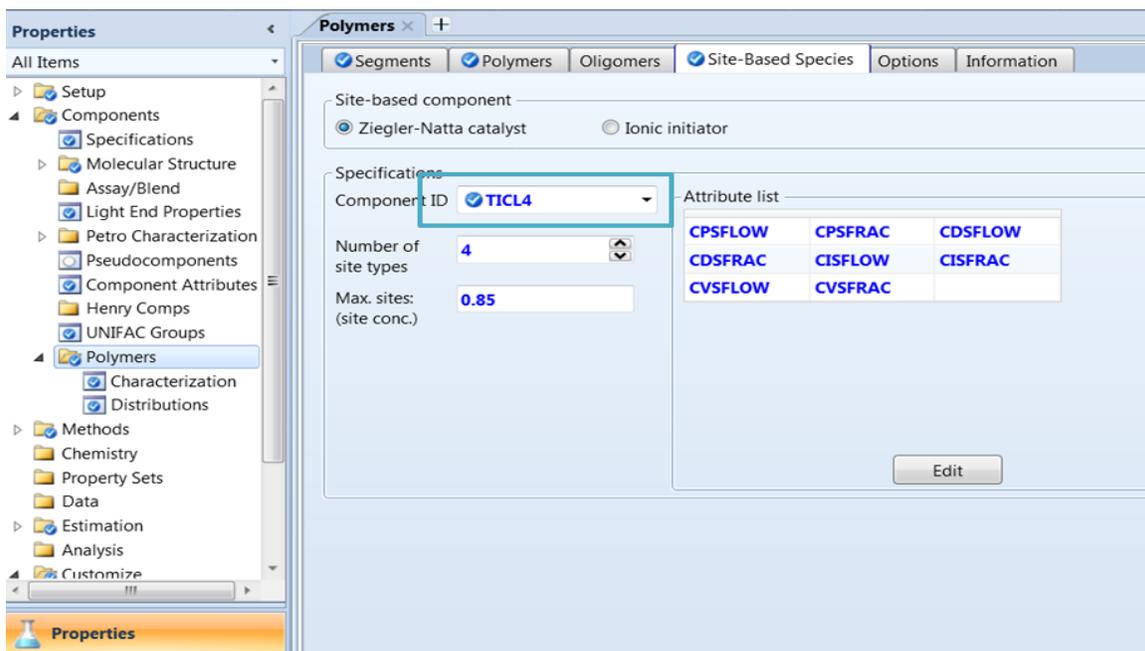


Figura 5-7. Características del catalizador.

5.5 Elección del método de cálculo de propiedades termodinámicas.

El simulador cuenta con dos modelos termodinámicos específicos para Comonomero: Sanchez-Lacombe (basado en el modelo termodinámico de Sanchez-Lacombe) y PCSF (modificación del PC-SAFT). En nuestro caso optamos por el PCSF ya que no contábamos con la información mínima para el uso del modelo termodinámico de Sanchez-Lacombe (Sección 3.4) y el ajuste realizado por ASPEN PLUS generaba información termodinámica incoherente.

El modelo PC-SAFT requiere como información mínima número(m), diámetro(σ) y energía(ϵ/k_B) del segmento, así como parámetros de interacción binaria. Se emplearon los valores reportados por Khare et al. (2004) (Tabla 5-1). La Figura 5-8 muestra la elección del método de cálculo de propiedades termodinámicas en el ambiente de ASPEN PLUS.

Tabla 5-1. Información básica para el modelo termodinámico PC-SAFT.

Sustancia	m	$\sigma(\text{\AA})$	ϵ/k_B (K)
H ₂	0.8285	2.973	12.53
C ₂ H ₄	1.559	3.434	179.4
Catalizador	25	2.668	198.8
Co-Catalizador	25	2.668	298.8

Nota: k_B es la constante de Boltzmann y es igual a 1.38×10^{-23} J/K.

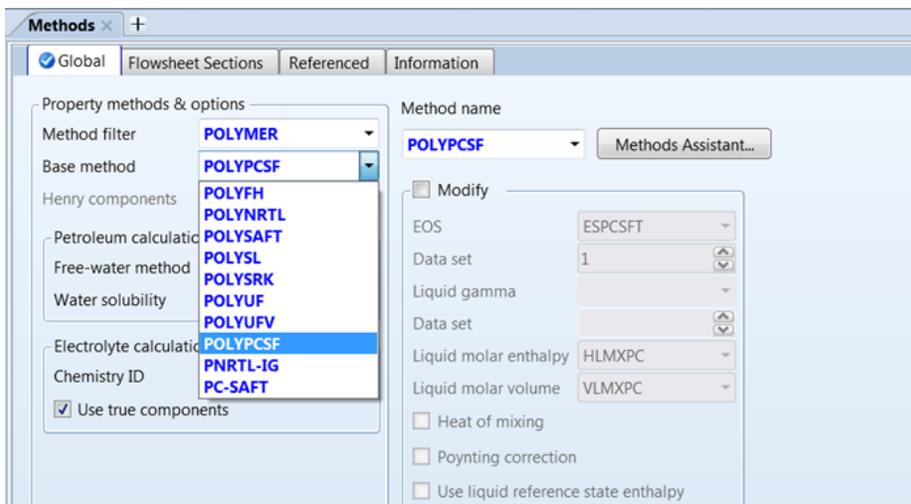


Figura 5-8. Selección del método termodinámico.

En el Anexo I se incluyen las ecuaciones de estado del método termodinámico.

5.5.1 Ejecución del cálculo de propiedades.

Antes de avanzar al área de simulación es necesario evaluar las propiedades termodinámicas. La Figura 5-9 muestra que existen resultados disponibles, por lo cual se puede proseguir al ambiente de simulación.

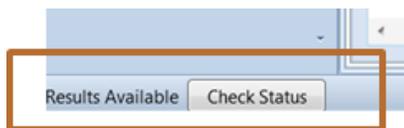


Figura 5-9. Cálculo de propiedades termodinámicas con resultados disponibles.

5.6 Definición de la reacción química.

Una vez en el ambiente de simulación nos dirigimos en la sección de reacción "Reaction", a la opción "New" para crear una nueva reacción química. Se seleccionó la opción de radicales libres, como se muestra la Figura 5-10.

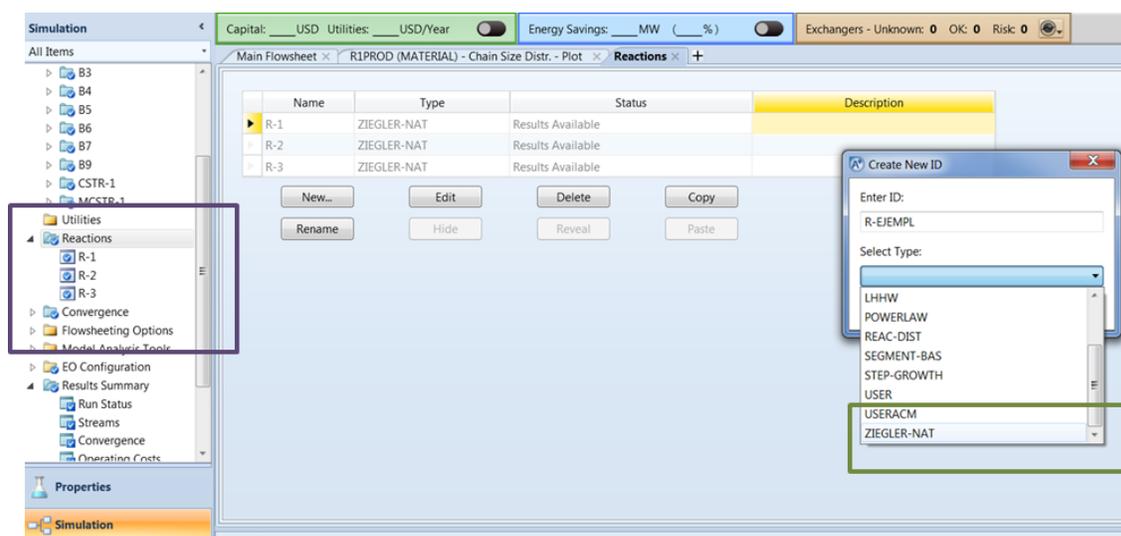


Figura 5-10. Creación de una reacción química.

En la pestaña de especies se identificó LLDPE como el polímero, como monómeros etileno y buteno, con sus respectivos segmentos, el catalizador $TiCl_4$ y el TEA como cocatalizador. Posteriormente se recurrió a la generación automática de reacciones.

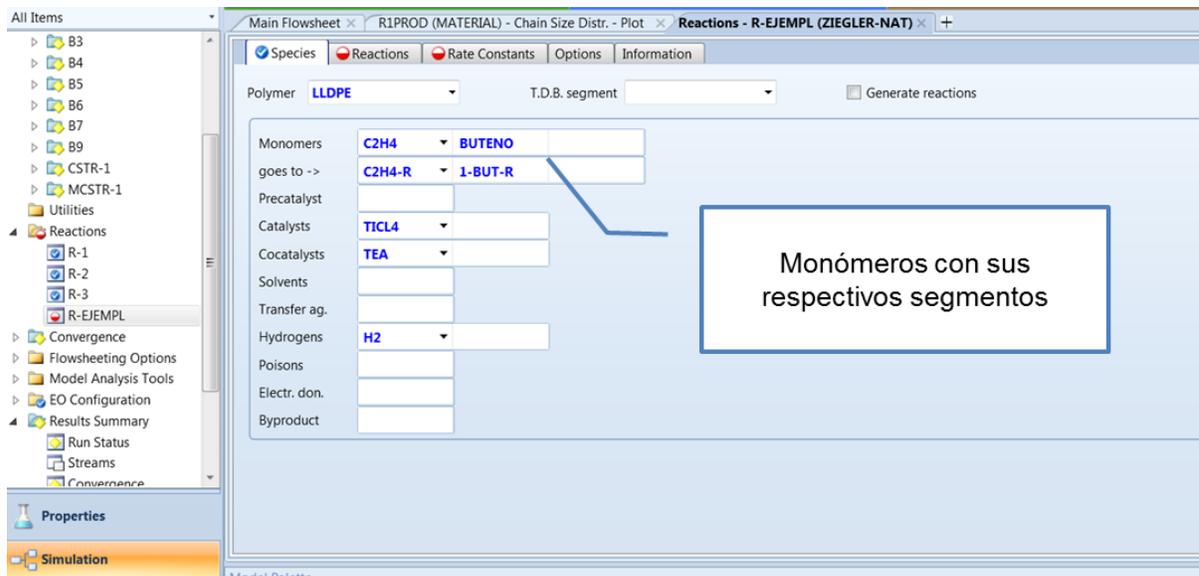


Figura 5-11. Identificación de componentes claves en la reacción.

Posteriormente se pasa a la comprobación de las reacciones químicas. En nuestro caso no fue necesario realizar modificaciones, se observa en la Figura 5-12.

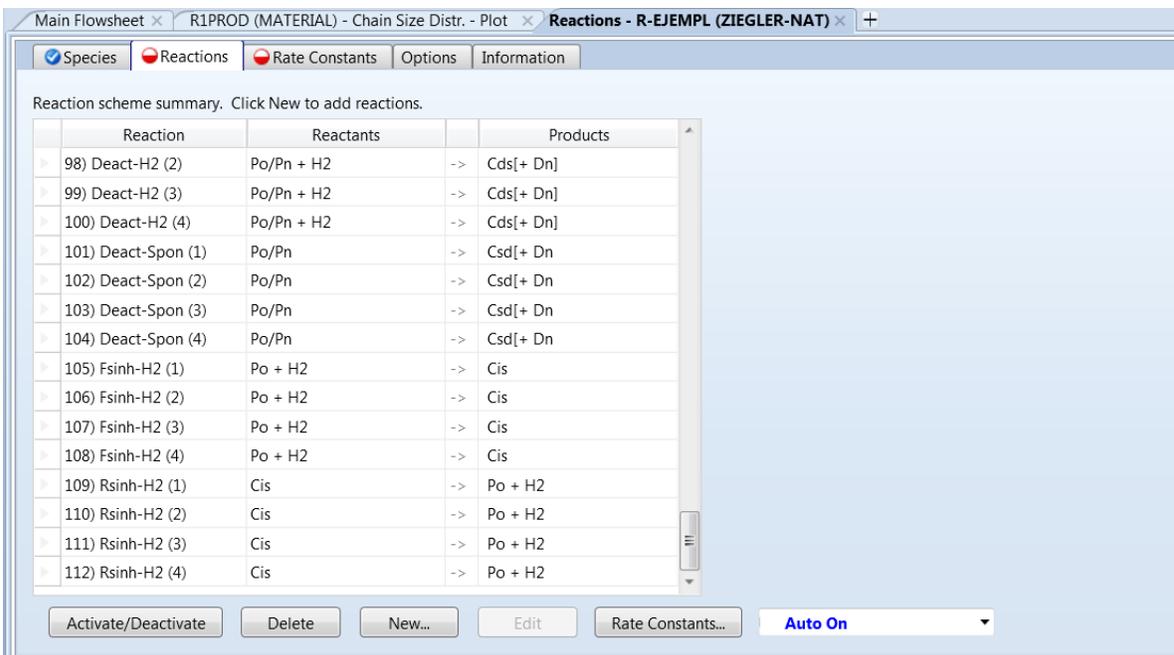


Figura 5-12. Comprobación de reacciones de polimerización.

La captura de las constantes cinéticas se realizó en la pestaña “Rate Constants”. Por cada grupo de constantes o ajuste se creó una reacción independiente.

Type	Site No.	Comp 1	Comp 2	Pre-Exp 1/hr	Act-Energy kcal/mol	Order	Tdb Frac	Ref. Temp. C
ACT-SPON	1	TICL4		0.08	0	1		100
ACT-SPON	2	TICL4		0.08	0	1		100
ACT-SPON	3	TICL4		0.08	0	1		100
ACT-SPON	4	TICL4		0.08	0	1		100
ACT-COCAT	1	TICL4	TEA	0.15	0	1		100
ACT-COCAT	2	TICL4	TEA	0.15	0	1		100
ACT-COCAT	3	TICL4	TEA	0.15	0	1		100
ACT-COCAT	4	TICL4	TEA	0.15	0	1		100
ACT-H2	1	TICL4	H2	0	0	1		100
ACT-H2	2	TICL4	H2	0	0	1		100
ACT-H2	3	TICL4	H2	0	0	1		100
ACT-H2	4	TICL4	H2	0	0	1		100
ACT-MON	1	TICL4	C2H4	0	0	1		100
ACT-MON	1	TICL4	BUTENO	0	0	1		100
ACT-MON	2	TICL4	C2H4	0	0	1		100
ACT-MON	2	TICL4	BUTENO	0	0	1		100

Figura 5-13. Constantes de reacción desde el formato de ASPEN PLUS.

Como no en todos los casos se usaban todas las constantes cinéticas, a aquellas no requeridas simplemente se le asignó el valor de cero, evitando descartarlas directamente y provocando una mejor manipulación de los cambios. Automáticamente ASPEN PLUS generó 112 reacciones para el caso R-1 y R-2 se descartaron 44, mientras que para R-3 solo 36.

Las constantes de reacción consideradas en este trabajo se resumen en la Tabla 5-2.

*Tabla 5-2. Constantes cinéticas de la polimerización etileno-buteno (McAuley et al. 1990). $k = L/mol*s$.*

Reacción	Reactivo 1	Reactivo 2	Sitio1	Sitio 2
Formación*			1	1
Iniciación de cadena	Co-catalizador		1	1
Iniciación de cadena	Etileno		1	1
Iniciación de cadena	Buteno		0.14	0.14
Iniciación de cadena	Etileno	H2	1	1
Iniciación de cadena	Buteno	H2	0.14	0.14
Propagación	Etileno	Etileno	85	85
Propagación	Etileno	1-buteno	2	15
Propagación	1-buteno	Etileno	64	64
Propagación	1-buteno	1-buteno	1.5	6.2
Transferencia al Monómero	Etileno	Etileno	0.0021	0.0021
Transferencia al Monómero	Etileno	1-buteno	0.006	0.11
Transferencia al Monómero	1-buteno	Etileno	0.004	0.001
Transferencia al Monómero	1-buteno	1-buteno	0.006	0.11
Transferencia al Hidrógeno.	Etileno	H2	0.1144	0.666
Transferencia al Hidrógeno	1-buteno	H2	0.1144	0.666
Transferencia al Cocatalizador	Etileno	Co-catalizador	0.024	0.12
Transferencia al Cocatalizador	1-buteno	Co-catalizador	0.048	0.24
Transferencia Espontanea	Etileno		0.0001	0.0001
Transferencia Espontanea	1-buteno		0.0001	0.0001
Desactivación Espontanea*			0.0001	0.0001

Nota: *: la constante es de primer orden 1/s.

Para cumplir con las especificaciones industriales del polímero fue necesario afinar las constantes cinéticas. Se emplearon como referencia otros conjuntos de constantes cinéticas en condiciones de operación de presión y temperatura similares, para catálisis Ziegler-Natta con $TiCl_4$, con el mismo proceso de fase gas para producción de HDPE. A continuación, se indican los sistemas de referencia considerados.

- Khare et al. (2003). No incluye los efectos de cambio de temperatura. Sus unidades son $L/mol*s$. Proviene de una copolimerización de etileno con propeno y 1-buteno.

*Tabla 5-3 Constantes cinéticas de reacción($L/mol*s$) de Khare et al. (2003).*

Reacción	Reactivo 1	Reactivo 2	k
Activación con Co-catalizador	Catalizador	Co-catalizador	1
Iniciación de cadena	Catalizador	Etileno	14.6
Iniciación de cadena	Catalizador	1-buteno	9.8
Propagación	Etileno	Etileno	14.6
Propagación	Etileno	1-buteno	0.81
Propagación	1-buteno	Etileno	41
Propagación	1-buteno	1-buteno	9.8
Transferencia al Agente de transferencia	Etileno	hidrógeno	0.088
Transferencia al Agente de transferencia	1-buteno	hidrógeno	0.088
Transferencia al Monómero	Etileno	Etileno	0.0021
Transferencia al Monómero	Etileno	1-buteno	0.006
Transferencia al Monómero	1-buteno	Etileno	0.0021
Transferencia al Monómero	1-buteno	1-buteno	0.006
Inhibición del sitio catalítico AT	Catalizador	hidrógeno	2000
Inhibición del sitio catalítico	Catalizador		0.0003
Decaimiento espontaneo	Catalizador		0.0001

- Scarola (1985). Se trata de una generalización para la producción de HDPE y LLDPE por el proceso en fase gas. Considera los efectos de la temperatura.

La temperatura de referencia es 100°C (373.15 K); sin embargo, su presión de operación es 20% mayor que la del proceso simulado, por lo que al usarse directamente se obtenían cantidades de producción menores.

Tabla 5-4. Constantes cinéticas de reacción de Scarola (1985).

Reacción	Reactivo 1	Reactivo 2	k° (l/s*mol)	Ea(J/kmol)
Activación con Co-catalizador	TiCl ₄	TEA	9.03E+05*	8000
Iniciación de cadena	Etileno		4.49E+07	7000
Iniciación de cadena	1-buteno		5.96E+05	7000
Propagación	Etileno	Etileno	4.49E+07	7000
Propagación	Etileno	1-buteno	1.50E+06	7000
Propagación	1-buteno	Etileno	4.49E+07	7000
Propagación	1-buteno	1-buteno	5.96E+05	7000
Transferencia al Monómero	Etileno	Etileno	1.50E+03	7200
Transferencia al Monómero	Etileno	1-buteno	1.50E+03	7200
Transferencia al Monómero	1-buteno	Etileno	1.50E+03	7200
Transferencia al Monómero	1-buteno	1-buteno	1.50E+03	7200
Transferencia al Hidrógeno	Etileno	H ₂	5.60E+07	8000
Transferencia al Hidrógeno	1-buteno	H ₂	5.60E+07	7000
Desactivación Espontanea			1.60E+06*	1000

*Primer orden: 1/s

- Modelo de simulación de ASPEN PLUS Polymers. No considera el efecto de temperatura, pero si es similar a nuestro proceso al suponer cuatro tipos de sitios de reacción. Las unidades de las constantes son L/mol*s, exceptuando la activación y la desactivación espontánea que son de primer orden (s^{-1}).

Tabla 5-5. Constante cinética del ejemplo de HDPE de ASPEN PLUS POLYMERS.

