

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

ESTUDIO Y EVALUACIÓN DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN DE LA REFINERÍA EL PALITO

TUTORES ACADÉMICOS: Prof. José F. Fernández
Prof. Carlos Morales

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
para optar al Título de Ingeniero Químico
por la Br. Espinoza N. Ruth.,
y la T.S.U. Ricci Z. Rita.

Caracas, Mayo de 2002

**Espinoza N., Ruth de las N.
Ricci Z., Rita**

ESTUDIO Y EVALUACIÓN DEL PROCESO DE ALQUILACIÓN DE LA REFINERÍA EL PALITO

**Tutores Académicos: Prof. José Fernández. Prof. Carlos Morales. Tesis.
Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química.
Año 2002, 150 p.**

Palabras Claves: Alquilación, Simulación, Isobutano, Olefinas, Ácido Fluorhídrico, Alquilato y Refinería.

Resumen: El presente trabajo tiene como propósito estudiar y evaluar el proceso de alquilación de la Refinería el Palito utilizando como herramienta principal los paquetes de simulación especializados HYSYS Process y PRO II. Para llevar a cabo este estudio se realizó una revisión bibliográfica del proceso de alquilación con HF y de los factores que influyen en el proceso, así como también de los simuladores mencionados, señalando sus capacidades y limitaciones.

El proceso fue analizado por secciones: reacción, purificación y neutralización, de las cuales se decidió estudiar las dos primeras. Para la simulación de la sección de reacción, se utilizaron datos cinéticos obtenidos por medio de un trabajo desarrollado en INTEVEP, y se determinó que el arreglo que mejor representa esta sección es el de dos trenes en paralelo de ocho reactores flujo pistón en serie de igual volumen cada uno. Luego de simular la sección de reacción, se procedió a estudiar el comportamiento de la etapa de purificación de la unidad bajo distintos modelos termodinámicos preseleccionados teóricamente, determinando el más adecuado para cada simulador, en función a su desviación con respecto a los datos de planta.

Una vez seleccionado el modelo termodinámico, se emplearon distintos valores de eficiencias de platos en las torres debutanizadora, depropanizadora y despojador de ácido, y se compararon los resultados con los datos obtenidos en planta, con la finalidad de determinar la eficiencia real de las etapas en cada una de las columnas.

Finalmente, se realizó un análisis de sensibilidad realizando cambios en las variables que afectan directamente el proceso de alquilación, a saber:

relación isobutano/olefina, relación ácido/hidrocarburo, temperatura de reacción y concentración de ácido, estudiando el efecto en los productos y corrientes más importantes al trabajar en el rango mínimo y máximo permisible de estas variables.

Luego de llevar a cabo este análisis se llegó a una serie de conclusiones, entre las cuales pueden mencionarse: el simulador PROII es el que mejor reproduce los datos de planta de la unidad de alquilación; los modelos termodinámicos más adecuados para el proceso son las ecuaciones de estado Peng Robinson Stryjek Vera y Peng Robinson Huron Vidal para HYSYS y PROII respectivamente; las altas relaciones isobutano/olefina favorecen la producción de alquilato, así como las bajas temperaturas de reacción; una alta relación ácido/hidrocarburo disminuye la cantidad de compuestos indeseables y aumenta la producción de alquilato; y una alta concentración de ácido no aporta grandes beneficios en la producción de alquilato, por lo que debe mantenerse en un nivel adecuado.

Adicionalmente, se proponen una serie de recomendaciones entre las cuales se tiene: realizar más estudios de las constantes cinéticas, en cuanto a variaciones en la temperatura de reacción y cambios en los datos de planta, así como realizar una subrutina en PROII para determinar estas constantes, y posteriormente compararlas con HYSYS.

Caracas, Mayo de 2002

Los abajo firmantes, miembros del Jurado designado por el Consejo de Escuela de Ingeniería Química, para evaluar el Trabajo Especial de Grado presentado por la Bachiller Espinoza N. Ruth y la T.S.U. Ricci Z. Rita, titulado:

**"ESTUDIO Y EVALUACIÓN DEL PROCESO
DE ALQUILACIÓN DE LA REFINERÍA EL PALITO"**

Consideran que el mismo cumple con los requisitos exigidos por el plan de estudios conducente al título de Ingeniero Químico, y sin que ello signifique que se hacen solidarios con las ideas expuestas por los autores, lo declaran APROBADO.