Reacción	Reactivo 1	Reactivo 2	Sitio 1	Sitio 2	Sitio 3	Sitio 4
Activación espontánea	TiCl ₄		0.08	0.08	0.08	0.08
Activación con Co-catalizador	TiCl ₄	TEA	0.15	0.15	0.15	0.15
Iniciación de cadena	C ₂ H ₄		255	90	255	90
Propagación	C ₂ H ₄	C ₂ H ₄	255	90	255	90
Transferencia al Monómero	C ₂ H ₄	C ₂ H ₄	0.09	0.24	0.09	0.24
Transferencia al Hidrógeno	C ₂ H ₄	H ₂	5.55	18.5	5.55	18.5
Transferencia Espontánea	C ₂ H ₄		0.004	0.012	0.004	0.012
Desactivación Espontánea			0.0001	0.0006	0.0001	0.0006

Para la comprobación del ajuste de parámetros cinéticos se simuló el reactor considerando el flujo de entrada más el flujo de recirculación, sin mostrarlo físicamente, en base a una conversión del 99%. El reactor simulado cuenta con una entrada de inertes y materia prima; otra de catalizador y co-catalizador; y una sola salida, como se muestra en la Figura 5-14.

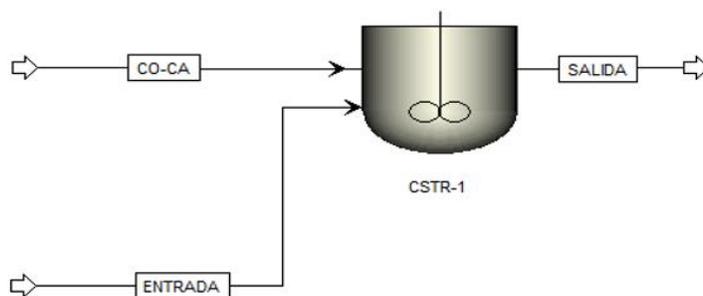


Figura 5-14. Reactor sin recirculación.

Las condiciones de operación del reactor son 84.5 °C con una presión de 2.5 MPaG (2.5E+5PaG), mientras que la temperatura de las corrientes de entrada es de 50°C con una presión de 2.6 MPaG, 2.6E+5 PaG.

Posteriormente se emplearon 3 grupos de constantes cinéticas:

- R1: constantes cinéticas basadas en el conjunto de constantes de ASPEN PLUS y Scarola (1985).
- R2: combinación de las constantes cinéticas de Khare (2003) y McAuley et al. (1990).
- R3: se emplearon las constantes de McAuley et al. (1990), aumentando la constante de activación del catalizador con el co-catalizador a un valor de 20 l/mol*s, considerando la mayor actividad por presencia del co-catalizador.

Al no considerar la recirculación, la composición de las corrientes de entrada para los tres casos es igual, pero el variar las constantes cinéticas hace que varíe la corriente de salida del reactor (Tabla 5-6).

Tabla 5-6. Balance de materia másico (kg/h) del reactor sin recirculación.

Componente	Entrada (kg/h)	Salida(kg/h)		
		R1	R2	R3
ETILENO	35549.668	7402.323	0.0245663	5.491238
BUTENO	3615.5165	3028.839	0.1061791	19.66885
TEA	4.51	4.443323	3.081952	0.1159321
TICL4	3.67	3.67	3.67	3.67
LLDPE	0	28734.39	39166.49	39147.99
H2	3.63729	3.337614	3.635356	0.0696135
ISOPENTA	51185.984	51185.98	51185.98	51185.98
AGUA	0	0	0	0
N2	0	0	0	0
Total	90362.99	90362.99	90362.99	90362.99

El mayor rendimiento se observa con el caso de R2, mientras que el menor con el caso de R1. Estos valores variaron al modificar el balance de materia con la recirculación.

En la Tabla 5-7 se comparan el promedio en número de tamaño de cadena (DPN), el promedio másico de peso molecular (MWW) y la polidispersidad (PDI) para cada grupo de constantes cinéticas.

Tabla 5-7. Principales datos de la distribución polimérica.

	DPN	MWW	PDI
R1	28.2035499	1631.69042	1.96698297
R2	12955.0794	762021.227	1.99992281
R3	161.9626	9495.42376	1.99382574

La polidispersidad para los tres grupos de constantes cinéticas es muy similar. Los tamaños de cadena son muy distintos. R2 logra el mayor resultado con 12955.1 unidades monómeras y R1 es el menor con tan solo 28.2.

Las distribuciones completas de pesos moleculares para cada grupo de constantes cinéticas se muestran en las Figuras 5-15, 5-16 y 5-17.

En la Figura 5-15 se observa el empalme del sitio 1 con el sitio 3 y del sitio 2 con el 4, lo cual se debe a que en este caso sólo se consideraron dos tipos de sitios; es decir, las diferentes constantes del iniciador fueron iguales en los pares y los impares. A pesar de que el rendimiento varió en una proporción 2:1, del 1 respecto al 3 y del 2 respecto al 4, no existió impacto en la distribución en peso de pesos moleculares.

***Grupo 1**

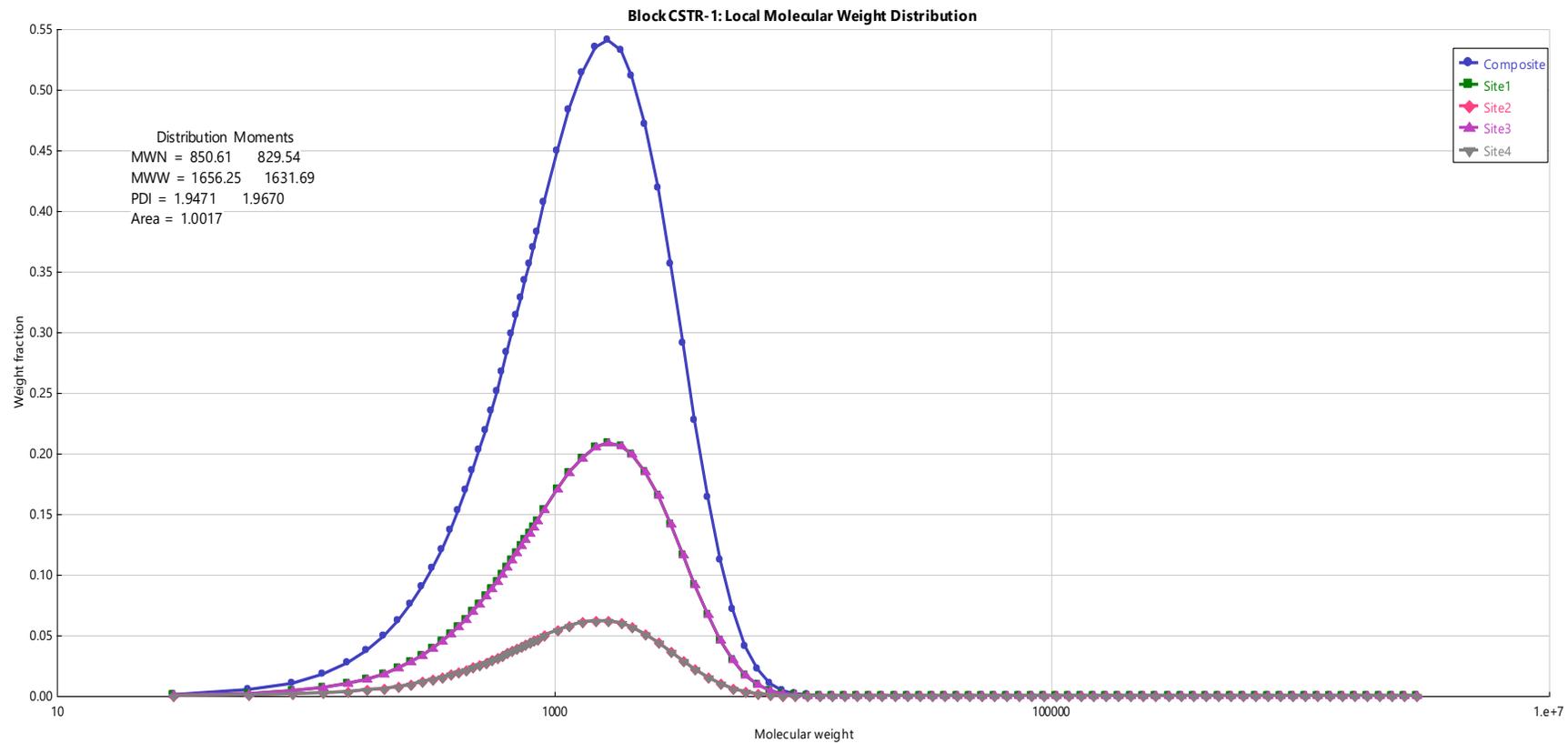


Figura 5-15. Distribución en peso de pesos moleculares del caso R1, sin recirculación.

*Grupo 2

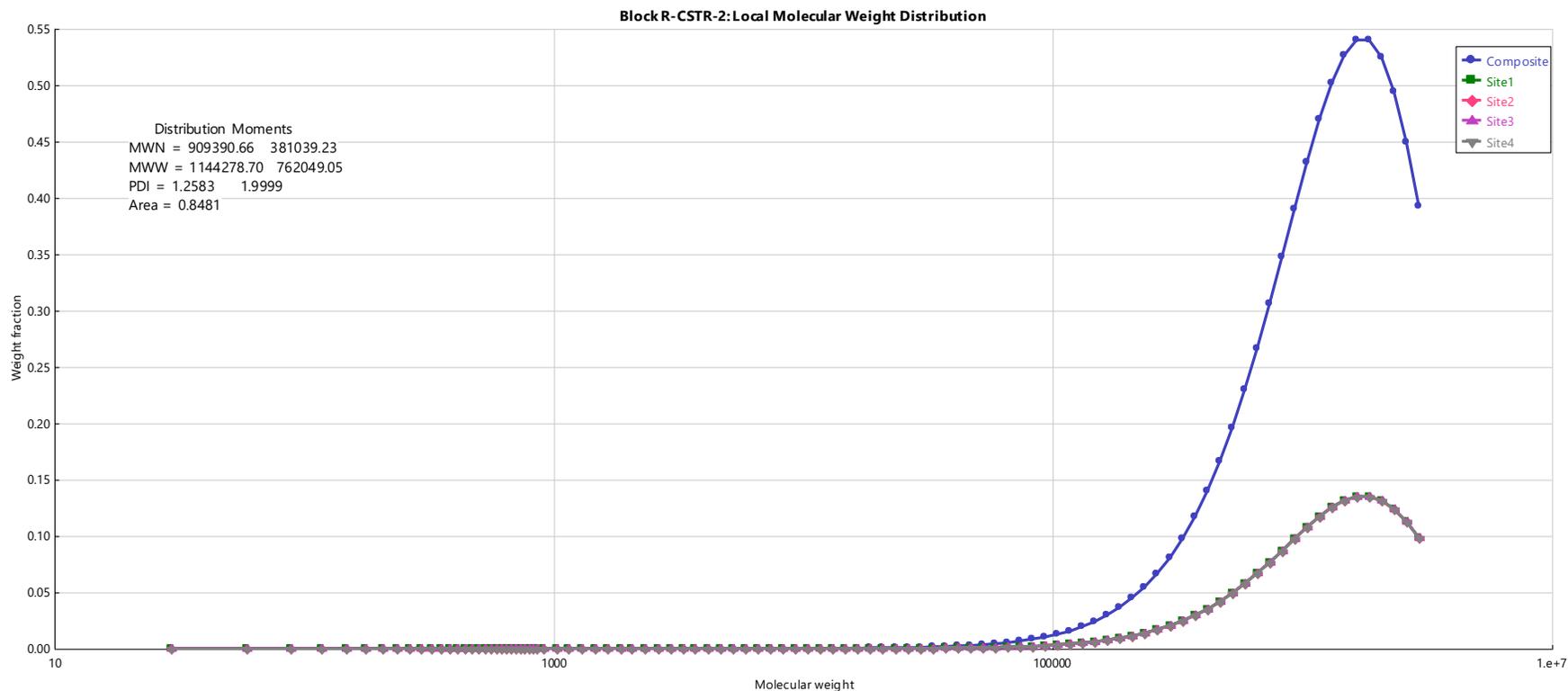


Figura 5-16. Distribución en peso de pesos moleculares del caso R2, sin recirculación.

La distribución en peso de pesos moleculares no se calculó en su totalidad para el caso R2 porque el límite predefinido fue de 10^5 unidades de tamaño de cadena, como se observa en la Figura 5-16. Debido a que este ajuste no garantizaría ser consistente para el proceso global se consideró como irrelevante el cálculo de la distribución en su totalidad.

*Grupo 3

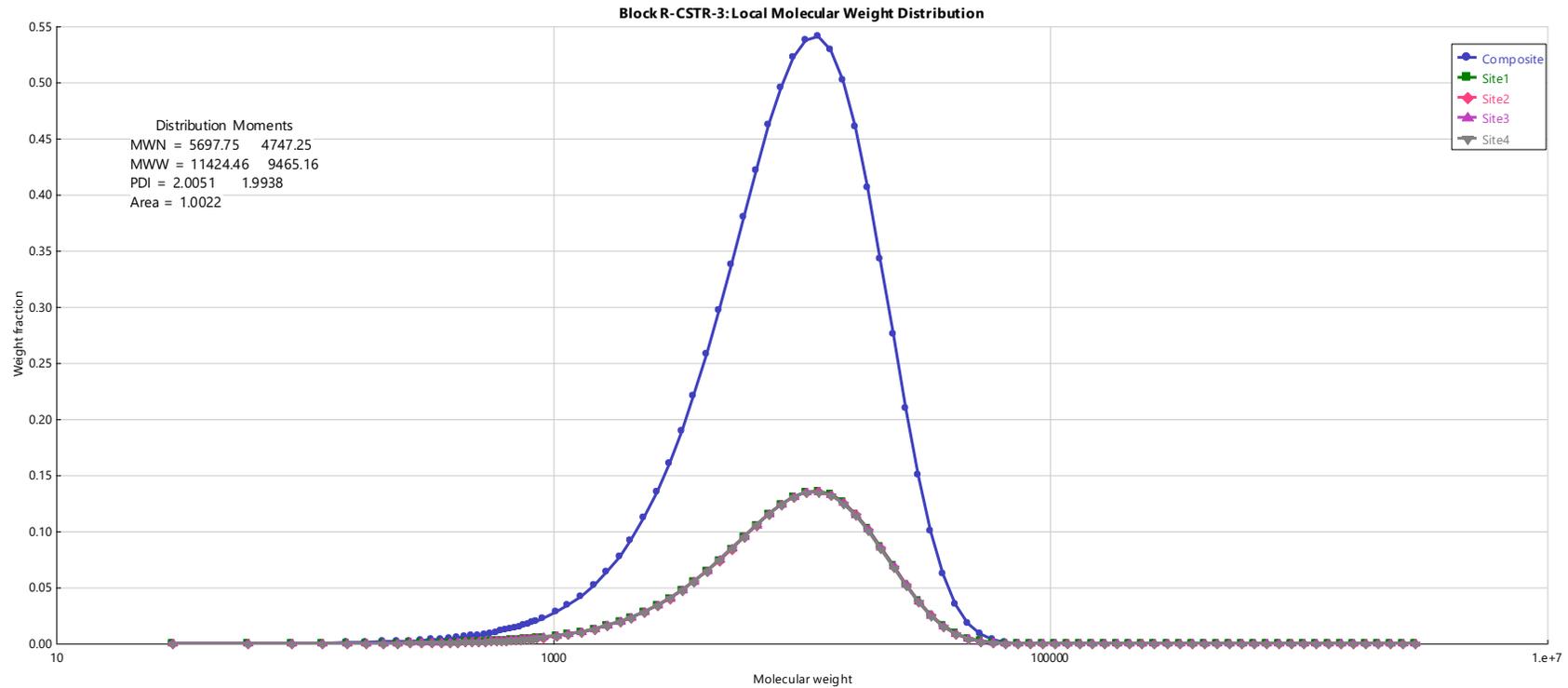


Figura 5-17. Distribución en peso de pesos moleculares del caso R3, sin recirculación.

Para el caso R3 sólo se consideró un tipo sitio, es decir, las constantes de los cuatro posibles sitios fueron iguales, por lo cual las distribuciones de cada uno de los sitios se empalman totalmente. Aunque se varió la eficiencia de cada uno de los tipos de sitios no existió un impacto en la distribución, igual que el caso R1.

5.6.1 Comparación de la distribución en peso de tamaño de cadena con Predici®

Con la finalidad de comparar las distribuciones obtenidas usando ASPEN PLUS se empleó la sección de copolimerización del simulador comercial especializado en reacciones poliméricas Predici® (Dr. Michael Wulkow-Computing in Technology GmbH), versión 2011. Se hicieron las siguientes consideraciones:

- Se descartó el volumen de la sección de separación; sólo se simuló la zona de reacción, es decir, el 40% del volumen total.
- Se emplearon dos tipos de polímero vivo, de acuerdo con sus grupos terminales: P1 (etileno) y P2 (1-buteno), más el polímero muerto.

La comparación se realizó para el caso R1. A pesar de tratarse de un caso simple, el simulador no pudo completar las 2.5h del tiempo de reacción establecidas en la programación. Sólo se lograron 24.4 min (0.40664h), lo que equivalió a 3 semanas de tiempo de cómputo en una computadora Dell con procesador Intel® Xeon® CPU E5-2609 v3 @ 1.90GHz, 1900 Mhz, con 6 procesadores principales y 6 procesadores lógicos.

Las distribuciones fueron semejantes, pero con ASPEN PLUS se obtuvieron pesos moleculares más pequeños, y se obtuvo mayor cantidad de producto que en el caso de Predici®. La Figura 5-18 compara las distribuciones en peso de los pesos moleculares generadas por ASPEN PLUS (t=0.4006h) y Predici® (t=0.40664h).

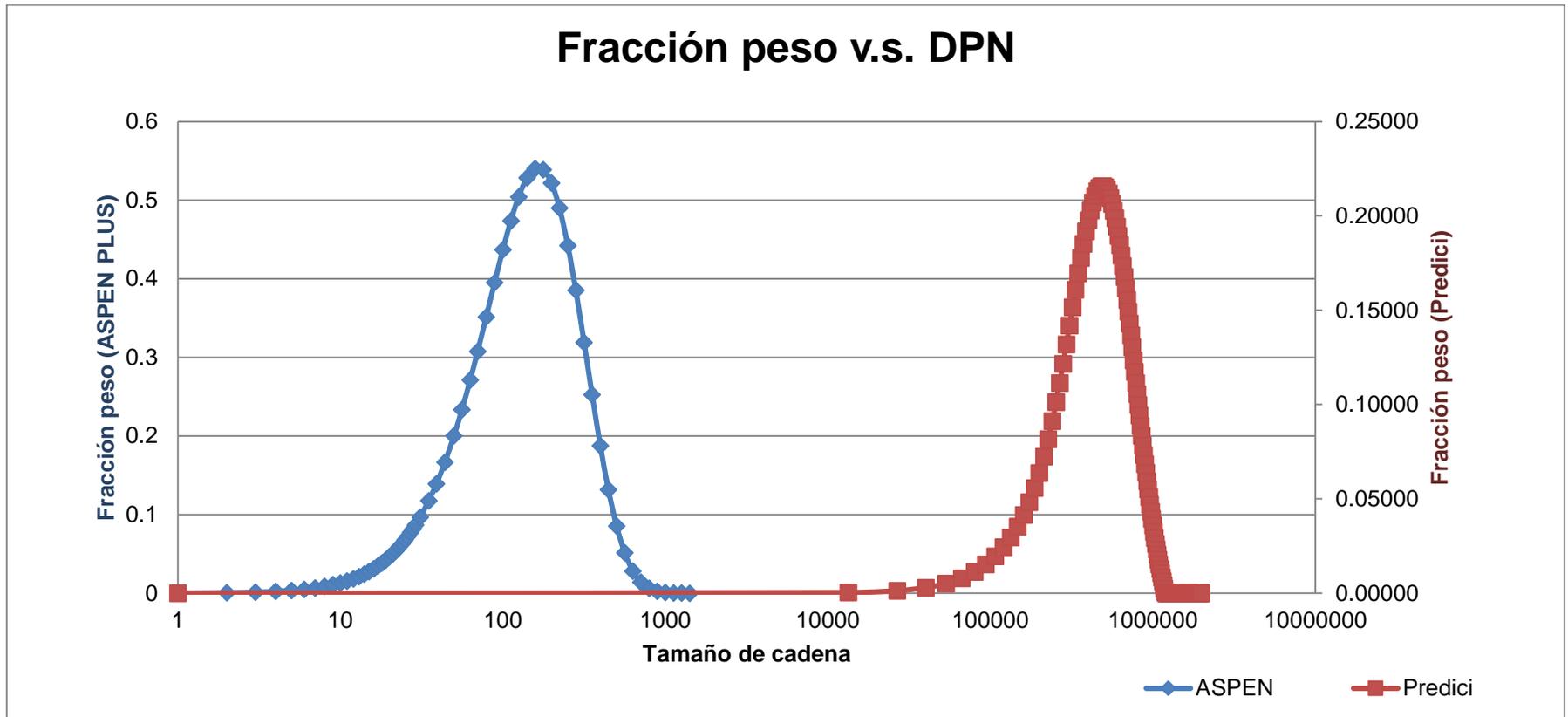


Figura 5-18. Comparación de la distribución de tamaño de cadena al tiempo 0.40664 horas de Predici® y ASPEN PLUS.

6. SIMULACIÓN DEL PROCESO GLOBAL DEL LLDPE

Se simuló el proceso de producción de polietileno lineal de baja densidad de la planta de la empresa Petróleos Mexicanos. La planta cuenta con la tecnología Univation (Figura 6-1).

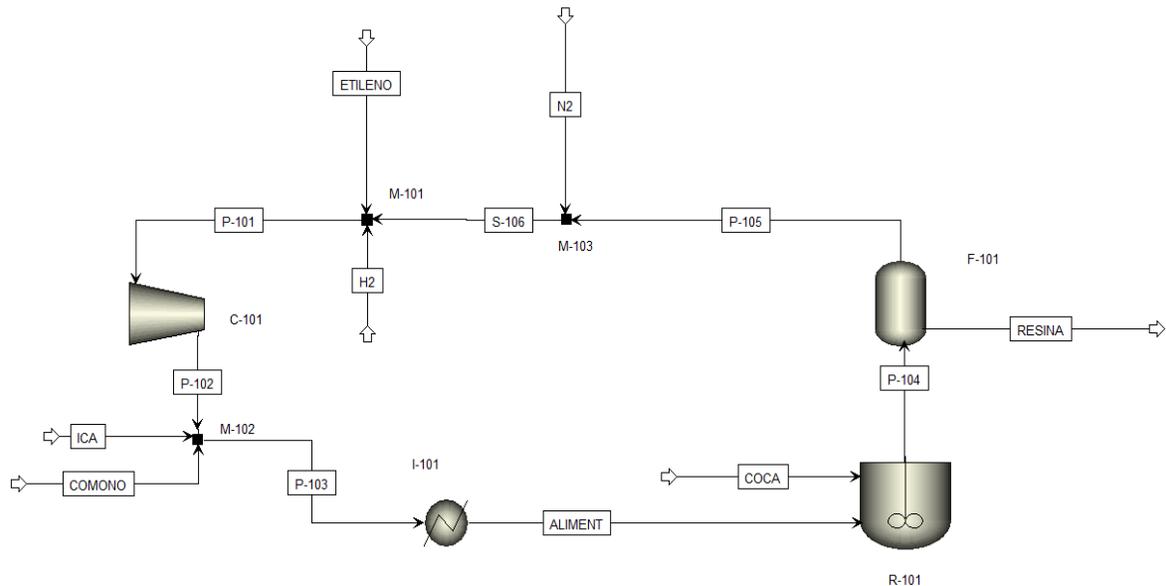


Figura 6-1. Diagrama de proceso LLDPE.

Se consideran seis entradas al proceso: nitrógeno (N₂), etileno (ETILENO), hidrógeno (H₂), isopentano (ICA), 1-buteno (COMONO) y una que combina al catalizador y cocatalizador, por simplificación (COCA). Sólo se simula la salida principal del LLDPE (RESINA). Es importante mencionar que existe un desfogue, no representado, que divide a la línea P-105 en dos. El reactor de domo expandido se dividió en 2 secciones representativas, un separador (P-104) y un reactor (R-101), además de tener un intercambiador (I-101) y un compresor (C-101) que operan en forma restringida para cumplir las condiciones de presión y temperatura de operación del reactor. Es decir, el compresor debe proporcionar una presión tal que la corriente de alimentación del reactor sea de 2.5 MPaG (2.5E+5PaG), considerando la caída de presión en el intercambiador con una temperatura de 84.5°C. La Tabla 6-1 muestra las condiciones de las corrientes de entrada al proceso.

Las corrientes de entrada a la recirculación N2, Etileno, H2, ICA y Comonomero deben tener una presión mayor a la recirculación en cada punto.

Tabla 6-1. Condiciones de las corrientes de entrada (kg/h).

Corriente	COCA	COMONO	ETILENO	H2	ICA	N2	
Flujo (kg/h)	ETILENO	0	0	33835	0	0	0
	BUTENO	0	3283.249	0	0	0	0
	TICL4	3.67	0	0	0	0	0
	TEA	4.51	0	0	0	0	0
	LLDPE	0	0	0	0	0	0
	H2	0	0	0	3.637	0	0
	ICA	0	0	0	0	706.024	0
	N2	0	0	0	0	0	2.42
	AGUA	0	0	0	0	0	0
TEMP K	298.15	303.86	275.21	295.06	303.66	298.36	
PRES PA	2.53E+06	3.11E+06	2.08E+05	2.22E+06	3.09E+06	2.55E+06	

La cinética de reacción fue adaptada para cumplir con los datos de planta: 37,025kg/h de LLDPE con una densidad de 932.7kg/m³ y un índice de fluidez (MI) de 2.11g/10min. El mejor ajuste se logró considerando el efecto de los grupos terminales principalmente en la transferencia al monómero. Debido al desconocimiento de información fundamental sobre el catalizador, también existió variación en la efectividad, en la concentración de sitios activos y se estableció la existencia de un sólo tipo de sitio, aunque en base a la naturaleza del catalizador debieron ser cuatro (Zhu et al., 2011).

Para calcular el MI se empleó la ecuación de Sinclair (McAuley et al., 1990):

$$M_w = 111,525MI^{-0.288}$$

El ajuste del conjunto de constantes para obtener este dato dependió mucho de considerar la ecuación de Sinclair. Como reportan Xie et al. (1994) la resina de LLDPE cuyo comonomero es 1-buteno no está descrita por la ecuación de Sinclair, pues los datos experimentales no siguen un comportamiento logarítmico. En la

Tabla 6-2 se listan las constantes cinéticas empleadas. Aquellas que fueron ajustadas incluyen en base a que fuentes se hicieron estas modificaciones.

Tabla 6-2. Constantes cinéticas de ajuste para datos en planta.

Reacción	#Sitio	Comp 1	Comp 2	k (l/mol*s)	Fuente
Activación espontanea	1,2,3,3	TICL4		1 [†]	*, **
Activación con cocatalizador	1,2,3,4	TICL4	TEA	20	Ajuste
Iniciación de cadena	1,2,3,4	ETILENO		1	*
Iniciación de cadena	1,2,3,4	BUTENO		0.1	*
Iniciación de cadena	1,2,3,4	E		0.0001	Ajuste *, **
Iniciación de cadena	1,2,3,4	B		1.00E-05	Ajuste *, **
Propagación	1,2,3,4	C2H4-R	ETILENO	451605	Ajuste *, ***
Propagación	1,2,3,4	C2H4-R	BUTENO	10626	Ajuste *, ***
Propagación	1,2,3,4	1-BUT-R	ETILENO	340032	Ajuste *, ***
Propagación	1,2,3,4	1-BUT-R	BUTENO	7969.5	Ajuste *, ***
Propagación	1,2,3,4	C2H4-E	ETILENO	451605	Ajuste *, ***
Propagación	1,2,3,4	C2H4-E	BUTENO	10626	Ajuste *, ***
Propagación	1,2,3,4	1-BUT-E	ETILENO	340032	Ajuste *, ***
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-R	ETILENO	0.0021	Ajuste *, ***
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-R	BUTENO	0.006	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-R	E	0.004	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-R	B	0.006	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	1-BUT-R	ETILENO	0.0021	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	1-BUT-R	BUTENO	0.006	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	1-BUT-R	E	0.004	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	1-BUT-R	B	0.006	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-E	ETILENO	0.0021	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-E	BUTENO	0.006	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-E	E	0.004	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-E	B	0.006	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	1-BUT-E	ETILENO	0.0021	*, **
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-R	TEA	0.024	**
T. de C. al monómero	1,2,3,4	1-BUT-R	TEA	0.048	**
T. de C. al monómero	1,2,3,4	C2H4-R	H2	0.1144	**
T. de C. al hidrógeno	1,2,3,4	1-BUT-R	H2	0.1144	**
T. de C. espontanea	1,2,3,4	C2H4-R		0.0001	**
T. de C. espontanea	1,2,3,4	1-BUT-R		0.0001	**

T. de C. espontanea	1,2,3,4	C2H4-E		0.0001	**
T. de C. espontanea	1,2,3,4	1-BUT-E		0.0001	**
Desactivación espontanea	1,2,3,4			0.0001 ♦	**

Notas:

T. de C.=Transferencia de cadena

♦Reacciones cinéticas de primer orden con unidades s^{-1}

*Khare (2003) **McAuley et al. (1990) ***Scarola (1985)

La simulación de ASPEN PLUS para el LLDPE arrojó los resultados mostrados en las Tablas 6-3 a la 6-9 y de las Figura 6-2 y 6-3.

Se obtuvo una diferencia del +2.2% entre la resina producida en planta, que es de 37,025.9 kg, y el proceso simulado, que es de 37,839.22 kg (Tabla 6-4). Por otro lado, la densidad de la resina calculada es de 925.7kg/m^3 (Tabla 6-5), mostrando una variación del -0.75% comparado con la experimental, que es de 932.7kg/m^3 .

Nota:

Se descartaron 100 de las 256 reacciones generadas automáticamente por ASPEN PLUS para el conjunto Ziegler-Natta. Las cuales fueron: activación del catalizador por hidrógeno y monómero, propagaciones de cadenas terminales, transferencias de las cadenas terminales al cocatalizador o hidrogeno, decaimiento del monómero e hidrógeno, así como la inhibición y reactivación de sitios por hidrógeno.

**Balance de materia molar y másico

Tabla 6-3. Balance molar (Kmol/h) del proceso de producción de LLDPE.

Componente	ALIMENT	COCA	COMONO	ETILENO	H2	ICA	N2
ETILENO	1206.0939	0.0000	0.0000	1206.0937	0.0000	0.0000	0.0000
BUTENO	58.5172	0.0000	58.5171	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
TICL4	0.0000	0.0193	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
TEA	0.0000	0.0395	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
LLDPE	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H2	4.6762	0.0000	0.0000	0.0000	1.8043	0.0000	0.0000
ICA	9.9014	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	9.7855	0.0000
N2	0.1794	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	8.6387E-02
AGUA	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Total	1279.3681	0.0589	58.5171	1206.0937	1.8043	9.7855	8.6387E-02

Componente	P-101	P-102	P-103	P-104	P-105	P-106	RESINA
ETILENO	1206.0939	1206.0939	1206.0939	0.0015	0.0002	0.0002	0.0013
BUTENO	0.0001	0.0001	58.5172	0.0031	0.0001	0.0001	0.0030
TICL4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0193	0.0000	0.0000	0.0193
TEA	0.0000	0.0000	0.0000	0.0166	0.0000	0.0000	0.0166
LLDPE	0.0000	0.0000	0.0000	1322.7997	0.0000	0.0000	1322.7997
H2	4.6788	4.6788	4.6788	3.8747	2.8745	2.8745	1.0002
ICA	0.1161	0.1161	9.9015	9.9014	0.1161	0.1161	9.7854
N2	0.1795	0.1795	0.1795	0.1794	0.0931	0.1795	0.0863
AGUA	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Total	1211.0684	1211.0684	1279.3709	1336.7958	3.0840	3.1704	1333.7119

Tabla 6-4. Balance de materia másico (kg/h) del proceso de producción de LLDPE.

Corriente	ALIMENT	COCA	COMONO	ETILENO	H2	ICA	N2
ETILENO	33835.000	0.000	0.000	33835.000	0.000	0.000	0.000
BUTENO	3283.252	0.000	3283.249	0.000	0.000	0.000	0.000
TICL4	0.000	3.670	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
TEA	0.000	4.510	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
LLDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2	9.427	0.000	0.000	0.000	3.637	0.000	0.000
ICA	714.390	0.000	0.000	0.000	0.000	706.024	0.000
N2	5.025	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	2.420
AGUA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Total	37847.094	8.180	3283.249	33835.000	3.637	706.024	2.420

Corriente	P-101	P-102	P-103	P-104	P-105	P-106	RESINA
ETILENO	33835.000	33835.000	33835.000	0.042	0.006	0.006	0.036
BUTENO	0.004	0.004	3283.252	0.173	0.004	0.004	0.170
TICL4	0.000	0.000	0.000	3.670	0.000	0.000	3.670
TEA	0.000	0.000	0.000	1.900	0.000	0.000	1.900
LLDPE	0.000	0.000	0.000	37123.000	0.000	0.000	37123.000
H2	9.432	9.432	9.432	7.811	5.795	5.795	2.016
ICA	8.374	8.374	714.398	714.390	8.374	8.374	706.016
N2	5.028	5.028	5.028	5.025	2.608	5.028	2.417
AGUA	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Total	33857.838	33857.838	37847.110	37856.011	16.786	19.206	37839.225

**Principales variables de proceso.

Tabla 6-5. Variables de proceso.

	CORRIENTES						
VARIABLE	ALIMENT	COCA	COMONO	ETILENO	H2	ICA	N2
FLUJO M. m³/h	19621	0.77	94.99	251740	35.06	19.65	1.48
FLUJO V. m³/s	0.1764	0.3024	0.144	0.144	0.108	0.144	0.144
TEMP K	298.15	298.15	303.86	275.21	295.06	303.66	298.36
PRES Pa	2,500,000	2,500,000	3,000,000	2,500,000	2,500,000	3,071,325	205,689.7
ρ gm/cc	19621	0.77	94.99	251740	35.06	19.65	1.48

	CORRIENTES						
VARIABLE	P-101	P-102	P-103	P-104	P-105	P-106	RESINA
FLUJO M. m³/h	252860	30242	29397	777.31	61.89	63.42	775.15
FLUJO V. m³/s	0.144252	0.754992	0.64134	0.3042	0.3024	0.298296	0.3024
TEMP K	275.21	299.16	299.16	298.15	298.15	298.15	298.15
PRES Pa	219,1325	305,1325	2,521,325	205,689.7	2601,325	2601,325	2,500,000
ρ gm/cc	252,860	30,242	29,397	777.31	61.89	63.42	925.7

**Información de equipos:

Tabla 6-6. Datos del intercambiador.

Intercambiador		
Temperatura de salida	322.15	K
Presión de salida	2.5E+6	Pa
Vapor fracción	1	
Calor	-6.48E+05	cal/sec
Área	1.42483667	m ²

Tabla 6-7. Datos del Reactor.

Reactor: R1+F1		
Temperatura de salida	358.65	K
Presión	2.41E+5	Pa
Calor neto	-8.98E+06	cal/sec
Volumen del reactor	2.80E+05	l
Tiempo de residencia	3	hr

Tabla 6-8. Datos del compresor.

Compresor		
Modelo	Isoentrópico	
Fuerza indicada	73.46	kW
Potencia al freno	92.73	kW
Potencia perdida	19.273	kW
Eficiencia	0.95	
Eficiencia Mecánica	0.9	
Presión de salida	2601330	Pa
Temperatura de salida	482.9	K
Fracción de vapor	1	

****Distribuciones poliméricas:**

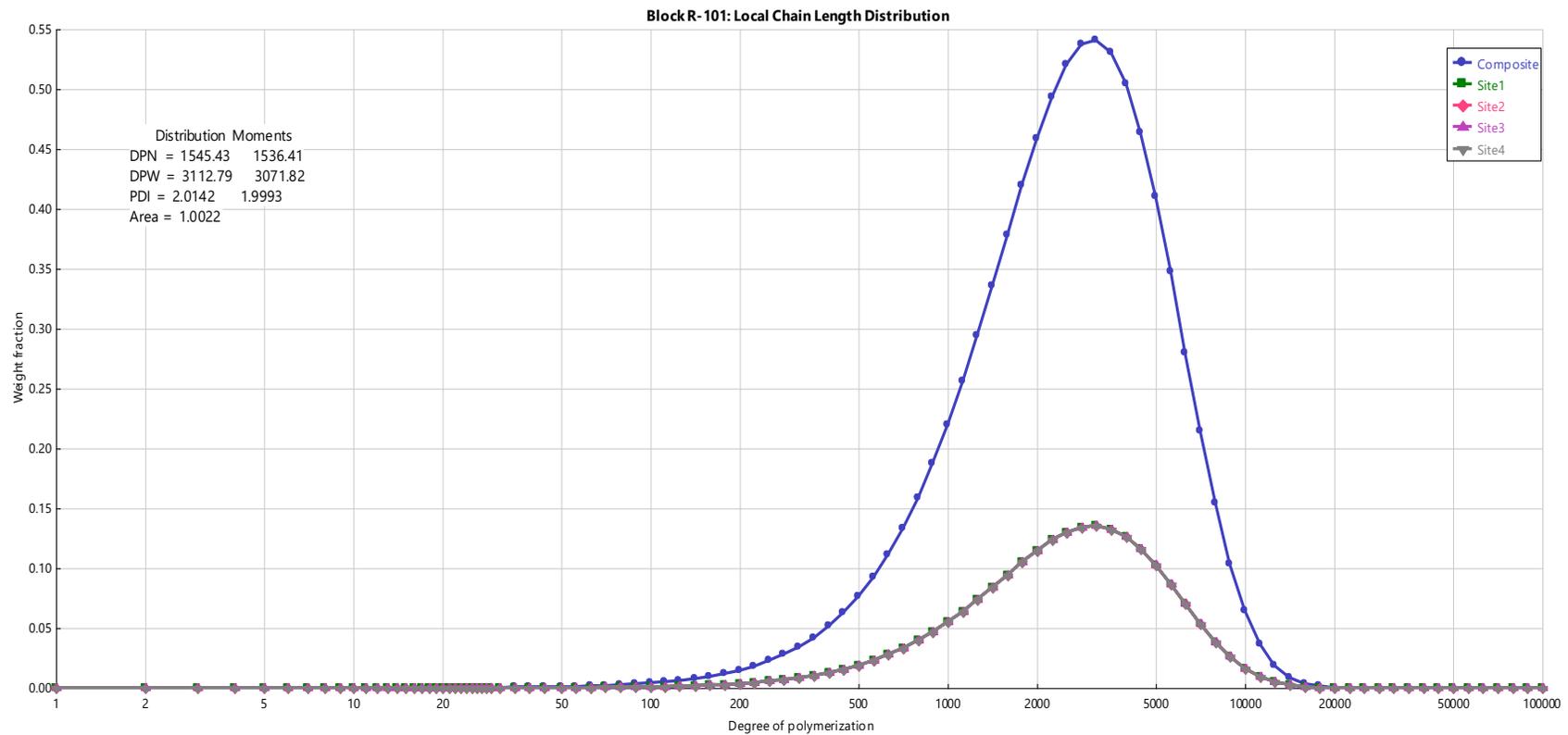


Figura 6-2. Distribución en peso de tamaño de cadena.

El rango de la distribución en peso de tamaño de cadena de 100 a 1000 coincide con lo reportado por Alizadeha (2004), como se muestra en la Figura 6-2 en comparación con la Figura 6-3.

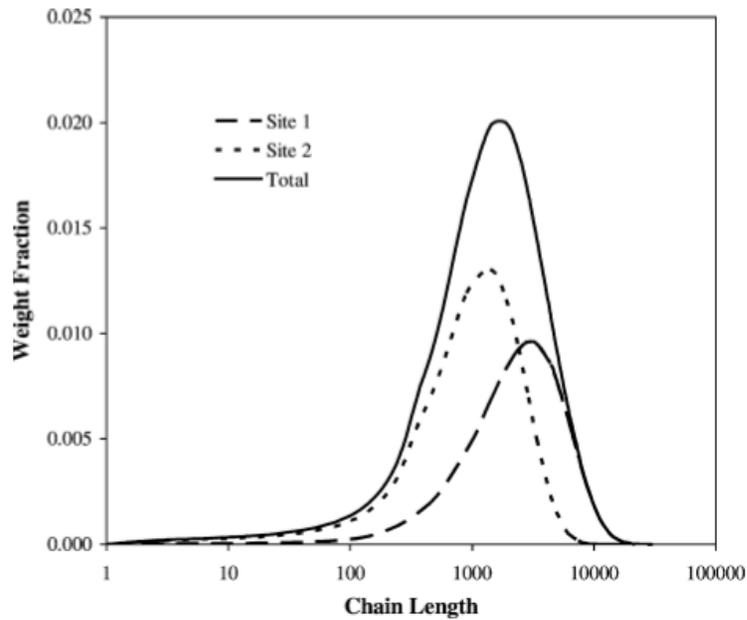


Figura 6-3. Distribución en peso de tamaño de cadena para el LLDPE (Alizadeha, 2004).