Prof.: Berenice Blanco
Jurado

Prof. Leonardo Oropeza
Jurado

Prof. José Fernández
Tutor Académico

Prof. Carlos Morales
Tutor Académico

AGRADECIMIENTOS

Queremos agradecer a todas las personas que desinteresadamente colaboraron con nosotras en el desarrollo de este Trabajo Especial de Grado, entre ellos mencionaremos a:

Nuestros queridos tutores, los Ingenieros Carlos Morales y José Francisco Fernández, por su valioso apoyo en los momentos difíciles, por la amistad que nos han brindado y la confianza que depositaron en nosotras.

A los profesores Berenice Blanco y Leonardo Oropeza por la búsqueda continua de la excelencia.

A los profesores Luis García, Rafael Martín, Aimeé Briceño, Humberto Kum y Wadou Baré por sus consejos, enseñanza y dedicación a lo largo de nuestra carrera.

A los Ingenieros Pedro Mora y Manuel Pacheco les damos las gracias por guiarnos y ofrecernos las herramientas principales para el logro de nuestro trabajo.

A Pedro Borges, Alessandro Ricci, Adrián Hernández, Gabriela Fermín, Iraidá Rojas y Roberto Moreno por colaborar permanentemente con nosotras.

Ruth:

Agradezco a mis padres, Ana Margarita Noguera y Nelson Espinoza, por estar a mi lado en todo momento y por su esfuerzo constante para permitirme lograr la meta de graduarme de Ingeniero Químico; a mi hermano, por su amistad y los buenos momentos que hemos compartido; a mi prima Marisela Ponce, por ser más que una prima una gran amiga; a mis mejores amigos de la Universidad, Manuel Machillanda, a quien estas líneas no alcanzan para agradecer su amistad, su compañía y sobre todo su lealtad; Fabiola Ramírez, por ser una gran amiga y compañera dentro y fuera de la Escuela; Gerardo Rivero, por sus palabras de ánimo y por su buen humor; a Ramsés Pérez, por toda su ayuda y su cariño incondicional; y a mi compañera Rita Ricci, por su constancia y esfuerzo realizado para hacer posible la culminación de este Trabajo Especial de Grado.

Rita:

Agradezco a mis padres, Edda Zitella y Vittorio Ricci, por confiar en mí y por acompañarme y apoyarme durante mi trayectoria como estudiante, por su amor y dedicación, por estar siempre presentes. Gracias, los quiero mucho; a mis hermanos Alessandro, Antonela y Jhonny por ser tan especiales brindándome su amistad, unión y comprensión. A mis sobrinos, Jacqueline, Jhonny, Alessandro, M^a Angela, Carlo y especialmente a William y Flavio, les doy las gracias por despertar la ternura en mi vida con la inocencia que los caracteriza. A mis cuñados por acompañarme siempre. A mis amigos Adamarlys, Carmen, Gabriela, Antonieta, Osiris, Maite, Jeannette, Harold, Ramón, Pedro, Manuel y Lolo a quienes estas líneas son pocas para expresar mi agradecimiento, por escucharme en los momentos difíciles y por estar siempre allí. A Reina, Carmelo, mi madrina Rosa, Monseñor Sánchez por su cariño y compartir conmigo esta satisfacción de lograr una de mis metas. A Harry por su fidelidad y compañía. A ti Ruth por no flaquear y estimularme con paciencia y constancia.

A mi esposo, Roberto Moreno por estar a mi lado, por ayudarme, por apoyarme y por darme valor en los momentos que más lo he necesitado. Lo mejor fue haberte conocido y más aún ser tu amiga y esposa por siempre.

A todos los que no fueron nombrados pero que directa o indirectamente colaboraron con la realización de este trabajo, gracias.

A Dios...