"Reprinted from *Chemical Engineering Journal*, 97/1, Mahmood Alizadeh, Navid Mostoufi, Saeed Pourmahdian, Rahmat Sotudeh-Gharebagh, *Modeling of fluidized bed reactor of ethylene polymerization*, Pages No. 27-35, Copyright (2016), with permission from Elsevier ." Also Lancet special credit - "Reprinted from *The Lancet*, Vol. 97, Mahmood Alizadeh, Navid Mostoufi, Saeed Pourmahdian, Rahmat Sotudeh-Gharebagh, ,*Modeling of fluidized bed reactor of ethylene polymerization*, Pages No. 27-35, Copyright (2016), with permission from Elsevier."

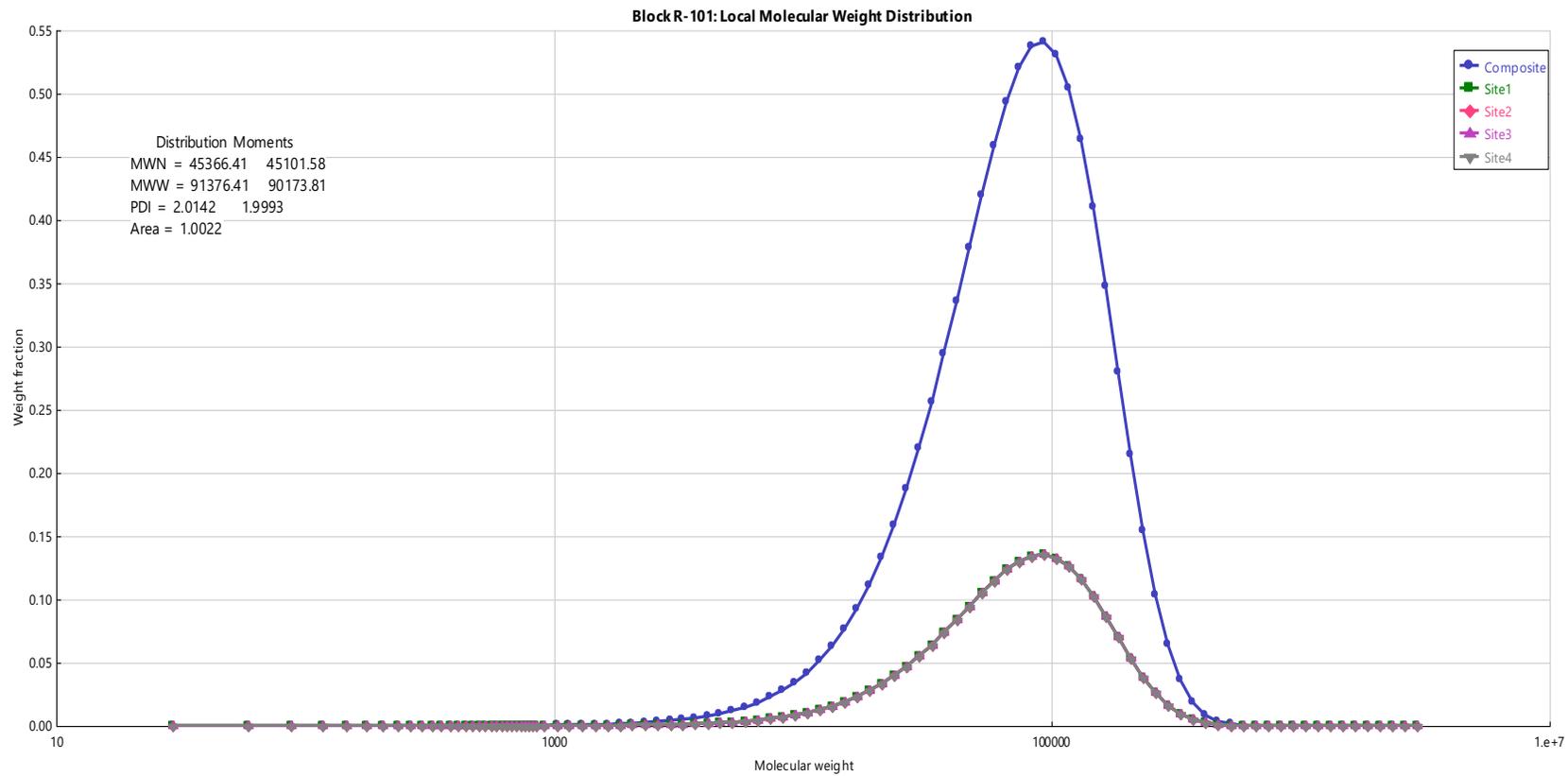


Figura 6-4. Distribuciones en peso de tamaño de cadena.

La ecuación de Sinclair permite relacionar el promedio en peso de pesos de moleculares (\overline{Mw}) con el índice de fluidez (MI) (Sinclair,1983).

$$\ln \overline{Mw} = 11.622 - 0.288 \ln MI$$

En base al promedio en peso de pesos moleculares obtenido de la simulación se calcula el MI. Los resultados se encuentran en la Tabla 6-9.

Tabla 6-9. Calculo del MI.

Sinclair	MWW	MI
Distribución	91376.41	1.99743903
Momento	90173.81	2.09146961

La densidad calculada en base del promedio en peso de pesos moleculares por el método de momentos es de 925.7kg/m³ y tiene una variación del -0.75% en base a la experimental que es de 932.7kg/m³.

El Anexo III incluye información del reactor obtenida directamente de ASPEN PLUS.

7. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos dependieron mucho de las consideraciones realizadas. Cualquier alteración en alguna de ellas puede provocar cambios significativos. La ventaja es que estas consideraciones no implican restricciones en condiciones de cálculo respecto a un rango de densidad o composición de la resina, ni una secuencia de cálculo que dependa del monómero o comonómero, dando una buena flexibilidad a diversos tipos de cambios, como es el caso del LLDPE donde podría variarse el comonómero de 1-buteno a 1-hexeno y obtener resultados idóneos.

Simulación de Polietileno de Baja Densidad

- La conversión es del 12% respecto al etileno que entra al reactor, lo cual cumple con los datos reportados por Fred et al. (2004) y Zhou (2011).
- El promedio en número del tamaño de cadena de 24,692 en el cálculo de momentos cae en el intervalo de las resinas de 25,900 a 15,800. De igual forma el promedio en peso de pesos moleculares es de 85,498, en el cálculo por momentos, desfasándose ligeramente del rango de 222,000 a 88,300. Al no conocer las condiciones de proceso exactas que generaron cada una de estas resinas podemos creer que los resultados son coherentes, en base a los intervalos considerados (Zabisky et al., 1992).
- El índice de fluidez de 2.52g/10min es coherente con la baja conversión obtenida y el rango de temperatura, de acuerdo con lo reportado por Fred et al. (2004) y Zhou (2011).

Simulación de Polietileno Lineal de Baja Densidad.

Se puede considerar que la simulación de Polietileno Lineal de Baja Densidad fue capaz de replicar adecuadamente el proceso en planta, en base a las siguientes observaciones:

- Existe una diferencia del +2.2% entre masa de la resina producida en planta (37,025.9 kg) y el proceso simulado (37,839.22kg).
- El índice de fluidez (MI) en la simulación (2.09g/10min) tiene un déficit 0.95% respecto al obtenido del análisis de laboratorio de la resina (2.11g/10min).
- La densidad calculada (925.7kg/m^3) tiene una variación del -0.75%, comparada con la experimental (932.7kg/m^3).

Para obtener una simulación en ASPEN PLUS capaz de reproducir y predecir las características de la resina al variar las condiciones de operación, catalizador y alimentación deben existir un mayor conjunto de datos.

La simulación de Polietileno de Baja Densidad en ASPEN PLUS generó resultados en el intervalo de los reportados en los artículos que sirvieron de base para el cálculo, aunque no se contó con los datos de proceso de una corrida específica, sino con una mezcla de varias de ellas.

La simulación de Polietileno Lineal de Baja Densidad en ASPEN PLUS fue capaz de reflejar el comportamiento de valores de planta y experimentales, a pesar del desconocimiento que se tenía de las principales características del catalizador.

La ventaja de simular en ASPEN PLUS son las múltiples modificaciones de las condiciones de proceso (composición, temperatura, presión o volumen) que se pueden realizar. Ello permitiría diseñar las condiciones requeridas para producir distintos tipos de resinas.

La principal desventaja es contar con toda la información requerida del catalizador, además de que es necesario declarar información experimental para lograr obtener resultados coherentes con la realidad.

El simulador Predici® ofrece una buena alternativa para la caracterización del polímero, siendo mejor la descripción del polímero, pero su mayor limitante es que sólo es posible el cálculo del reactor, mas no de otros equipos; y de igual manera se requiere un mayor tiempo de cálculo.

8. REFERENCIAS

Alizadeh, M., Mostoufi, N., Pourmahdian, S. & Sotudeh-Gharebagh, R. (2004). Modeling of fluidized bed reactor of ethylene polymerization. *Chemical Engineering Journal*, 97, Pp. 27-35.

Asteasuain, M., Brandolin, A. (2007). Optimal Operation of Ethylene Polymerization Reactors for Tailored Molecular Weight. Distribution. *Journal of Applied Polymer Science*, 105, PP. 2621–2630.

Braskem-IDES A (2016). Catalogo de productos. Braskem-IDES A. Junio 22, 2016. Braskem-IDES A. Sitio web:

<http://www.braskem.com.br/Idesa/catalogos>

Bokis, C. P., Ramanathan, S., Franjione, J., Buchelli, A., Call, M. L. & Brown, A. (2002). Physical Properties, Reactor Modeling, and Polymerization Kinetics in the Low Density Polyethylene Tubular Reactor Process. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41, Pp. 1017-1030.

Buback, Michael. (1980). The High Pressure Polymerization of Pure Ethylene. *Macromolecular Chemistry and Physics* 181, Pp. 373-382.

Carvalho, A. B., Gloor, P. E., & Hamielec, A. E. (1989). A kinetic mathematical model for heterogeneous Ziegler–Natta copolymerization. *Polymer*, 30, Pp. 280–296.

Cervantes, A. M., Tonelli, S., Brandolin, A., Bandoni, J. A. & Biegler, L. T. (2000). Large-scale dynamic optimization for grade transitions in a low density polyethylene plant. *Computers and Chemical Engineering*, 24, Pp. 983-989.

Cervantes, A. M., Tonelli, S., Brandolin, A., Bandoni, J. A. & Biegler, L. T. (2002). Large-scale dynamic optimization for grade transitions in a low density polyethylene plant. *Computers and Chemical Engineering*, 26, Pp. 227-237.

Chemicals-technology (2016). Braskem-Idesa Integrated Polyethylene Production Plant, Veracruz, Mexico. Mayo 26, 2016, de Chemicals-technology. Sitio web: <http://www.chemicals-technology.com/projects/braskem-idesa-integrated-polyethylene-production/>

Delgado, K. A. V. (2007) Estudio de la polimerización de etileno en sistemas homogéneos y heterogéneos (Tesis de pregrado). Chile: Universidad de Chile.

Erp (2014). Industria del plástico prevé alza del 15% en el 2020. Mayo 23, 2016, de El economista. Sitio web: <http://eleconomista.com.mx/industrias/2014/08/21/industria-plastica-preve-alza-15-2020>.

Fawcett, E. W., Gibson, R. O., Perrin, M. W., Paton, J. G. & Williams, E. G. Br. Pat. 471590. (ICI); Chemical Abstract 1938, 32, 13626.

Fred, Z.Y., Ali, L., Simant, R.U & Ramdhane, D., (2004), Modeling, Simulation and Optimal Control of Ethylene Polymerization in Non-Isothermal High Pressure Tubular Reactors, International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2 (16).

Gross, J., Sadowski, G. (2002). Modeling polymer systems using the perturbed-chain statical associating fluid theory equation of state. Industrial & Engineering Chemistry Research, 41, Pp. 1084-1093.

Gross, J., Sadowski, G. (2001). Perturbed-Chain SAFT: An equation of state based on a perturbation theory for chain molecules. Industrial & Engineering Chemistry Research, 40, Pp. 1244.

Gupta, S.K. (1987). Low density polyethylene (LDPE) polymerization-A review. Current Science. Vol. 56, No. 19, Pp. 979-984

Hatzantonis, H., Yiannoulakis, H., Yiagopoulos, A., Kiparissides, C. (2000). Recent developments in modeling gas-phase catalyzed olefin polymerization fluidized-bed reactors: The effect of bubble size variation on the reactor's performance. Chemical Engineering Science 55, Pp. 3237-3259

Höfale, M. (2005). Dynamic simulation of a Low-density polyethylene using adaptive method of lines. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 183, Pp. 288-300.

Huang, S. H. & Radosz, M. (1990). Equation of State for Small, Large, Polydisperse, and Associating Molecules. *Industrial and Engineering Chemistry Research.*, 29, Pp. 2284-2294.

Khare, N. P. (2003). Tesis de doctorado. Predictive Modeling of Metal-Catalyzed Polyolefin Processes. Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University, Estados Unidos de America.

Khare, N. P., Lucas, B., Seavey, K. C. & Liu, Y. A. (2004). Steady-State and Dynamic Modeling of Gas-Phase PolyPropylene Process Using Stirred-Bed Reactors. *Journal of Industrial Engineering Chemistry*, 43, Pp. 884-900.

Kehinde, A. J., Usman M. A., Eloga, M. O. & Owolabi, R. U. (2012). Emerging Issues in the Mechanisms of High Pressure Free Radical Ethylene Polymerization: A Review. *American Journal of Polymer Science*, 2(5). Pp 91-101.

Kissin, Y. V. (1985). *Isospecific Polymerization of Olefins with Heterogeneous Ziegler-Natta Catalysts*; Springer-Verlag: New York.

Lyondellbasell. Licensed polyolefin technologies and Services. LupoTech. Consultado: 23/08/2016. Sitio web:

<https://www.lyondellbasell.com/globalassets/products-technology/technology/LupoTech-brochure.pdf>

Malpass B. Dennis (2010) *Introduction to Industrial Polyethylene: Properties, Catalysts, Processes*. Ed. Wiley. Published simultaneously in Canada and USA.

Mavrisdis, I. & Kiparissides, C. (1985). Optimization of a High-Pressure Polyethylene Tubular Reactor. *Polymer Process Engineering*, 3(1), Pp. 263-290.

McAuley, K. B., MacGregor, J. F. & Hamielec, A. E. (1990). A kinetic Model for Industrial Gas-Phase Ethylene Copolymerization. American Institute of Chemical Engineering Journal, 36, Pp. 837-850.

Moore, S. J. & Wanke, S. E. (2001) Solubility of ethylene, 1-butene and 1-hexene in polyethylenes. Chemical Engineering Science 56, Pp. 4121–4129.

Mun, T. C. (2010). Production of Polyethylene Using Gas Fluidized Bed Reactor. KLM Technology Group. Consultado: 23 de mayo del 2016. Sitio Web: <http://www.klmtechgroup.com/PDF/Articles/articles/Fluidized-Bed-Reactor.pdf>

Odian, G (1991). "Principles of polymerization", John Wiley & Sons. Third edition. USA.

Orea-Cortina, Diana (2014). Notas: Simulación de la producción de polietileno de baja densidad en Aspen Plus. Universidad Veracruzana. México.

PEMEX/411581. (2016). Polímeros. Polietileno Lineal de Baja Densidad. Consultado: 23 de mayo del 2016. Sitio web: <http://www.ptq.pemex.com.mx/productosyservicios/productos/Polímeros/Paginas/PEBDL.aspx>

Saldívar-Guerra, E. & Vivaldo-Lima, E. (2013). Handbook of Polymer Synthesis, characterization and Processing. John Wiley & Sons. USA.

Sanchez, I. C., Lacombe, R. H. (1978). Statical Thermodynamics of Polymer Solution. Macromolecules, 11(6), Pp.1145-1156.

Scarola, L. S. (1985, Junio). Basic Properties and Application of LLDPE Produced by the Unipol Process. ApliChem, Bratislava, Czechoslovakia.

Sinclair, K. B. (1983). Characteristic of linear LPPE and description of UCC gas phase process, SRI International, USA.

Soga, K. & Shiono, T. (1997). Ziegler-Natta Catalysts for Olefin Polymerizations. *Progress in Polymer Science*, 22, Pp. 1503-1546.

Soto, D. A. (2013). Análisis del mezclado de un reactor de polimerización de etileno (Tesis de maestría). Colombia: Universidad Nacional de Colombia.

Vaughan, A., Davis, D. S. & Hagadorn, J. R. (2012). Industrial Catalysts for Alkene Polymerization. ExxonMobil Chemical Company, Pp. 657-672.

Wypyv, G. (2016). LLDPE linear low density polyethylene. En *Handbook of Polymers* (185-189). Estados Unidos de America: DhemTec Publishing.

Wypyv, G. (2016). LDPE low density polyethylene. En *Handbook of Polymers* (178-184). Estados Unidos de America: DhemTec Publishing.

Xie, T., McAuley, K.B., Hsu, J. C. C. & Bacon, D. W. (1994). Gas Phase Ethylene Polymerization: Production Processes, Polymer Properties and Reactor Modeling. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33, Pp. 449-479.

Yamamoto, R. (2015). Un Modelo de Reactor en Lecho Fluidizado para Polietileno Lineal de Baja Densidad (Tesis de maestría). México: Centro de Investigación en Química Aplicada.

Zabisky, R. C. M., Chan, W. M., Gloor, P. E. & Hamielec, A. E. (1992). A kinetic model for olefin polymerization in high-pressure tubular reactors: a review and update. *Polymer*, 33, Pp. 2243-2262.

Zhou, W., Marshall, E., Oshinowo, L. (2001) Modeling LDPE Tubular and Autoclave Reactor, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40, Pp. 5533-5542

Zhu, X., Guo, Z., Cen, W., & Mao, B. (2011). Ethylene Polymerization Using Improved Polyethylene Catalyst. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 19, Pp. 52-56.

9. ANEXOS

I. Modelos Termodinámicos.

La Tabla 9-1 resume todos los modelos disponibles en ASPEN PLUS para la sección de polímeros. Incluye su base, uso recomendado y limitaciones.

Tabla 9-1. Métodos de cálculo de propiedades termodinámicos.

Método Termodinámico	Base	Uso	Limitaciones
PolyPCSAFT	SAFT original	Sistemas homopolímero. Sistemas polares y no polares.	No contiene: asociaciones, condiciones polares
PolyNRTL	Extensión NRTL (fase líquida) /Ecuación de estado de Redlich-Kwong (Fase vapor) /Modelo vanKrevelen (Propiedades del líquido) /Ley de Henry (Componentes Supercríticos)	Sistemas con Presión baja o moderada. Sistemas Copolímero con datos experimentales. /Sistemas polares y no polares.	No aplicable en la proximidad del punto crítico
PolyFH	Flory-Huggins(líquido)/Ecuación de estado Redlich-Kwong(RK) (fase vapor) /Modelo de van Krevelen (Propiedades de líquidos) / Ley de Henry (Componentes súper críticos)	Alta concentración de solventes. También para baja concentración de solventes.	No en sistemas polares. Sólo se puede usar en equilibrio de fases en altas presiones con ecuaciones cúbicas de estado.
PolySL	Ecuación de estado de Sanchez-Lacombe (líquido-vapor, todas las propiedades termodinámicas y calorimétricas) /Modelo del gas ideal	Polímeros y soluciones de polímeros. Cuenta con una extensión para copolímero. Recomendables	Sistemas polares

	(Contribución calorimétrica del gas)	para sistemas polares de altas a bajas presiones. Consistente en condiciones críticas	
PolySRK	Soave-Redlich-Kwong (Líquido-vapor: propiedades termodinámicas y calorimétricas) / Gas ideal (Contribución calorimétrica del gas) / Modelo de Van Krevelen (volumen molar del líquido)	Sistemas polares y no polares. Altas y bajas presiones	Necesidad de datos extras en mezclas: T_c , P_c y constantes de Mathia-Copeman.
PolyUF	UNIFAC(líquido)/Redlich-Kwong(vapor)/modelo van Krevelen (propiedades del líquido) /Ley de Henry (propiedades supercríticas)	Procesos de baja y moderada presión. Sistemas con información no experimental. Fluidos polares y no polares. Homopolímero y copolímero.	Menos confiable en sistemas no ideales (fuerte asociación o solvatación). Rango fiable 300-425K
PolyUFV	UNIFAC-FV(líquido)/Redlich-Kwong(vapor)/modelo van Krevelen (propiedades del líquido) /Ley de Henry (propiedades supercríticas) /modelo de Tai (volumen molar del líquido)	Procesos de baja y moderada presión. Sistemas con información no experimental. Fluidos polares y no polares. Homopolímero y copolímero.	No se puede aplicar en las proximidades del punto crítico. Rango fiable 300-425K
PolyPCSF	Original PC-SATF (la teoría de las perturbaciones de Gross y Sadowski en el 2001 y 2002).	Sistemas de homopolímero.	No contiene: asociaciones, condiciones polares

EP-NRTL	Electrolyte-Polymer Non-Random Two-Liquid	Electrolitos orgánicos acuosos y sistemas químicos complejos con oligómeros, polímeros y electrolitos.	No aplica a soluciones no ideales de polielectrólitos (formación de micelas)
----------------	---	--	--

Los modelos recomendados para copolímero son PolySL y PolyPCSF.

I.II PC-SAFT.

PC-SAFT (Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory) fue desarrollado por Gross y Sadowski (2001-2002). Se basa en la teoría SAFT y consiste en modelar las interacciones generadas por una cadena larga.

La propiedad residual es la diferencia entre la propiedad real y la propiedad ideal, es decir, una propiedad en exceso. SAFT considera a la propiedad residual como la suma de los efectos de repulsión entre segmentos, la presencia de enlaces covalentes en las moléculas y las interacciones por asociaciones.

$$\frac{A^{pert}}{RT} = \frac{A_1}{RT} + \frac{A_2}{RT}$$

A=Energía libre de Helmholtz, depende de la densidad, composición y el tamaño molecular.

Parámetros necesarios para cualquier sustancia:

m=Número de segmento.

σ =Diámetro de segmento.

ϵ =Energía del segmento.

Requiere de datos del equilibrio líquido-vapor del polímero y solvente para tener una mejor predicción en bajas presiones, y para altas información del equilibrio líquido-líquido.

Para copolímero:

$$\sigma_p = \sum_A^{N_{Seg}} X_A \sigma_A$$

$$\epsilon_p = \sum_A^{N_{Seg}} X_A \epsilon_A$$

$$m_p = M_n \sum_A^{N_{Seg}} X_A r_A$$

σ_p =Promedio del diámetro del segmento para el copolímero.

ε_p =Promedio de energía del segmento para el copolímero.

m_p =Promedio de tamaño de cadena del segmento para el copolímero.

N_{seg} =Número de distinción del tipo de segmento en el copolímero.

X_A =Fracción mol o fracción peso del segmento tipo A en el copolímero.

σ_A =Diámetro del segmento A.

ε_A =Energía del segmento A.

M_n =Promedio en número de peso molecular del segmento para el copolímero.

I.III Sanchez-Lacombe.

Ecuación de estado de Sanchez-Lacombe basada en la teoría de red de Sanchez y Lacombe (1976).

$$\tilde{\rho} + \tilde{P} + \tilde{T} \left[\ln(1 - \tilde{\rho}) + \left[1 - \frac{1}{m} \right] \tilde{\rho} \right] = 0$$

Donde:

$$\tilde{T} = \frac{T}{T^*}$$

$$\tilde{\rho} = \frac{M}{mv^*}$$

$$P^* = \frac{\varepsilon^*}{v^*}$$

$$\tilde{P} = \frac{P}{P^*}$$

$$T^* = \frac{\varepsilon^*}{k}$$

$$\rho^* = \frac{M}{mv^*}$$

k=Constante de Boltzmann.

M=Peso molecular promedio.

ρ =Densidad.

T=Temperatura.

Los parámetros necesarios para caracterizar un fluido son:

m= Número de segmentos por cadena.

ε^* =Energía de interacción característica por segmento.

v^* =Volumen de segmento.

Para homopolímero las reglas de mezclado son:

$$\varepsilon_{mix}^* = \frac{1}{v_{mix}^*} \sum_i \sum_j \phi_i \phi_j \varepsilon_{ij}^* v_{ij}^*$$

$$\frac{1}{m_{mix}} = \sum_i \frac{\phi_i}{m_i}$$

$$v_{mix}^* = \sum_i \sum_j \phi_i \phi_j v_{ij}^*$$

$$\phi_i = \frac{\frac{w_i}{p_i^* v_i^*}}{\sum_j \frac{w_j}{p_j^* v_j^*}}$$

Donde:

ϕ_i =Fracción volumen del componente i.

w_i =Fracción peso del componente i.

$$v_{ij}^* = \frac{1}{2} [v_{ii}^* + v_{jj}^*] (1 - n_{ij})$$

$$\varepsilon_{ij}^* = \sqrt{\varepsilon_{ii}^* \varepsilon_{jj}^*} (1 - k_{ij})$$

n_{ij} = Parámetro de interacción binaria, equilibrio líquido-líquido.

$$n_{ij} = a'_{ij} + \frac{b'_{ij}}{T_r} + c'_{ij} \ln(T_r) + d'_{ij} T_r + e'_{ij} T_r^2$$

k_{ij} = Parámetro de interacción binaria, equilibrio líquido-vapor.

$$k_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T_r} + c_{ij} \ln(T_r) + d_{ij} T_r + e_{ij} T_r^2$$

Donde:

$$T_r = \frac{T}{T_{ref}}$$

T_{ref} =Temperatura de referencia.

a, b, c, d, e, a', b', c', d', e'= Parámetros de ajuste.

Información tomada de la guía de ayuda del simulador ASPEN PLUS 8.2.

II. LDPE (Low Density Polyethylene).

II.I Balance de materia molar para el proceso de producción de LDPE.

Tabla 9-2. Balance de materia molar (kmol/h) para el proceso global de producción de LDPE.

Componente	P-101	P-102	P-103	P-104	P-105	P-106	P-107	P-108
ETILENO	439.656	219.828	219.828	0.000	219.828	3125.210	3125.210	3125.210
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.004	0.004
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	4.032	4.032	4.032
IN4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	22.116	22.116	22.116
BUTANO	0.000	0.000	0.000	0.207	0.207	19.435	19.435	19.435
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Componente	P-109	P-110	P-111	P-112	P-113	P-114	P-115	P-116
ETILENO	219.828	219.828	3345.038	3345.038	3345.038	3345.038	3345.038	3345.038
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	0.000	0.000	4.032	4.032	4.032	4.032	4.032	4.032
IN4	0.000	0.000	22.116	22.116	22.116	22.116	22.116	22.116
BUTANO	0.000	0.000	19.435	19.435	19.435	19.435	19.435	19.435
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Componente	P-117	P-118	P-119	P-120	P-121	P-122	P-123	P-124
ETILENO	3345.038	3345.038	3345.038	3345.041	3345.041	33.450	3311.591	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.004	0.004	0.004	0.396	0.396	0.004	0.392	0.392
IN2	0.000	0.000	0.000	0.031	0.031	0.000	0.031	0.031
IN3	4.032	4.032	4.032	4.137	4.137	0.041	4.096	0.105
IN4	22.116	22.116	22.116	22.431	22.431	0.224	22.207	0.297
BUTANO	19.435	19.435	19.435	19.425	19.425	0.194	19.231	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Componente	P-125	P-126	P-127	P-128	P-129	P-130	P-131	P-132
ETILENO	2901.344	2901.344	237.277	26.504	210.773	0.000	210.773	210.773
LDPE	413.793	413.793	413.793	413.793	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	4.096	4.096	0.396	0.101	0.295	0.000	0.295	0.295
IN4	22.207	22.207	2.130	0.293	1.838	0.000	1.838	1.838
BUTANO	19.231	19.231	1.328	0.177	1.151	0.000	1.151	1.151
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Componente	P-133	P-134	P-135	P-137	P-138	P-139	P-140
ETILENO	0.000	210.773	2908.291	2908.291	0.000	2908.291	2908.291
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.004	0.004	0.000	0.004	0.004
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	0.000	0.295	4.036	4.036	0.000	4.036	4.036
IN4	0.000	1.838	22.138	22.138	0.000	22.138	22.138
BUTANO	0.000	1.151	19.248	19.248	0.000	19.248	19.248
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Componente	P-141	P-142	P-143	P-144	P-145	P-146	P-147	P-148
ETILENO	2908.291	2908.291	2.908	2905.382	2664.067	2664.067	0.000	2664.067
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.004	0.004	0.000	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	4.036	4.036	0.004	4.032	3.700	3.700	0.000	3.700
IN4	22.138	22.138	0.022	22.116	20.076	20.076	0.000	20.076
BUTANO	19.248	19.248	0.019	19.229	17.902	17.902	0.000	17.902
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Componente	P-149	P-150	P-151	P-152	P-153	P-154	P-155	P-156
ETILENO	2664.067	0.000	2664.067	2664.067	0.000	2664.067	2664.067	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	3.700	0.000	3.700	3.700	0.000	3.700	3.700	0.000
IN4	20.076	0.000	20.076	20.076	0.000	20.076	20.076	0.000
BUTANO	17.902	0.000	17.902	17.902	0.000	17.902	17.902	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Componente	P-157	P-158	P-159	P-160
ETILENO	2664.067	2697.517	0.000	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.004	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	3.700	3.741	0.000	0.000
IN4	20.076	20.301	0.000	0.000
BUTANO	17.902	18.096	0.000	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000

Tabla 9-3. Balance de materia molar (kmol/h) para el conjunto de reactores auxiliares (Reactores en Serie).

Componente	A	B	C	JENTRADA	JSALIDA
ETILENO	2901.353	2901.350	2901.344	3311.591	2901.344
LDPE	413.784	413.787	413.793	0.000	413.793
IN1	0.000	0.000	0.000	0.392	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.031	0.000
IN3	4.096	4.096	4.096	4.096	4.096
IN4	22.207	22.207	22.207	22.207	22.207
BUTANO	19.231	19.231	19.231	19.231	19.231
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Tabla 9-4. Balance molar de las corrientes de intercambio de calor para los reactores auxiliares (Reactores en Serie).

Componente	1	2	3	4	5	6	7	8
ETILENO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
BUTANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	8881.35	8881.35	8881.35	8881.35	4440.67	4440.67	4440.67	4440.67

II.II Balance de materia másico para el proceso de producción de LDPE.

Tabla 9-5. Balance de materia másico (kg/h) para el proceso global de producción de LDPE.

Componente	P-101	P-102	P-103	P-104	P-105	P-106	P-107
ETILENO	12300.000	6167.000	6167.000	0.000	6167.000	87700.000	87700.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.959	0.959
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.045	0.045
IN3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	363.351	363.351
IN4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	707.693	707.693
BUTANO	0.000	0.000	0.000	12.000	12.000	1129.630	1129.630
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	12300.000	6167.000	6167.000	12.000	6179.000	89901.677	89901.677

Componente	P-109	P-110	P-111	P-112	P-113	P-114
ETILENO	6167.000	6167.000	93800.000	93800.000	93800.000	93800.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.959	0.959	0.959	0.959
IN2	0.000	0.000	0.045	0.045	0.045	0.045
IN3	0.000	0.000	363.351	363.351	363.351	363.351
IN4	0.000	0.000	707.693	707.693	707.693	707.693
BUTANO	0.000	0.000	1129.630	1129.630	1129.630	1129.630
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	6167.000	6167.000	96001.677	96001.677	96001.677	96001.677

Componente	P-115	P-116	P-117	P-118	P-119	P-120
ETILENO	93800.000	93800.000	93800.000	93800.000	93800.000	93800.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.959	0.959	0.959	0.959	0.959	95.959
IN2	0.045	0.045	0.045	0.045	0.045	4.545
IN3	363.351	363.351	363.351	363.351	363.351	372.843
IN4	707.693	707.693	707.693	707.693	707.693	717.764
BUTANO	1129.630	1129.630	1129.630	1129.630	1129.630	1129.038
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	96001.677	96001.677	96001.677	96001.677	96001.677	96120.149

Componente	P-121	P-122	P-123	P-124	P-125
ETILENO	93800.000	938.410	92900.000	0.000	81400.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	11600.000
IN1	95.959	0.960	94.999	95.000	0.000
IN2	4.545	0.045	4.500	4.500	0.000
IN3	372.843	3.728	369.115	9.500	369.115
IN4	717.764	7.178	710.587	9.500	710.587
BUTANO	1129.038	11.290	1117.748	0.000	1117.748
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	96120.149	961.611	95196.948	118.500	95197.449

Componente	P-126	P-127	P-128	P-129	P-130
ETILENO	81400.000	6656.511	743.531	5912.979	0.000
LDPE	11600.000	11600.000	11600.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	369.115	35.693	9.129	26.565	0.000
IN4	710.587	68.170	9.363	58.807	0.000
BUTANO	1117.748	77.213	10.290	66.924	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	95197.449	18437.587	12372.312	6065.274	0.000

Componente	P-131	P-132	P-133	P-134	P-135
ETILENO	5912.979	5912.979	0.000	5912.979	81600.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.960
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.045
IN3	26.565	26.565	0.000	26.565	363.714
IN4	58.807	58.807	0.000	58.807	708.402
BUTANO	66.924	66.924	0.000	66.924	1118.749
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	6065.274	6065.274	0.000	6065.274	83791.869

Componente	P-137	P-138	P-139	P-140	P-141
ETILENO	81600.000	0.000	81600.000	81600.000	81600.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.960	0.000	0.960	0.960	0.960
IN2	0.045	0.000	0.045	0.045	0.045
IN3	363.714	0.000	363.714	363.714	363.714
IN4	708.402	0.000	708.402	708.402	708.402
BUTANO	1118.749	0.000	1118.749	1118.749	1118.749
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	83791.869	0.000	83791.869	83791.869	83791.869

Componente	P-142	P-143	P-144	P-145	P-146
ETILENO	81600.000	81.589	81500.000	74700.000	74700.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.960	0.001	0.959	0.000	0.000
IN2	0.045	0.000	0.045	0.000	0.000
IN3	363.714	0.364	363.351	333.421	333.421
IN4	708.402	0.708	707.693	642.417	642.417
BUTANO	1118.749	1.119	1117.630	1040.534	1040.534
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	83791.869	83.780	83689.677	76716.373	76716.373

Componente	P-147	P-148	P-149	P-150	P-151
ETILENO	0.000	74700.000	74700.000	0.000	74700.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	0.000	333.421	333.421	0.000	333.421
IN4	0.000	642.417	642.417	0.000	642.417
BUTANO	0.000	1040.534	1040.534	0.000	1040.534
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	0.000	76716.373	76716.373	0.000	76716.373

Componente	P-152	P-153	P-154	P-155	P-156
ETILENO	74700.000	0.000	74700.000	74700.000	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	333.421	0.000	333.421	333.421	0.000
IN4	642.417	0.000	642.417	642.417	0.000
BUTANO	1040.534	0.000	1040.534	1040.534	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	76716.373	0.000	76716.373	76716.373	0.000

Componente	P-157	P-158	P-159	P-160
ETILENO	74700.000	75700.000	0.000	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.960	0.000	0.000
IN2	0.000	4.55EE-02	0.000	0.000
IN3	333.421	337.150	0.000	0.000
IN4	642.417	649.595	0.000	0.000
BUTANO	1040.534	1051.825	0.000	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	76716.373	77739.529	0.000	0.000

Tabla 9-6. Balance de materia másico (kg/h) para el conjunto de reactores auxiliares (Reactores en Serie).

Componente	A	B	C	JENTRADA	JSALIDA
ETILENO	81400.000	81400.000	81400.000	92900.000	81400.000
LDPE	11600.000	11600.000	11600.000	0.000	11600.000
IN1	0.000	0.000	0.000	94.999	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	4.500	0.000
IN3	369.115	369.115	369.115	369.115	369.115
IN4	710.587	710.587	710.587	710.587	710.587
BUTANO	1117.748	1117.748	1117.748	1117.748	1117.748
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Flujo Total	95197.449	95197.449	95197.449	95196.948	95197.449

Tabla 9-7. Balance molar (kmol/h) de las corrientes de intercambio de calor para los reactores auxiliares (Reactores en Serie).

Componente	1	2	3	4	5	6	7	8
ETILENO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
LDPE	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
IN4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
BUTANO	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
O2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CH4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H2O	8881. 35	8881. 35	8881. 35	8881. 35	4440. 67	4440. 67	4440. 67	4440. 67

Tabla 9-8. Balance másico (kg/h) de las corrientes de intercambio de calor para los reactores auxiliares (Reactores en Serie).

Componente	1	3	2	4	5	7	6	8
ETILENO		0.00		0.00		0.00		0.00
LDPE		0.00		0.00		0.00		0.00
IN1		0.00		0.00		0.00		0.00
IN2		0.00		0.00		0.00		0.00
IN3		0.00		0.00		0.00		0.00
IN4		0.00		0.00		0.00		0.00
BUTANO		0.00		0.00		0.00		0.00
O2		0.00		0.00		0.00		0.00
CH4		0.00		0.00		0.00		0.00
H2O		160000.00		160000.00		80000.00		80000.00
Flujo Total		160000		160000		80000.00		80000.00

II.III Condiciones principales para las corrientes del proceso de producción de LDPE.

Tabla 9-9. Principales datos de las corrientes del proceso LDPE.

Variables	P-101	P-102	P-103	P-104	P-105	P-106	P-107	P-108	P-109
FLUJO kg/h	12300.00	6167.00	6167.00	12.00	6179.00	89901.68	89901.68	89901.68	6167.00
FLUJO m³/h	20.83	10.41	342.03	0.00	341.83	442.08	345.00	4933.08	10.41
TEMP K	298.15	298.15	313.15	298.15	312.68	511.70	533.68	313.15	298.15
PRESS Pa	2700000.00	2700000.00	100000.00	2700000.00	100000.00	1800000.00	2400000.00	100000.00	2700000.00
ρ gm/cc	0.04	0.04	0.00	0.58	0.00	0.01	0.02	0.00	0.04
Entalpia kJ/mol	51.58	51.58	53.10	53.10	52.92	61.82	63.18	51.21	51.58
Entropía j/mol*K	-82.60	-82.60	-51.20	-444.51	-51.49	-50.43	-50.17	-52.53	-82.60

Variables	P-110	P-111	P-112	P-113	P-114	P-115	P-116	P-117	P-118
FLUJO kg/h	6167.00	96001.68	96001.68	96001.68	96001.68	96001.68	96001.68	96001.68	96001.68
FLUJO m³/h	342.03	368.53	236.71	5275.08	175.93	130.48	5275.08	103.36	48.32
TEMP K	313.15	533.13	573.24	313.15	598.31	627.13	313.15	648.11	731.24
PRESS Pa	100000.00	2400000.00	4000000.00	100000.00	5600000.00	7900000.00	100000.00	10300000.00	25500000.00
ρ gm/cc	0.00	0.02	0.02	0.00	0.03	0.04	0.00	0.06	0.12
Entalpia kJ/mol	53.10	63.26	65.80	51.33	67.41	69.30	51.33	70.66	76.28
Entropía j/mol*K	-51.20	-50.16	-49.71	-52.44	-49.70	-49.39	-52.44	-49.39	-48.62

Variables	P-119	P-120	P-121	P-122	P-123	P-124	P-125	P-126
FLUJO kg/h	96001.68	96120.15	96120.15	961.61	95196.95	118.50	95197.45	95197.45
FLUJO m ³ /h	5275.08	12.21	12.21	0.12	12.09	0.00	8.42	14.65
TEMP K	313.15	1465573.15	2643.40	296.85	2619.70	274.94	406.18	456.40
PRESS Pa	100000.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	220000000.00	35000000.00
ρ gm/cc	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.68	0.39
Entalpia kJ/mol	51.33	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	39.99	39.99
Entropía j/mol*K	-52.44	48300096.00	46291776.00	46291776.00	45827352.00	12.26	-122.34	-103.53

Variables	P-127	P-128	P-129	P-130	P-131	P-132	P-133	P-134	P-135
FLUJO kg/h	18437.59	12372.31	6065.27	-	6065.27	6065.27	-	6065.27	83791.87
FLUJO m ³ /h	1.93	1.04	9.97	-	204.87	333.04	-	166.17	897.59
TEMP K	543.15	493.15	493.15	-	481.03	313.15	-	313.77	313.77
PRESS Pa	35000000.00	5000000.00	5000000.00	-	250000.00	100000.00	-	200000.00	
ρ gm/cc	0.57	0.71	0.04	-	0.00	0.00	-	0.00	0.01
Entalpia kJ/mol	-	-	60.12	-	60.12	51.22	-	51.22	42.02
Entropía j/mol*K	-138.27	-178.88	-61.75	-	-37.30	-52.22	-	-57.94	-100.16

Variables	P-137	P-138	P-139	P-140	P-141	P-142	P-143	P-144	P-145
FLUJO kg/h	83791.87	-	83791.87	83791.87	83791.87	83791.87	83.78	83689.68	76716.37
FLUJO m ³ /h	3057.30	-	3057.30	1454.47	985.39	4595.40	4.60	4590.72	18.29
TEMP K	313.15	-	313.15	373.72	406.12	313.15	313.15	313.15	543.15
PRESS Pa	150000.00	-	150000.00	375000.00	600000.00	100000.00	100000.00	100000.00	35000000.00
ρ gm/cc	0.00	-	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.25
Entalpia kJ/mol	51.06	-	51.06	53.92	55.59	51.08	51.08	51.08	59.50
Entropía j/mol*K	-56.02	-	-56.02	-55.25	-54.83	-52.62	-52.62	-52.62	-77.41

Variables	P-146	P-147	P-148	P-149	P-150	P-151	P-152	P-153
FLUJO kg/h	76716.37	-	76716.37	76716.37	-	76716.37	76716.37	-
FLUJO m ³ /h	6310.80	-	18.98	5295.24	-	16.47	4277.52	-
TEMP K	468.15	-	537.50	393.15	-	484.66	318.15	-
PRESS Pa	100000.00	-	32900000.00	100000.00	-	30700000.00	100000.00	-
ρ gm/cc	0.00	-	0.24	0.00	-	0.28	0.00	-
Entalpia kJ/mol	59.22	-	59.22	54.98	-	54.98	51.29	-
Entropía j/mol*K	-31.69	-	-77.49	-41.55	-	-85.33	-51.94	-

Variables	P-157	P-158	P-159	P-160
FLUJO kg/h	76716.37	77739.53	-	-
FLUJO m ³ /h	8.21	760.28	-	-
TEMP K	313.15	313.15	-	-
PRESS Pa	28500000.00	200000.00	-	-
ρ gm/cc	0.56	0.01	-	-
Entalpia kJ/mol	41.20	41.30	-	-
Entropía j/mol*K	-119.63	-104.00	-	-

Nota: Las corrientes que no contienen información es debido a que no existe flujo en esas corrientes.