ÍNDICE

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
ÍNDICE DE TABLAS.....	XII
ÍNDICE DE FIGURAS	XIV
LISTA DE SÍMBOLOS	XV
INTRODUCCIÓN	2
 CAPÍTULO I. FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN	
I.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	5
I.2. OBJETIVO GENERAL.....	7
I.3. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	8
 CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO	
II.1. ALQUILACIÓN CON HF	10
II.1.1. ALQUILACIÓN CATALÍTICA.....	11
II.1.1.1. Química de la reacción	12
a) Esquema de Reacción.....	12
b) Reacciones Secundarias	16
II.1.1.2. Cinética de las reacciones	16
a) Metodología para el Modelaje de la Sección de Reacción	19
b) Resultados obtenidos en INTEVEP.....	21
II.1.2. UNIDAD DE ALQUILACIÓN DE LA REFINERÍA EL PALITO	23
II.1.3. DESCRIPCIÓN DETALLADA DEL PROCESO	24
II.1.3.1. Descripción de los equipos contenidos en las secciones de reacción y fraccionamiento	24
II.1.3.2. Descripción de los equipos en la sección de neutralización.....	31
II.1.4. VARIABLES DEL PROCESO	34
II.1.4.1. Relación Isobutano/Olefinas (I/O)	34
II.1.4.2. Relación Ácido/Hidrocarburo (HF/HC)	36
II.1.4.3. Concentración de HF	37
II.1.4.4. Temperatura de Reacción	38

II.1.5. FACTORES QUE AFECTAN LAS CALIDADES DE LOS PRODUCTOS	39
II.1.5.1. Porcentaje de n-butano en el isobutano de reciclo	39
II.1.5.2. Pérdidas de isobutano en el n-butano a almacén	39
II.1.5.3. Especificaciones del Alquilato	40
II.1.5.4. Fluoruros combinados en el n-butano y el propano	40
II.1.5.5. Porcentaje de agua en el ácido fluorhídrico circulante	41
II.1.5.6. Regeneración del ácido fluorhídrico	41
II.1.5.7. Temperatura de precalentamiento de la carga a la Depropanizadora y presión de tope de la depropanizadora	43
II.1.5.8. Flujo de gases del despojador de ácido	43
II.2. SIMULADORES	44
II.2.1. HYSYS 1.5	44
II.2.1.1. Modelos Termodinámicos.....	45
a) Ecuaciones de estado.....	46
b) Modelos de Actividad	46
II.2.1.2. Equipos de operación	47
II.2.2. PRO II/PROVISION	47
II.2.2.1. Modelos Termodinámicos.....	48
a) Ecuaciones de estado.....	48
b) Coeficientes de Actividad de Líquidos	49
II.2.2.2. Equipos de operación	49
II.2.3. DESCRIPCIÓN DE LOS EQUIPOS A SIMULAR	49
 CAPÍTULO III. METODOLOGÍA	
III.1. RECOPIACIÓN DE DATOS.....	56
III.2. COMPARACIÓN TEÓRICA DE LOS SIMULADORES	57
III.3. DIAGRAMA SIMPLIFICADO Y BALANCE DE MASA	57
III.3.2. ESPECIFICACIÓN DE LOS EQUIPOS A SIMULAR	60
III.3.2. BALANCE DE MASA Y ALQUILATO PRODUCIDO.....	61
III.4. SELECCIÓN DE LOS REACTORES.....	61
III.5. BASES DE LA SIMULACIÓN	64
III.6. SELECCIÓN DE LOS MODELOS TERMODINÁMICOS	65
III.7. EFICIENCIA REAL DE PLATOS.....	66

III.8. SELECCIÓN DE LAS VARIABLES CRÍTICAS DEL PROCESO	66
III.9. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	67
CAPÍTULO IV. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	
IV.1. COMPARACIÓN TEÓRICA DE LOS SIMULADORES	70
IV.2. BALANCE DE MASA	71
IV.3. SELECCIÓN DEL REACTOR	72
IV.4. SELECCIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO	78
IV.5. DETERMINACIÓN DE LA EFICIENCIA REAL DE PLATO EN LAS TORRES	91
IV.6. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD.....	93
IV.6.1. RELACIÓN ISOBUTANO/OLEFINA	93
IV.6.2. RELACIÓN ÁCIDO/HIDROCARBURO	95
IV.6.3. TEMPERATURA DE REACCIÓN	96
IV.6.4. CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO	97
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	99
BIBLIOGRAFÍA	104
ANEXOS	
ANEXO A: TABLAS DE DATOS	108
A.1. CONDICIONES DE LAS CORRIENTES DE ALQUILACIÓN	108
ANEXO B: CÁLCULOS TIPOS	111
B.1. CASO BASE	111
B.1.1. BALANCE DE MASA.....	111
B.1.2. DETERMINACIÓN TEÓRICA DEL ALQUILATO	113
B.1.3. VOLUMEN REAL DEL REACTOR.....	114
B.1.4. CÁLCULO DE LAS VELOCIDADES DE REACCIÓN	114
B.2. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD	118
B.2.1. CÁLCULO DE LA RELACIÓN ISOBUTANO/OLEFINA.....	118