II.IV Información de los equipos del proceso de producción de LDPE.

Tabla 9-10. Información básica de los intercambiadores del proceso de producción de LDPE.

Intercambiadores	I-101	I-102	I-103	I-104	I-105	I-106
Temperatura de salida (K)	312.15	313.15	313.25	313.25	313.15	313.15
Presión de salida (Pa)	101325	101325	101325	101325	101325	101325
Calor (J/s)	93190.232	-10544516.8	93190.232	-13631053.6	-16922606.4	-23495670.4
Fracción de vapor	1	1	1	1	1	1

Intercambiadores	I-107	I-108	I-109	I-110	I-111	I-112
Temperatura de salida (K)	313.15	313.15	468.15	393.15	318.15	313.15
Presión de salida (Pa)	101325	101325	101325	101325	101325	28877625
Calor (J/s)	-529234.16	-3699953.04	-211844.288	-3190843.92	-2772862.32	-7580989.6
Fracción de vapor	1	1	1	1	1	0

Tabla 9-11. Información básica de los compresores del proceso de producción de LDPE.

Compresor	C-101	C-102	C-103	C-104	C-105
Tipo	Isoentropico	Isoentropico	Isoentropico	Isoentropico	Isoentropico
Fase	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Potencia (kW)	9353.90728	1198.90514	11243.0801	2397.06066	15154.3219
Eficiencia	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9
Eficiencia Mecánica	1	1	1	1	1
Presión de salida (Pa)	1823850	2431800	2431800	4053000	5674200
Temperatura de salida(K)	511.700214	533.681343	533.130876	573.240792	598.309619
Fracción Vapor	1	1	1	1	1

Compresor	C-106	C-107	C-108	C-109	C-110
Tipo	Isoentropico	Isoentropico	Isoentropico	Isoentropico	Isoentropico
Fase	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Potencia (kW)	1779.59848	18221.5608	5289.84486	2345.44738	1368.40245
Eficiencia	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9
Eficiencia Mecánica	1	1	1	1	1
Presión de salida (Pa)	8004675	10436475	25837875	379968.75	607950
Temperatura de salida(K)	627.131603	648.109897	731.235747	373.715961	406.118762
Fracción Vapor	1	1	1	1	1

Tabla 9-12. Información básica de los tanques Flash del proceso de producción de LDPE.

	F-101	F-102	F-103	F-104	F-105	F-106	HPS	LPS
Temperatura de Salida (K)	481.03	313.768	313.15	537.5	484.66	439.91	270	220
Presión de salida (Pa)	253312.5	202650	151987.5	33335925	31106775	28877625	350	50
Fracción Vapor	1	1	1	1	1	1	0.80512	0.32684

La información sobre los reactores se encuentra generalizada en la siguiente sección.

II.V Información generada por ASPEN PLUS para la serie de reactores Simulados.

BLOCK: R-1 MODEL: RPLUG

 PROCESS SIDE:

 INLET STREAM: JENTRADA
 OUTLET STREAM: A
 PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
 STATE

COOLANT SIDE:

 INLET STREAM: 1
 OUTLET STREAM: 2
 PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
 STATE

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/SEC)	3.39972	3.40059	0.867714E-03	0.00000
MASS (KG/SEC)	70.8944	70.8944		-0.400902E-
15				
ENTHALPY (WATT)	-0.549259E+09	-0.549259E+09		0.131123E-
10				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC

*** POLYMER DISTRIBUTIONS ***
 Composite chain length distribution (GPC style)

Cut Number	Chain Length	Mass Fraction
1	1.000	0.1393E-05
2	2.000	0.5566E-05
3	3.000	0.1251E-04
4	4.000	0.2221E-04
5	5.000	0.3467E-04
6	6.000	0.4986E-04
7	7.000	0.6778E-04
8	8.000	0.8842E-04
9	9.000	0.1118E-03
10	10.00	0.1378E-03
11	11.00	0.1666E-03
12	12.00	0.1980E-03
13	13.00	0.2321E-03

14	14.00	0.2688E-03
15	15.00	0.3083E-03
16	16.00	0.3503E-03
17	17.00	0.3950E-03
18	18.00	0.4423E-03
19	21.00	0.5998E-03
20	25.00	0.8460E-03
21	29.00	0.1133E-02
22	34.00	0.1548E-02
23	40.00	0.2127E-02
24	47.00	0.2912E-02
25	56.00	0.4089E-02
26	66.00	0.5611E-02
27	77.00	0.7536E-02
28	91.00	0.1035E-01
29	107.0	0.1403E-01
30	125.0	0.1873E-01
31	147.0	0.2522E-01
32	173.0	0.3383E-01
33	204.0	0.4529E-01
34	239.0	0.5954E-01
35	281.0	0.7814E-01
36	331.0	0.1019
37	389.0	0.1310
38	457.0	0.1661
39	537.0	0.2075
40	630.0	0.2542
41	741.0	0.3059
42	870.0	0.3588
43	1023.	0.4098
44	1202.	0.4530
45	1412.	0.4829
46	1659.	0.4942
47	1949.	0.4837
48	2290.	0.4510
49	2691.	0.3994
50	3162.	0.3354
51	3715.	0.2667
52	4365.	0.2005
53	5128.	0.1425
54	6025.	0.9563E-01
55	7079.	0.6086E-01
56	8317.	0.3708E-01
57	9772.	0.2193E-01
58	0.1148E+05	0.1273E-01
59	0.1349E+05	0.7242E-02
60	0.1585E+05	0.3994E-02
61	0.1862E+05	0.2102E-02
62	0.2188E+05	0.1041E-02
63	0.2570E+05	0.4792E-03
64	0.3020E+05	0.2020E-03
65	0.3548E+05	0.7640E-04
66	0.4169E+05	0.2529E-04
67	0.4898E+05	0.7088E-05
68	0.5754E+05	0.1618E-05
69	0.6761E+05	0.2871E-06
70	0.7943E+05	0.3757E-07

71	0.9332E+05	0.3410E-08
72	0.1096E+06	0.2006E-09
73	0.1288E+06	0.7125E-11
74	0.1514E+06	0.1481E-12
75	0.1778E+06	0.2336E-14
76	0.2089E+06	0.5217E-16
77	0.2455E+06	0.1100E-17
78	0.2884E+06	0.1232E-19
79	0.3388E+06	0.5991E-22
80	0.3981E+06	0.1085E-24
81	0.4677E+06	0.6154E-28
82	0.5495E+06	0.8927E-32
83	0.6457E+06	0.2609E-36
84	0.7586E+06	0.1161E-41
85	0.8912E+06	0.5655E-48
86	0.1047E+07	0.2049E-55
87	0.1230E+07	0.3508E-64
88	0.1445E+07	0.1662E-74
89	0.1698E+07	0.1164E-86
90	0.1995E+07	0.5771-101
91	0.2344E+07	0.8512-118
92	0.2754E+07	0.1351-137
93	0.3236E+07	0.6979-161
94	0.3802E+07	0.2882-188
95	0.4467E+07	0.1827-220
96	0.5248E+07	0.2558-258
97	0.6166E+07	0.8111-303
98	0.7244E+07	0.000
99	0.8511E+07	0.000
100	0.1000E+08	0.000

Properties of local composite CLD:

Area = 1.004 Pn = 944.0 Pw = 2149. PDI = 2.277

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	WATT	-0.88449E+07
RESIDENCE TIME	SEC	16.736
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	K	358.15
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	K	580.61
COOLANT INLET TEMPERATURE	K	348.99
COOLANT INLET VAPOR FRACTION		1.0000

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.22000E+09	358.15	0.0000	0.0000
25.000	0.22000E+09	388.91	0.0000	1.7301
50.000	0.22000E+09	423.74	0.0000	3.4265
75.000	0.22000E+09	570.49	0.0000	5.0343
100.00	0.22000E+09	541.87	0.0000	6.6171
125.00	0.22000E+09	514.33	0.0000	8.2324
150.00	0.22000E+09	488.08	0.0000	9.8787
175.00	0.22000E+09	463.31	0.0000	11.554

200.00	0.22000E+09	440.24	0.0000	13.257
225.00	0.22000E+09	419.05	0.0000	14.986
250.00	0.22000E+09	399.89	0.0000	16.736

LENGTH METER	DUTY WATT	LIQUID HOLDUP
0.0000	0.0000	1.0000
25.000	0.15077E+07	1.0000
50.000	0.27028E+07	1.0000
75.000	0.19425E+07	1.0000
100.00	-51817.	1.0000
125.00	-0.19066E+07	1.0000
150.00	-0.36126E+07	1.0000
175.00	-0.51624E+07	1.0000
200.00	-0.65514E+07	1.0000
225.00	-0.77784E+07	1.0000
250.00	-0.88449E+07	1.0000

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI1	INI2
0.0000	0.98611	0.0000	0.11680E-03	0.91651E-05
25.000	0.98521	0.89949E-03	0.11663E-03	0.91651E-05
50.000	0.97704	0.90767E-02	0.11292E-03	0.91630E-05
75.000	0.86313	0.12312	0.0000	0.0000
100.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.0000
125.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.0000
150.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.0000
175.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.0000
200.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.0000
225.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.23997E-14
250.00	0.86313	0.12312	0.0000	0.44676E-14

LENGTH METER	IN3	IN4	BUTANO
0.0000	0.12509E-02	0.66834E-02	0.58280E-02
25.000	0.12509E-02	0.66834E-02	0.58280E-02
50.000	0.12509E-02	0.66832E-02	0.58279E-02
75.000	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
100.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
125.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
150.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
175.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
200.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
225.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02
250.00	0.12497E-02	0.66772E-02	0.58226E-02

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI1	INI2
-----------------	----	------	------	------

0.0000	0.97549	0.0000	0.99768E-03	0.47259E-04
25.000	0.97461	0.88981E-03	0.99621E-03	0.47258E-04
50.000	0.96655	0.89793E-02	0.96456E-03	0.47249E-04
75.000	0.85463	0.12191	0.0000	0.0000
100.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.0000
125.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.0000
150.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.0000
175.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.0000
200.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.0000
225.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.12385E-13
250.00	0.85463	0.12191	0.0000	0.23058E-13

LENGTH METER	IN3	IN4	BUTANO
-----------------	-----	-----	--------

0.0000	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
25.000	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
50.000	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
75.000	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
100.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
125.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
150.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
175.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
200.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
225.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01
250.00	0.39752E-02	0.75411E-02	0.11945E-01

*** COMPONENT ATTRIBUTE PROFILE (PROCESS SUBSTREAM) ***

LENGTH METER	LDPE SFRAC E2-SEG	LDPE SFLOW E2-SEG	LDPE DPN DPN	LDPE DPW DPW
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
25.000	1.0000	0.83755E-03	3832.7	7817.7
50.000	1.0000	0.84347E-02	2159.3	4858.9
75.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
100.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
125.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
150.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
175.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
200.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
225.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
250.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2

LENGTH METER	LDPE PDI PDI	LDPE MWN MWN	LDPE MWW MWW	LDPE ZMOM ZMOM
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
25.000	2.0398	0.10752E+06	0.21931E+06	0.21853E-06
50.000	2.2502	60576.	0.13631E+06	0.39062E-05
75.000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
100.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
125.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
150.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03

175.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
200.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
225.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
250.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03

LENGTH METER	LDPE FMOM FMOM	LDPE SMOM SMOM	LDPE LDPN LDPN	LDPE LZMOM LZMOM
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
25.000	0.83755E-03	6.5477	2764.0	0.29013E-08
50.000	0.84347E-02	40.983	1516.4	0.14424E-07
75.000	0.11396	347.25	0.0000	0.0000
100.00	0.11396	347.25	0.0000	0.0000
125.00	0.11396	347.25	0.0000	0.0000
150.00	0.11396	347.25	0.0000	0.0000
175.00	0.11396	347.25	0.0000	0.0000
200.00	0.11396	347.25	3463.6	0.22337E-14
225.00	0.11396	347.25	0.0000	0.0000
250.00	0.11396	347.25	3890.4	0.0000

LENGTH METER	LDPE LFMOM LFMOM	LDPE LSFLOW E2-SEG	LDPE LSFRAC E2-SEG	LDPE LEFLOW E2-SEG
0.0000	0.0000	0.28670E-05	0.0000	0.53443E-09
25.000	0.80190E-05	0.80190E-05	1.0000	0.29013E-08
50.000	0.21873E-04	0.21873E-04	1.0000	0.14424E-07
75.000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
100.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
125.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
150.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
175.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
200.00	0.77367E-11	0.77367E-11	1.0000	0.22337E-14
225.00	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
250.00	0.60299E-12	0.60299E-12	1.0000	0.0000

LENGTH METER	LDPE LEFRAC E2-SEG	LDPE LPFRAC LPFRAC
0.0000	0.0000	0.0000
25.000	1.0000	0.13276E-01
50.000	1.0000	0.36927E-02
75.000	0.0000	0.0000
100.00	0.0000	0.0000
125.00	0.0000	0.0000
150.00	0.0000	0.0000
175.00	0.0000	0.0000
200.00	1.0000	0.17252E-10
225.00	0.0000	0.0000
250.00	1.0000	0.11971E-11

*** RESULTS PROFILE (COOLANT STREAM) ***

LENGTH	PRESSURE	TEMPERATURE	VAPOR FRAC	RES-TIME
--------	----------	-------------	------------	----------

METER	N/SQM	K		SEC
0.0000	0.10000E+08	443.15	1.0000	0.0000
25.000	0.10000E+08	459.54	1.0000	1.7301
50.000	0.10000E+08	472.55	1.0000	3.4265
75.000	0.10000E+08	464.27	1.0000	5.0343
100.00	0.10000E+08	442.59	1.0000	6.6171
125.00	0.10000E+08	422.50	1.0000	8.2324
150.00	0.10000E+08	404.12	1.0000	9.8787
175.00	0.10000E+08	387.56	1.0000	11.554
200.00	0.10000E+08	372.85	1.0000	13.257
225.00	0.10000E+08	360.01	1.0000	14.986
250.00	0.10000E+08	348.99	1.0000	16.736

BLOCK: 1R-1 MODEL: RPLUG

PROCESS SIDE:

INLET STREAM: A
OUTLET STREAM: B
PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
STATE

COOLANT SIDE:

INLET STREAM: 3
OUTLET STREAM: 4
PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
STATE

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/SEC)	3.40059	3.40059	0.552102E-14	0.00000
MASS (KG/SEC)	70.8944	70.8944		0.00000
ENTHALPY (WATT)	-0.544439E+09	-0.544439E+09		0.387164E-10

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC

*** POLYMER DISTRIBUTIONS ***

Composite chain length distribution (GPC style)

Cut Number	Chain Length	Mass Fraction
1	1.000	0.1714E-06
2	2.000	0.6854E-06
3	3.000	0.1542E-05
4	4.000	0.2739E-05
5	5.000	0.4279E-05
6	6.000	0.6159E-05

7	7.000	0.8379E-05
8	8.000	0.1094E-04
9	9.000	0.1384E-04
10	10.00	0.1708E-04
11	11.00	0.2066E-04
12	12.00	0.2457E-04
13	13.00	0.2883E-04
14	14.00	0.3342E-04
15	15.00	0.3835E-04
16	16.00	0.4361E-04
17	17.00	0.4921E-04
18	18.00	0.5515E-04
19	21.00	0.7497E-04
20	25.00	0.1061E-03
21	29.00	0.1425E-03
22	34.00	0.1954E-03
23	40.00	0.2698E-03
24	47.00	0.3715E-03
25	56.00	0.5253E-03
26	66.00	0.7267E-03
27	77.00	0.9845E-03
28	91.00	0.1367E-02
29	107.0	0.1877E-02
30	125.0	0.2543E-02
31	147.0	0.3484E-02
32	173.0	0.4774E-02
33	204.0	0.6552E-02
34	239.0	0.8863E-02
35	281.0	0.1204E-01
36	331.0	0.1636E-01
37	389.0	0.2205E-01
38	457.0	0.2958E-01
39	537.0	0.3949E-01
40	630.0	0.5228E-01
41	741.0	0.6904E-01
42	870.0	0.9017E-01
43	1023.	0.1170
44	1202.	0.1498
45	1412.	0.1894
46	1659.	0.2358
47	1949.	0.2884
48	2290.	0.3454
49	2691.	0.4036
50	3162.	0.4582
51	3715.	0.5028
52	4365.	0.5304
53	5128.	0.5341
54	6025.	0.5097
55	7079.	0.4566
56	8317.	0.3802
57	9772.	0.2909
58	0.1148E+05	0.2018
59	0.1349E+05	0.1251
60	0.1585E+05	0.6825E-01
61	0.1862E+05	0.3227E-01
62	0.2188E+05	0.1303E-01
63	0.2570E+05	0.4453E-02

64	0.3020E+05	0.1283E-02
65	0.3548E+05	0.3142E-03
66	0.4169E+05	0.6627E-04
67	0.4898E+05	0.1207E-04
68	0.5754E+05	0.1853E-05
69	0.6761E+05	0.2261E-06
70	0.7943E+05	0.2037E-07
71	0.9332E+05	0.1252E-08
72	0.1096E+06	0.4846E-10
73	0.1288E+06	0.1081E-11
74	0.1514E+06	0.1254E-13
75	0.1778E+06	0.6724E-16
76	0.2089E+06	0.1448E-18
77	0.2455E+06	0.1064E-21
78	0.2884E+06	0.2209E-25
79	0.3388E+06	0.1036E-29
80	0.3981E+06	0.8449E-35
81	0.4677E+06	0.8757E-41
82	0.5495E+06	0.7980E-48
83	0.6457E+06	0.4146E-56
84	0.7586E+06	0.7423E-66
85	0.8912E+06	0.2548E-77
86	0.1047E+07	0.8456E-91
87	0.1230E+07	0.1220-106
88	0.1445E+07	0.2983-125
89	0.1698E+07	0.4074-147
90	0.1995E+07	0.8349-173
91	0.2344E+07	0.5438-203
92	0.2754E+07	0.1812-238
93	0.3236E+07	0.3621-280
94	0.3802E+07	0.000
95	0.4467E+07	0.000
96	0.5248E+07	0.000
97	0.6166E+07	0.000
98	0.7244E+07	0.000
99	0.8511E+07	0.000
100	0.1000E+08	0.000

Properties of local composite CLD:

Area = 1.004 Pn = 2628. Pw = 5393. PDI = 2.052

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	WATT	0.48193E+07
RESIDENCE TIME	SEC	17.053
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	K	399.89
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	K	481.57
COOLANT INLET TEMPERATURE	K	495.62
COOLANT INLET VAPOR FRACTION		1.0000

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.22000E+09	399.89	0.0000	0.0000

25.000	0.22000E+09	414.02	0.0000	1.7527
50.000	0.22000E+09	426.05	0.0000	3.4911
75.000	0.22000E+09	436.40	0.0000	5.2168
100.00	0.22000E+09	445.43	0.0000	6.9317
125.00	0.22000E+09	453.31	0.0000	8.6368
150.00	0.22000E+09	460.31	0.0000	10.334
175.00	0.22000E+09	466.51	0.0000	12.023
200.00	0.22000E+09	472.07	0.0000	13.705
225.00	0.22000E+09	477.07	0.0000	15.382
250.00	0.22000E+09	481.57	0.0000	17.053

LENGTH METER	DUTY WATT	LIQUID HOLDUP
0.0000	0.0000	1.0000
25.000	0.78297E+06	1.0000
50.000	0.14668E+07	1.0000
75.000	0.20676E+07	1.0000
100.00	0.26010E+07	1.0000
125.00	0.30737E+07	1.0000
150.00	0.34987E+07	1.0000
175.00	0.38794E+07	1.0000
200.00	0.42240E+07	1.0000
225.00	0.45359E+07	1.0000
250.00	0.48193E+07	1.0000

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI2	IN3
0.0000	0.86313	0.12312	0.44676E-14	0.12497E-02
25.000	0.86313	0.12312	0.44668E-14	0.12497E-02
50.000	0.86313	0.12312	0.44636E-14	0.12497E-02
75.000	0.86313	0.12312	0.44525E-14	0.12497E-02
100.00	0.86313	0.12312	0.44279E-14	0.12497E-02
125.00	0.86313	0.12312	0.43712E-14	0.12497E-02
150.00	0.86313	0.12312	0.42730E-14	0.12497E-02
175.00	0.86313	0.12312	0.41083E-14	0.12497E-02
200.00	0.86313	0.12312	0.38601E-14	0.12497E-02
225.00	0.86313	0.12312	0.35217E-14	0.12497E-02
250.00	0.86313	0.12312	0.30826E-14	0.12497E-02

LENGTH METER	IN4	BUTANO
0.0000	0.66772E-02	0.58226E-02
25.000	0.66772E-02	0.58226E-02
50.000	0.66772E-02	0.58226E-02
75.000	0.66772E-02	0.58226E-02
100.00	0.66772E-02	0.58226E-02
125.00	0.66772E-02	0.58226E-02
150.00	0.66772E-02	0.58226E-02
175.00	0.66772E-02	0.58226E-02
200.00	0.66772E-02	0.58226E-02
225.00	0.66772E-02	0.58226E-02
250.00	0.66772E-02	0.58226E-02

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI2	IN3
0.0000	0.85463	0.12191	0.23058E-13	0.39752E-02
25.000	0.85463	0.12191	0.23054E-13	0.39752E-02
50.000	0.85463	0.12191	0.23037E-13	0.39752E-02
75.000	0.85463	0.12191	0.22980E-13	0.39752E-02
100.00	0.85463	0.12191	0.22853E-13	0.39752E-02
125.00	0.85463	0.12191	0.22561E-13	0.39752E-02
150.00	0.85463	0.12191	0.22054E-13	0.39752E-02
175.00	0.85463	0.12191	0.21204E-13	0.39752E-02
200.00	0.85463	0.12191	0.19923E-13	0.39752E-02
225.00	0.85463	0.12191	0.18176E-13	0.39752E-02
250.00	0.85463	0.12191	0.15910E-13	0.39752E-02

LENGTH METER	IN4	BUTANO
0.0000	0.75411E-02	0.11945E-01
25.000	0.75411E-02	0.11945E-01
50.000	0.75411E-02	0.11945E-01
75.000	0.75411E-02	0.11945E-01
100.00	0.75411E-02	0.11945E-01
125.00	0.75411E-02	0.11945E-01
150.00	0.75411E-02	0.11945E-01
175.00	0.75411E-02	0.11945E-01
200.00	0.75411E-02	0.11945E-01
225.00	0.75411E-02	0.11945E-01
250.00	0.75411E-02	0.11945E-01

*** COMPONENT ATTRIBUTE PROFILE (PROCESS SUBSTREAM) ***

LENGTH METER	LDPE SFRAC E2-SEG	LDPE SFLOW E2-SEG	LDPE DPN DPN	LDPE DPW DPW
0.0000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
25.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
50.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
75.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
100.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
125.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
150.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
175.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
200.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
225.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
250.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2

LENGTH METER	LDPE PDI PDI	LDPE MWN MWN	LDPE MWW MWW	LDPE ZMOM ZMOM
-----------------	--------------------	--------------------	--------------------	----------------------

0.0000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
25.000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
50.000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
75.000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
100.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
125.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
150.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
175.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
200.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
225.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
250.00	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03

LENGTH	LDPE	LDPE	LDPE	LDPE
METER	FMOM	SMOM	LDPN	LZMOM
	FMOM	SMOM	LDPN	LZMOM

0.0000	0.11396	347.25	3495.8	0.19585E-14
25.000	0.11396	347.25	3264.5	0.73010E-14
50.000	0.11396	347.25	3071.0	0.19532E-13
75.000	0.11396	347.25	3251.6	0.78167E-14
100.00	0.11396	347.25	2927.0	0.38117E-13
125.00	0.11396	347.25	3070.7	0.19562E-13
150.00	0.11396	347.25	2997.9	0.27653E-13
175.00	0.11396	347.25	2816.9	0.59536E-13
200.00	0.11396	347.25	2877.6	0.47123E-13
225.00	0.11396	347.25	2730.8	0.76759E-13
250.00	0.11396	347.25	2783.3	0.66984E-13

LENGTH	LDPE	LDPE	LDPE	LDPE
METER	LFMOM	LSFLOW	LSFRAC	LEFLOW
	LFMOM	E2-SEG	E2-SEG	E2-SEG

0.0000	0.68466E-11	0.68466E-11	1.0000	0.19585E-14
25.000	0.23834E-10	0.23834E-10	1.0000	0.73010E-14
50.000	0.59982E-10	0.59982E-10	1.0000	0.19532E-13
75.000	0.25417E-10	0.25417E-10	1.0000	0.78167E-14
100.00	0.11157E-09	0.11157E-09	1.0000	0.38117E-13
125.00	0.60070E-10	0.60070E-10	1.0000	0.19562E-13
150.00	0.82900E-10	0.82900E-10	1.0000	0.27653E-13
175.00	0.16771E-09	0.16771E-09	1.0000	0.59536E-13
200.00	0.13560E-09	0.13560E-09	1.0000	0.47123E-13
225.00	0.20962E-09	0.20962E-09	1.0000	0.76759E-13
250.00	0.18644E-09	0.18644E-09	1.0000	0.66984E-13

LENGTH	LDPE	LDPE
METER	LEFRAC	LPFRAC
	E2-SEG	LPFRAC

0.0000	1.0000	0.15126E-10
25.000	1.0000	0.56388E-10
50.000	1.0000	0.15085E-09
75.000	1.0000	0.60370E-10
100.00	1.0000	0.29439E-09
125.00	1.0000	0.15109E-09
150.00	1.0000	0.21357E-09
175.00	1.0000	0.45981E-09
200.00	1.0000	0.36394E-09

225.00	1.0000	0.59283E-09
250.00	1.0000	0.51733E-09

*** RESULTS PROFILE (COOLANT STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.10000E+08	443.15	1.0000	0.0000
25.000	0.10000E+08	451.66	1.0000	1.7527
50.000	0.10000E+08	459.10	1.0000	3.4911
75.000	0.10000E+08	465.63	1.0000	5.2168
100.00	0.10000E+08	471.44	1.0000	6.9317
125.00	0.10000E+08	476.59	1.0000	8.6368
150.00	0.10000E+08	481.22	1.0000	10.334
175.00	0.10000E+08	485.37	1.0000	12.023
200.00	0.10000E+08	489.13	1.0000	13.705
225.00	0.10000E+08	492.53	1.0000	15.382
250.00	0.10000E+08	495.62	1.0000	17.053

BLOCK: 2R-1 MODEL: RPLUG

PROCESS SIDE:

INLET STREAM: B
OUTLET STREAM: C
PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
STATE

COOLANT SIDE:

INLET STREAM: 5
OUTLET STREAM: 6
PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
STATE

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/SEC)	3.40059	3.40059	0.547735E-15	-0.130592E-15
MASS (KG/SEC)	70.8944	70.8944		0.00000
ENTHALPY (WATT)	-0.548912E+09	-0.548912E+09		0.193728E-10

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC

*** POLYMER DISTRIBUTIONS ***

Composite chain length distribution (GPC style)

Cut Number	Chain Length	Mass Fraction

1	1.000	0.1398E-06
2	2.000	0.5588E-06
3	3.000	0.1257E-05
4	4.000	0.2234E-05
5	5.000	0.3489E-05
6	6.000	0.5022E-05
7	7.000	0.6832E-05
8	8.000	0.8920E-05
9	9.000	0.1129E-04
10	10.00	0.1393E-04
11	11.00	0.1685E-04
12	12.00	0.2004E-04
13	13.00	0.2351E-04
14	14.00	0.2726E-04
15	15.00	0.3128E-04
16	16.00	0.3557E-04
17	17.00	0.4014E-04
18	18.00	0.4499E-04
19	21.00	0.6116E-04
20	25.00	0.8655E-04
21	29.00	0.1163E-03
22	34.00	0.1595E-03
23	40.00	0.2203E-03
24	47.00	0.3033E-03
25	56.00	0.4291E-03
26	66.00	0.5937E-03
27	77.00	0.8047E-03
28	91.00	0.1118E-02
29	107.0	0.1536E-02
30	125.0	0.2082E-02
31	147.0	0.2855E-02
32	173.0	0.3915E-02
33	204.0	0.5379E-02
34	239.0	0.7285E-02
35	281.0	0.9909E-02
36	331.0	0.1349E-01
37	389.0	0.1822E-01
38	457.0	0.2450E-01
39	537.0	0.3280E-01
40	630.0	0.4356E-01
41	741.0	0.5775E-01
42	870.0	0.7577E-01
43	1023.	0.9880E-01
44	1202.	0.1274
45	1412.	0.1622
46	1659.	0.2038
47	1949.	0.2518
48	2290.	0.3054
49	2691.	0.3622
50	3162.	0.4185
51	3715.	0.4689
52	4365.	0.5072
53	5128.	0.5263
54	6025.	0.5208
55	7079.	0.4877
56	8317.	0.4286
57	9772.	0.3505

58	0.1148E+05	0.2642
59	0.1349E+05	0.1819
60	0.1585E+05	0.1136
61	0.1862E+05	0.6388E-01
62	0.2188E+05	0.3233E-01
63	0.2570E+05	0.1474E-01
64	0.3020E+05	0.6065E-02
65	0.3548E+05	0.2242E-02
66	0.4169E+05	0.7304E-03
67	0.4898E+05	0.2028E-03
68	0.5754E+05	0.4593E-04
69	0.6761E+05	0.8062E-05
70	0.7943E+05	0.1039E-05
71	0.9332E+05	0.9232E-07
72	0.1096E+06	0.5282E-08
73	0.1288E+06	0.1791E-09
74	0.1514E+06	0.3261E-11
75	0.1778E+06	0.2839E-13
76	0.2089E+06	0.1031E-15
77	0.2455E+06	0.1333E-18
78	0.2884E+06	0.5101E-22
79	0.3388E+06	0.4665E-26
80	0.3981E+06	0.7932E-31
81	0.4677E+06	0.1868E-36
82	0.5495E+06	0.4309E-43
83	0.6457E+06	0.6489E-51
84	0.7586E+06	0.3957E-60
85	0.8912E+06	0.5579E-71
86	0.1047E+07	0.9405E-84
87	0.1230E+07	0.8744E-99
88	0.1445E+07	0.1805-116
89	0.1698E+07	0.2843-137
90	0.1995E+07	0.9733-162
91	0.2344E+07	0.1657-190
92	0.2754E+07	0.2478-224
93	0.3236E+07	0.4252-264
94	0.3802E+07	0.7651-311
95	0.4467E+07	0.000
96	0.5248E+07	0.000
97	0.6166E+07	0.000
98	0.7244E+07	0.000
99	0.8511E+07	0.000
100	0.1000E+08	0.000

Properties of local composite CLD:

Area = 1.004 Pn = 2930. Pw = 6130. PDI = 2.092

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	WATT	-0.44721E+07
RESIDENCE TIME	SEC	17.193
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	K	406.21
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	K	481.57
COOLANT INLET TEMPERATURE	K	394.92
COOLANT INLET VAPOR FRACTION		1.0000

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.22000E+09	481.57	0.0000	0.0000
25.000	0.22000E+09	470.23	0.0000	1.6754
50.000	0.22000E+09	459.81	0.0000	3.3633
75.000	0.22000E+09	450.31	0.0000	5.0625
100.00	0.22000E+09	441.69	0.0000	6.7721
125.00	0.22000E+09	433.92	0.0000	8.4909
150.00	0.22000E+09	426.96	0.0000	10.218
175.00	0.22000E+09	420.76	0.0000	11.953
200.00	0.22000E+09	415.27	0.0000	13.694
225.00	0.22000E+09	410.43	0.0000	15.441
250.00	0.22000E+09	406.21	0.0000	17.193

LENGTH METER	DUTY WATT	LIQUID HOLDUP
0.0000	0.0000	1.0000
25.000	-0.70992E+06	1.0000
50.000	-0.13509E+07	1.0000
75.000	-0.19263E+07	1.0000
100.00	-0.24404E+07	1.0000
125.00	-0.28968E+07	1.0000
150.00	-0.33005E+07	1.0000
175.00	-0.36557E+07	1.0000
200.00	-0.39666E+07	1.0000
225.00	-0.42375E+07	1.0000
250.00	-0.44721E+07	1.0000

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI2	IN3
0.0000	0.86313	0.12312	0.30826E-14	0.12497E-02
25.000	0.86313	0.12312	0.27641E-14	0.12497E-02
50.000	0.86313	0.12312	0.26661E-14	0.12497E-02
75.000	0.86313	0.12312	0.26502E-14	0.12497E-02
100.00	0.86313	0.12312	0.26934E-14	0.12497E-02
125.00	0.86313	0.12312	0.27225E-14	0.12497E-02
150.00	0.86313	0.12312	0.27832E-14	0.12497E-02
175.00	0.86313	0.12312	0.28513E-14	0.12497E-02
200.00	0.86313	0.12312	0.29056E-14	0.12497E-02
225.00	0.86313	0.12312	0.29317E-14	0.12497E-02
250.00	0.86313	0.12312	0.29706E-14	0.12497E-02

LENGTH METER	IN4	BUTANO
0.0000	0.66772E-02	0.58226E-02
25.000	0.66772E-02	0.58226E-02
50.000	0.66772E-02	0.58226E-02
75.000	0.66772E-02	0.58226E-02
100.00	0.66772E-02	0.58226E-02

125.00	0.66772E-02	0.58226E-02
150.00	0.66772E-02	0.58226E-02
175.00	0.66772E-02	0.58226E-02
200.00	0.66772E-02	0.58226E-02
225.00	0.66772E-02	0.58226E-02
250.00	0.66772E-02	0.58226E-02

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI2	IN3
0.0000	0.85463	0.12191	0.15910E-13	0.39752E-02
25.000	0.85463	0.12191	0.14266E-13	0.39752E-02
50.000	0.85463	0.12191	0.13760E-13	0.39752E-02
75.000	0.85463	0.12191	0.13678E-13	0.39752E-02
100.00	0.85463	0.12191	0.13901E-13	0.39752E-02
125.00	0.85463	0.12191	0.14051E-13	0.39752E-02
150.00	0.85463	0.12191	0.14365E-13	0.39752E-02
175.00	0.85463	0.12191	0.14716E-13	0.39752E-02
200.00	0.85463	0.12191	0.14996E-13	0.39752E-02
225.00	0.85463	0.12191	0.15131E-13	0.39752E-02
250.00	0.85463	0.12191	0.15332E-13	0.39752E-02

LENGTH METER	IN4	BUTANO
0.0000	0.75411E-02	0.11945E-01
25.000	0.75411E-02	0.11945E-01
50.000	0.75411E-02	0.11945E-01
75.000	0.75411E-02	0.11945E-01
100.00	0.75411E-02	0.11945E-01
125.00	0.75411E-02	0.11945E-01
150.00	0.75411E-02	0.11945E-01
175.00	0.75411E-02	0.11945E-01
200.00	0.75411E-02	0.11945E-01
225.00	0.75411E-02	0.11945E-01
250.00	0.75411E-02	0.11945E-01

*** COMPONENT ATTRIBUTE PROFILE (PROCESS SUBSTREAM) ***

LENGTH METER	LDPE SFRAC E2-SEG	LDPE SFLOW E2-SEG	LDPE DPN DPN	LDPE DPW DPW
0.0000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
25.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
50.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
75.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
100.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
125.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
150.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
175.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
200.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
225.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2

LENGTH METER	LDPE PDI	LDPE MWN	LDPE MWW	LDPE ZMOM
250.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
LENGTH METER	LDPE PDI	LDPE MWN	LDPE MWW	LDPE ZMOM
0.0000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
25.000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
50.000	3.4623	24691.	85486.	0.12948E-03
75.000	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
100.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
125.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
150.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
175.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
200.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
225.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
250.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
LENGTH METER	LDPE FMOM	LDPE SMOM	LDPE LDPN	LDPE LZMOM
0.0000	0.11396	347.25	2743.7	0.74821E-13
25.000	0.11396	347.25	2880.4	0.38277E-13
50.000	0.11396	347.26	3000.4	0.20688E-13
75.000	0.11396	347.26	3184.7	0.86577E-14
100.00	0.11396	347.26	3025.5	0.18857E-13
125.00	0.11396	347.26	3105.4	0.12852E-13
150.00	0.11396	347.26	3405.3	0.27138E-14
175.00	0.11396	347.26	3243.2	0.64560E-14
200.00	0.11396	347.26	3301.3	0.47859E-14
225.00	0.11396	347.26	3352.7	0.36391E-14
250.00	0.11396	347.26	3532.4	0.12908E-14
LENGTH METER	LDPE LFMOM	LDPE LSFLOW	LDPE LSFRAC	LDPE LEFLOW
	LFMOM	E2-SEG	E2-SEG	E2-SEG
0.0000	0.20529E-09	0.20529E-09	1.0000	0.74821E-13
25.000	0.11025E-09	0.11025E-09	1.0000	0.38277E-13
50.000	0.62071E-10	0.62071E-10	1.0000	0.20688E-13
75.000	0.27572E-10	0.27572E-10	1.0000	0.86577E-14
100.00	0.57051E-10	0.57051E-10	1.0000	0.18857E-13
125.00	0.39913E-10	0.39913E-10	1.0000	0.12852E-13
150.00	0.92411E-11	0.92411E-11	1.0000	0.27138E-14
175.00	0.20938E-10	0.20938E-10	1.0000	0.64560E-14
200.00	0.15800E-10	0.15800E-10	1.0000	0.47859E-14
225.00	0.12201E-10	0.12201E-10	1.0000	0.36391E-14
250.00	0.45598E-11	0.45598E-11	1.0000	0.12908E-14
LENGTH METER	LDPE LEFRAC	LDPE LPFRAC		
	E2-SEG	LPFRAC		
0.0000	1.0000	0.57787E-09		
25.000	1.0000	0.29562E-09		
50.000	1.0000	0.15978E-09		

75.000	1.0000	0.66866E-10
100.00	1.0000	0.14563E-09
125.00	1.0000	0.99263E-10
150.00	1.0000	0.20959E-10
175.00	1.0000	0.49861E-10
200.00	1.0000	0.36963E-10
225.00	1.0000	0.28106E-10
250.00	1.0000	0.99694E-11

*** RESULTS PROFILE (COOLANT STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.10000E+08	443.15	1.0000	0.0000
25.000	0.10000E+08	435.45	1.0000	1.6754
50.000	0.10000E+08	428.51	1.0000	3.3633
75.000	0.10000E+08	422.28	1.0000	5.0625
100.00	0.10000E+08	416.73	1.0000	6.7721
125.00	0.10000E+08	411.82	1.0000	8.4909
150.00	0.10000E+08	407.47	1.0000	10.218
175.00	0.10000E+08	403.66	1.0000	11.953
200.00	0.10000E+08	400.33	1.0000	13.694
225.00	0.10000E+08	397.42	1.0000	15.441
250.00	0.10000E+08	394.92	1.0000	17.193