B.2.1.1. Valor mínimo para la relación isobutano/olefina.....	118
B.2.1.2. Valor máximo para la relación isobutano/olefina.....	119
B.2.2. CÁLCULO DE LA RELACIÓN ÁCIDO/HIDROCARBURO.....	119
B.2.2.1. Valor mínimo para la relación ácido/hidrocarburo	119
B.2.2.2. Valor máximo para la relación isobutano/olefina.....	119
B.2.3. CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO.....	120
B.2.3.1. Valor mínimo para la concentración de ácido.....	120
ANEXO C: TABLAS DE RESULTADOS	121
ANEXO D. REPORTES EN PROII.....	132

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla N° 1: Constantes cinéticas de las reacciones de alquilación y22	22
diámetro de gota de la emulsión de la función objetivo. [PACHECO, 2001]	22
Tabla N° 2: Principales corrientes de la Unidad de Alquilación	58
Tabla N° 3 Variables críticas del proceso de alquilación.....	67
Tabla N° 4: Comparación teórica de los Simuladores	71
Tabla N° 5: Producción esperada de alquilato respecto a las olefinas alimentadas	72
Tabla N° 6: Efecto de la caída de presión en la producción del alquilato.....	73
Tabla N° 7: Efecto de ϵ en la producción del alquilato	74
Tabla N° 8: Efecto de la variación de ϵ en la producción del alquilato para 8 RMC en serie y un RMC.....	75
Tabla N° 9: Efecto de la variación del D_g en la producción del alquilato	75
Tabla N° 10: Producción del alquilato para los reactores flujo pistón y mezcla completa utilizando el modelo de actividad UNIQUAC.....	76
Tabla N° 11: Producción de alquilato en la sección de conversión	77
Tabla N° 12: Pre-selección teórica de los modelos de actividad en HYSYS y PROII.....	79
Tabla N° 13: Validación de las características del isobutano de reciclo de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	80
Tabla N° 14: Validación de las características de n-Butano de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos.....	81
Tabla N° 15: Validación de las características del fondo de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	82
Tabla N° 16: Validación de las características del tope de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	83
Tabla N° 17: Selección de los modelos termodinámicos para el simulador HYSYS.....	84
Tabla N° 18: Selección de los modelos termodinámicos para el simulador PROII.....	85
Tabla N° 19: Validación de las condiciones de operación de la torre D-6810.....	89
Tabla N° 20: Validación de las condiciones de operación de la torre D-6815.....	90
Tabla N° 21: Validación de las condiciones de operación de la torre D-6817.....	91