BLOCK: 3R-1 MODEL: RPLUG

PROCESS SIDE:

INLET STREAM: C
OUTLET STREAM: JSALIDA
PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
STATE

COOLANT SIDE:

INLET STREAM: 7
OUTLET STREAM: 8
PROPERTY OPTION SET: POLYSL S-L EOS FOR POLYMERS EQUATION OF
STATE

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/SEC)	3.40059	3.40059	0.278994E-14	0.00000
MASS (KG/SEC)	70.8944	70.8944		0.00000
ENTHALPY (WATT)	-0.544782E+09	-0.544782E+09		0.172275E-10

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC

*** POLYMER DISTRIBUTIONS ***
 Composite chain length distribution (GPC style)

Cut Number	Chain Length	Mass Fraction
1	1.000	0.1683E-06
2	2.000	0.6730E-06
3	3.000	0.1514E-05
4	4.000	0.2690E-05
5	5.000	0.4201E-05
6	6.000	0.6047E-05
7	7.000	0.8228E-05
8	8.000	0.1074E-04
9	9.000	0.1359E-04
10	10.00	0.1677E-04
11	11.00	0.2028E-04
12	12.00	0.2413E-04
13	13.00	0.2831E-04
14	14.00	0.3281E-04
15	15.00	0.3765E-04
16	16.00	0.4282E-04
17	17.00	0.4833E-04
18	18.00	0.5416E-04
19	21.00	0.7362E-04
20	25.00	0.1042E-03
21	29.00	0.1399E-03
22	34.00	0.1919E-03
23	40.00	0.2650E-03
24	47.00	0.3648E-03
25	56.00	0.5160E-03
26	66.00	0.7137E-03
27	77.00	0.9670E-03
28	91.00	0.1343E-02
29	107.0	0.1844E-02
30	125.0	0.2498E-02
31	147.0	0.3424E-02
32	173.0	0.4691E-02
33	204.0	0.6439E-02
34	239.0	0.8711E-02
35	281.0	0.1183E-01
36	331.0	0.1608E-01
37	389.0	0.2168E-01
38	457.0	0.2910E-01
39	537.0	0.3886E-01
40	630.0	0.5147E-01
41	741.0	0.6800E-01
42	870.0	0.8887E-01
43	1023.	0.1153
44	1202.	0.1478
45	1412.	0.1870
46	1659.	0.2332
47	1949.	0.2855
48	2290.	0.3424
49	2691.	0.4007
50	3162.	0.4557
51	3715.	0.5012

52	4365.	0.5299
53	5128.	0.5352
54	6025.	0.5122
55	7079.	0.4605
56	8317.	0.3850
57	9772.	0.2957
58	0.1148E+05	0.2060
59	0.1349E+05	0.1282
60	0.1585E+05	0.7019E-01
61	0.1862E+05	0.3324E-01
62	0.2188E+05	0.1340E-01
63	0.2570E+05	0.4539E-02
64	0.3020E+05	0.1283E-02
65	0.3548E+05	0.3032E-03
66	0.4169E+05	0.6035E-04
67	0.4898E+05	0.1011E-04
68	0.5754E+05	0.1391E-05
69	0.6761E+05	0.1482E-06
70	0.7943E+05	0.1134E-07
71	0.9332E+05	0.5730E-09
72	0.1096E+06	0.1756E-10
73	0.1288E+06	0.2967E-12
74	0.1514E+06	0.2478E-14
75	0.1778E+06	0.9012E-17
76	0.2089E+06	0.1228E-19
77	0.2455E+06	0.5261E-23
78	0.2884E+06	0.5784E-27
79	0.3388E+06	0.1286E-31
80	0.3981E+06	0.4356E-37
81	0.4677E+06	0.1612E-43
82	0.5495E+06	0.4383E-51
83	0.6457E+06	0.5507E-60
84	0.7586E+06	0.1859E-70
85	0.8912E+06	0.8963E-83
86	0.1047E+07	0.2953E-97
87	0.1230E+07	0.2808-114
88	0.1445E+07	0.2803-134
89	0.1698E+07	0.8918-158
90	0.1995E+07	0.2211-185
91	0.2344E+07	0.8091-218
92	0.2754E+07	0.6156-256
93	0.3236E+07	0.9743-301
94	0.3802E+07	0.000
95	0.4467E+07	0.000
96	0.5248E+07	0.000
97	0.6166E+07	0.000
98	0.7244E+07	0.000
99	0.8511E+07	0.000
100	0.1000E+08	0.000

Properties of local composite CLD:

Area = 1.004 Pn = 2651. Pw = 5434. PDI = 2.050

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	WATT	0.41294E+07
RESIDENCE TIME	SEC	17.063
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	K	406.21
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	K	476.12
COOLANT INLET TEMPERATURE	K	488.10
COOLANT INLET VAPOR FRACTION		1.0000

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.22000E+09	406.21	0.0000	0.0000
25.000	0.22000E+09	418.18	0.0000	1.7470
50.000	0.22000E+09	428.43	0.0000	3.4818
75.000	0.22000E+09	437.30	0.0000	5.2058
100.00	0.22000E+09	445.04	0.0000	6.9203
125.00	0.22000E+09	451.85	0.0000	8.6266
150.00	0.22000E+09	457.85	0.0000	10.325
175.00	0.22000E+09	463.21	0.0000	12.018
200.00	0.22000E+09	467.97	0.0000	13.705
225.00	0.22000E+09	472.26	0.0000	15.386
250.00	0.22000E+09	476.12	0.0000	17.063

LENGTH METER	DUTY WATT	LIQUID HOLDUP
0.0000	0.0000	1.0000
25.000	0.66992E+06	1.0000
50.000	0.12568E+07	1.0000
75.000	0.17732E+07	1.0000
100.00	0.22308E+07	1.0000
125.00	0.26383E+07	1.0000
150.00	0.30013E+07	1.0000
175.00	0.33293E+07	1.0000
200.00	0.36222E+07	1.0000
225.00	0.38884E+07	1.0000
250.00	0.41294E+07	1.0000

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI2	IN3
0.0000	0.86313	0.12312	0.29706E-14	0.12497E-02
25.000	0.86313	0.12312	0.29697E-14	0.12497E-02
50.000	0.86313	0.12312	0.29669E-14	0.12497E-02
75.000	0.86313	0.12312	0.29589E-14	0.12497E-02
100.00	0.86313	0.12312	0.29419E-14	0.12497E-02
125.00	0.86313	0.12313	0.29099E-14	0.12497E-02
150.00	0.86313	0.12313	0.28544E-14	0.12497E-02
175.00	0.86313	0.12313	0.27701E-14	0.12497E-02
200.00	0.86313	0.12313	0.26478E-14	0.12497E-02
225.00	0.86313	0.12313	0.24811E-14	0.12497E-02

250.00	0.86312	0.12313	0.22725E-14	0.12497E-02
LENGTH METER	IN4	BUTANO		
0.0000	0.66772E-02	0.58226E-02		
25.000	0.66772E-02	0.58226E-02		
50.000	0.66772E-02	0.58226E-02		
75.000	0.66772E-02	0.58226E-02		
100.00	0.66772E-02	0.58226E-02		
125.00	0.66772E-02	0.58226E-02		
150.00	0.66772E-02	0.58226E-02		
175.00	0.66772E-02	0.58226E-02		
200.00	0.66772E-02	0.58226E-02		
225.00	0.66772E-02	0.58226E-02		
250.00	0.66772E-02	0.58226E-02		

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	E2	LDPE	INI2	IN3
0.0000	0.85463	0.12191	0.15332E-13	0.39752E-02
25.000	0.85463	0.12191	0.15327E-13	0.39752E-02
50.000	0.85463	0.12191	0.15313E-13	0.39752E-02
75.000	0.85463	0.12191	0.15271E-13	0.39752E-02
100.00	0.85463	0.12191	0.15184E-13	0.39752E-02
125.00	0.85463	0.12191	0.15019E-13	0.39752E-02
150.00	0.85463	0.12191	0.14732E-13	0.39752E-02
175.00	0.85463	0.12191	0.14297E-13	0.39752E-02
200.00	0.85463	0.12191	0.13666E-13	0.39752E-02
225.00	0.85463	0.12191	0.12805E-13	0.39752E-02
250.00	0.85463	0.12191	0.11729E-13	0.39752E-02

LENGTH METER	IN4	BUTANO
0.0000	0.75411E-02	0.11945E-01
25.000	0.75411E-02	0.11945E-01
50.000	0.75411E-02	0.11945E-01
75.000	0.75411E-02	0.11945E-01
100.00	0.75411E-02	0.11945E-01
125.00	0.75411E-02	0.11945E-01
150.00	0.75411E-02	0.11945E-01
175.00	0.75411E-02	0.11945E-01
200.00	0.75411E-02	0.11945E-01
225.00	0.75411E-02	0.11945E-01
250.00	0.75411E-02	0.11945E-01

*** COMPONENT ATTRIBUTE PROFILE (PROCESS SUBSTREAM) ***

LENGTH METER	LDPE SFRAC E2-SEG	LDPE SFLOW E2-SEG	LDPE DPN DPN	LDPE DPW DPW
-----------------	-------------------------	-------------------------	--------------------	--------------------

0.0000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
25.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
50.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
75.000	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
100.00	1.0000	0.11396	880.12	3047.2
125.00	1.0000	0.11396	880.13	3047.2
150.00	1.0000	0.11396	880.13	3047.2
175.00	1.0000	0.11396	880.13	3047.2
200.00	1.0000	0.11396	880.13	3047.2
225.00	1.0000	0.11396	880.13	3047.3
250.00	1.0000	0.11396	880.13	3047.3

LENGTH METER	LDPE PDI PDI	LDPE MWN MWN	LDPE MWW MWW	LDPE ZMOM ZMOM
0.0000	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
25.000	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
50.000	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
75.000	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
100.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
125.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
150.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
175.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
200.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
225.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03
250.00	3.4623	24691.	85487.	0.12948E-03

LENGTH METER	LDPE FMOM FMOM	LDPE SMOM SMOM	LDPE LDPN LDPN	LDPE LZMOM LZMOM
0.0000	0.11396	347.26	3437.3	0.22677E-14
25.000	0.11396	347.26	3317.7	0.44664E-14
50.000	0.11396	347.26	3223.0	0.74090E-14
75.000	0.11396	347.26	3043.1	0.18212E-13
100.00	0.11396	347.26	3146.4	0.10973E-13
125.00	0.11396	347.26	2912.8	0.32912E-13
150.00	0.11396	347.26	3011.3	0.21154E-13
175.00	0.11396	347.26	2815.6	0.47886E-13
200.00	0.11396	347.26	2907.4	0.33711E-13
225.00	0.11396	347.26	2864.5	0.40186E-13
250.00	0.11396	347.26	2741.4	0.58115E-13

LENGTH METER	LDPE LFMOM LFMOM	LDPE LSFLOW E2-SEG	LDPE LSFRAC E2-SEG	LDPE LEFLOW E2-SEG
0.0000	0.77946E-11	0.77946E-11	1.0000	0.22677E-14
25.000	0.14818E-10	0.14818E-10	1.0000	0.44664E-14
50.000	0.23879E-10	0.23879E-10	1.0000	0.74090E-14
75.000	0.55420E-10	0.55420E-10	1.0000	0.18212E-13
100.00	0.34526E-10	0.34526E-10	1.0000	0.10973E-13
125.00	0.95866E-10	0.95866E-10	1.0000	0.32912E-13
150.00	0.63702E-10	0.63702E-10	1.0000	0.21154E-13
175.00	0.13483E-09	0.13483E-09	1.0000	0.47886E-13
200.00	0.98013E-10	0.98013E-10	1.0000	0.33711E-13

225.00	0.11511E-09	0.11511E-09	1.0000	0.40186E-13
250.00	0.15932E-09	0.15932E-09	1.0000	0.58115E-13

LENGTH METER	LDPE LEFRAC E2-SEG	LDPE LPFRAC LPFRAC
0.0000	1.0000	0.17514E-10
25.000	1.0000	0.34496E-10
50.000	1.0000	0.57221E-10
75.000	1.0000	0.14066E-09
100.00	1.0000	0.84750E-10
125.00	1.0000	0.25419E-09
150.00	1.0000	0.16338E-09
175.00	1.0000	0.36984E-09
200.00	1.0000	0.26036E-09
225.00	1.0000	0.31037E-09
250.00	1.0000	0.44884E-09

*** RESULTS PROFILE (COOLANT STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE N/SQM	TEMPERATURE K	VAPOR FRAC	RES-TIME SEC
0.0000	0.10000E+08	443.15	1.0000	0.0000
25.000	0.10000E+08	450.43	1.0000	1.7470
50.000	0.10000E+08	456.81	1.0000	3.4818
75.000	0.10000E+08	462.43	1.0000	5.2058
100.00	0.10000E+08	467.41	1.0000	6.9203
125.00	0.10000E+08	471.85	1.0000	8.6266
150.00	0.10000E+08	475.80	1.0000	10.325
175.00	0.10000E+08	479.38	1.0000	12.018
200.00	0.10000E+08	482.57	1.0000	13.705
225.00	0.10000E+08	485.47	1.0000	15.386
250.00	0.10000E+08	488.10	1.0000	17.063

III. LLDPE (Linear Low Density Polyethylene)

III.I Información generada por ASPEN PLUS para el proceso de producción de LLDPE.

BLOCK: R-101 MODEL: RCSTR

 INLET STREAMS: ALIMENT COCA
 OUTLET STREAM: P-104
 PROPERTY OPTION SET: POLYPCSF POLYMER PC-SAFT EQUATION OF STATE

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/SEC)	0.355400	0.371336	0.159355E-01	-
0.149490E-15				
MASS (KG/SEC)	10.5155	10.5155		-
0.102509E-10				
ENTHALPY (WATT)	0.171572E+08	-0.204584E+08		1.83864

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/SEC
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/SEC

*** POLYMER DISTRIBUTIONS ***
 Composite chain length distribution (GPC style)

Cut Number	Chain Length	Mass Fraction
1	1.000	0.4211E-06
2	2.000	0.1683E-05
3	3.000	0.3785E-05
4	4.000	0.6725E-05
5	5.000	0.1050E-04
6	6.000	0.1511E-04
7	7.000	0.2055E-04
8	8.000	0.2683E-04
9	9.000	0.3393E-04
10	10.00	0.4187E-04
11	11.00	0.5063E-04
12	12.00	0.6021E-04
13	13.00	0.7062E-04
14	14.00	0.8185E-04
15	15.00	0.9389E-04
16	16.00	0.1068E-03
17	17.00	0.1204E-03
18	18.00	0.1349E-03
19	19.00	0.1503E-03

20	20.00	0.1664E-03
21	21.00	0.1833E-03
22	22.00	0.2011E-03
23	23.00	0.2196E-03
24	24.00	0.2390E-03
25	25.00	0.2591E-03
26	26.00	0.2801E-03
27	27.00	0.3019E-03
28	28.00	0.3244E-03
29	29.00	0.3478E-03
30	31.00	0.3969E-03
31	35.00	0.5046E-03
32	39.00	0.6249E-03
33	44.00	0.7928E-03
34	50.00	0.1020E-02
35	56.00	0.1274E-02
36	63.00	0.1605E-02
37	70.00	0.1973E-02
38	79.00	0.2498E-02
39	89.00	0.3150E-02
40	100.0	0.3949E-02
41	112.0	0.4915E-02
42	125.0	0.6071E-02
43	141.0	0.7645E-02
44	158.0	0.9494E-02
45	177.0	0.1177E-01
46	199.0	0.1467E-01
47	223.0	0.1813E-01
48	251.0	0.2256E-01
49	281.0	0.2773E-01
50	316.0	0.3427E-01
51	354.0	0.4197E-01
52	398.0	0.5155E-01
53	446.0	0.6275E-01
54	501.0	0.7640E-01
55	562.0	0.9241E-01
56	630.0	0.1111
57	707.0	0.1331
58	794.0	0.1587
59	891.0	0.1876
60	1000.	0.2202
61	1122.	0.2561
62	1258.	0.2947
63	1412.	0.3360
64	1584.	0.3781
65	1778.	0.4200
66	1995.	0.4593
67	2238.	0.4937
68	2511.	0.5206
69	2818.	0.5372
70	3162.	0.5410
71	3548.	0.5301
72	3981.	0.5039
73	4466.	0.4629
74	5011.	0.4091
75	5623.	0.3462
76	6309.	0.2792

77	7079.	0.2133
78	7943.	0.1532
79	8912.	0.1028
80	0.1000E+05	0.6390E-01
81	0.1122E+05	0.3643E-01
82	0.1259E+05	0.1886E-01
83	0.1412E+05	0.8760E-02
84	0.1585E+05	0.3604E-02
85	0.1778E+05	0.1293E-02
86	0.1995E+05	0.3979E-03
87	0.2239E+05	0.1031E-03
88	0.2512E+05	0.2205E-04
89	0.2818E+05	0.3796E-05
90	0.3162E+05	0.5126E-06
91	0.3548E+05	0.5270E-07
92	0.3981E+05	0.3994E-08
93	0.4467E+05	0.2147E-09
94	0.5012E+05	0.7859E-11
95	0.5623E+05	0.1867E-12
96	0.6310E+05	0.2734E-14
97	0.7079E+05	0.2325E-16
98	0.7943E+05	0.1074E-18
99	0.8912E+05	0.2503E-21
100	0.1000E+06	0.2707E-24

Properties of local composite CLD:

Area = 1.002 Pn = 1632. Pw = 3287. PDI = 2.014

*** RESULTS ***

REACTOR HEAT DUTY	WATT	-0.37616E+08
RESIDENCE TIME	SEC	21613.

IV. Nomenclatura.

LDPE=Low Density Polyethylene=Polietileno de baja densidad= PEBD

LLDPE=Linear Low Density Polyethylene=Polietileno lineal de baja densidad=PELBD

La Tabla 9-13 resume las constantes cinéticas de reacción empleadas.

Tabla 9-13. Resumen de constantes cinéticas de reacción

Mecanismo	Constantes Cinéticas de reacción	
Radicales libres	k_d	Iniciación por peróxidos orgánicos
	k_{dO_2}	Iniciación por oxígeno
	k_{th}	Descomposición térmica
	k_p	Propagación
	k_{tc}	Terminación por combinación
	k_{td}	Terminación por desproporción
	k_{fm}	Transferencia al monómero
	k_{fts}	Transferencia al agente de transferencia
	k_β	Ruptura β en radicales terminales
	k_{LCB}	Transferencia de cadena al polímero que conduce a ramificación de cadena larga
	k_{SCB}	Transferencia de cadena al polímero que conduce a ramificación de cadena corta
	$k_{\beta'}$	Ruptura β en radicales internos
	k_{db}	Doble enlace terminal
Ziegler-Natta	k	Formación de sitios activos
	k_i	Iniciación
	k_p	Propagación
	k_{fm}	Transferencia de cadena al monómero
	k_{fh}	Transferencia de cadena al hidrógeno
	k_{fr}	Transferencia de cadena al cocatalizador
	k_{fs}	Transferencia de cadena espontanea
	k_{ds}	Desactivación Espontanea

La Tabla 9-14 resume el significado de las siglas del reporte de ASPEN PLUS en los reactores.

Tabla 9-14. Resumen del significado de las siglas del reporte de ASPEN PLUS para los reactores.

Siglas	Significado
SFRAC	Fracción mol del segmento tipo i
SFLOW	Flujo molar del segmento tipo i
DPN	Promedio en número de tamaño de cadena
DPW	Promedio en peso de tamaño de cadena
DPZ	Promedio z de tamaño de cadena
PDI	Polidispersidad (Dispersidad de masa molar, \bar{D})
MWN	Promedio en número de pesos moleculares
MWW	Promedio en peso de pesos moleculares
MWZ	Promedio Z de pesos moleculares
ZMOM	Momento cero de la distribución de longitud de cadena
FMOM	Primer momento de la distribución de longitud de cadena
SMOM	Segundo momento de la distribución de longitud de cadena
LDPN	Promedio en número para el polímero vivo
LZMOM	Momento cero de la distribución de longitud de cadena para el polímero vivo
LFMOM	Primer momento de la distribución de longitud de cadena para el polímero vivo
LSFLOW	Segundo momento de la distribución de longitud de cadena para el polímero vivo
LSFRAC	Fracción mol del polímero vivo
LEFLOW	Flujo del segmento final en el polímero vivo
LEFRAC	Fracción del segmento final en el polímero vivo
LPFRAC	Fracción del polímero vivo

Distribution=Distribución.

Moments=Momento.

Molecular weight=Peso molecular.

Molecular weight distribution=Distribución en peso molecular.

Weight fraction=Fracción peso.