Tabla N° 22: Selección de la eficiencia en las torres para el simulador HYSYS con la ecuación de estado seleccionado PRSV	91
Tabla N° 23: Selección de la eficiencia en las torres para el simulador PROII con la ecuación de estado seleccionado PRH	92
Tabla N° 24: Efecto de la variación de la relación isobutano/olefina en HYSYS ..	93
Tabla N° 25: Efecto de la variación de la relación isobutano/olefina en PROII ...	94
Tabla N° 26: Efecto de la variación de la relación ácido/hidrocarburo en HYSYS	95
Tabla N° 27: Efecto de la variación de la relación ácido/hidrocarburo en PROII .	96
Tabla N° 28: Efecto de la variación de la temperatura de reacción en HYSYS	96
Tabla N° 29: Efecto de la variación de la temperatura de reacción en HYSYS	97
Tabla N° 30: Efecto de la variación de la concentración de ácido.....	98
Tabla N° 31: Características de las corrientes intermedias para la validación de la simulación a condiciones actuales de operación.....	108
Tabla N° 32: Características de las corrientes de alimentación para la validación de la simulación a condiciones actuales de operación.....	109
Tabla N° 33: Condiciones de operación de las torres de fraccionamiento para la validación de la simulación a condiciones actuales de operación.	110
Tabla N°34: Relación entre el área interfacial por unidad de volumen total de emulsión.....	115
Tabla N° 35: Valores de la constante cinética para un diámetro de gota promedio de 85,3 μm variando $\mathbf{a/V_\varepsilon}$	116
Tabla N° 36: Valores de la constante cinética para un diámetro de gota promedio de 45 μm variando $\mathbf{a/V_\varepsilon}$	117
Tabla N° 37 Valores de la constante cinética para un diámetro de gota promedio de 10 μm variando $\mathbf{a/V_\varepsilon}$	117
Tabla N° 38: Un RMC con $\Delta P = 0$ psi, $D_g = 85,3$ μm y $\varepsilon = 0,06$	121
Tabla N° 39: Un RMC con $\Delta P = 10$ psi, $D_g = 85,3$ μm y $\varepsilon = 0,06$	121
Tabla N° 40: Un RMC con $\Delta P = 0$ psi, $D_g = 85,3$ μm y $\varepsilon = 0,36$	122
Tabla N° 41: Ocho RMC en serie, $D_g = 85,3$ μm y variando ε	122
Tabla N° 42: Ocho RMC en serie, $D_g = 10$ μm y variando ε	122
Tabla N° 43: Dos trenes en paralelo con ocho RMC en serie cada uno, $D_g=10$ μm y variando ε	123
Tabla N° 44: Validación de las características del tope de la torre D-6810	124
Tabla N° 45: Validación de las características del reflujo de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos.....	125

Tabla N° 46: Validación de las características del fondo de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	126
Tabla N° 47: Validación de las características del corte lateral de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	127
Tabla N° 48: Validación de las características del reflujo de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos.....	128
Tabla N° 49: Validación de las características del fondo de la torre D-6817 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	129
Tabla N° 50: Validación de las características del tope de la torre D-6817 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	130
Tabla N° 51: Validación de las características del tope de la torre D-6809 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos	131

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura N° 1: Variación de la fracción volumétrica de HC con la coordenada axial en el reactor	22
Figura N° 2: Diagrama de flujo de la Refinería El Palito.....	25
Figura N° 3: Efectos de la relación I/O sobre la calidad del Alquilato.....	35
Figura N° 4: Efectos de la relación HF/HC sobre la calidad del alquilato.	36
Figura N° 5: Efectos de la concentración del HF sobre la calidad del Alquilato..	38
Figura N° 6: Efectos de la temperatura de reacción sobre la calidad del Alquilato.	38
Figura N° 7: Diagrama de flujo simplificado de la Unidad de Alquilación.....	59
Figura N° 8: Diagrama representado en HYSYS	87
Figura N° 9: Diagrama representado en PROII	88

LISTA DE SÍMBOLOS

- a: área interfacial hidrocarburo ácido (m^2)
- A: moles de isobutano presente en la alimentación de olefinas (lbmol)
- B: moles de isobutano presente en la alimentación de isobutano de reposición (lbmol)
- C: moles de isobutano presente en la corriente de isobutano de reciclo (lbmol)
- D: moles de propileno presentes en la alimentación de olefinas (lbmol)
- Dg: diámetro promedio de gota formada en la dispersión (μm)
- e: eficiencia de platos en las torres (adimensional)
- E: moles de butilenos presentes en la alimentación de olefinas (lbmol)
- ϵ : fracción volumétrica de hidrocarburo en la emulsión (adimensional)
- F: moles de amilenos presentes en la alimentación de olefinas (lbmol)
- F obj: función objetivo
- HF/HC: relación ácido a hidrocarburo (lbmol HF/lbmol HC)
- I/O: relación isobutano a olefina (lbmol iC_4 /lbmol de olefinas)
- k_j : constante cinética de la reacción j ($m^3/kmol.s$)
- NV: número de variables, calidades de producto, etc. que se esperaría que el modelo pudiera predecir con la menor desviación posible.
- P: presión (psig)
- r_{ja} : velocidad específica de la reacción j ($kmol/m^2.s$)
- r_{jb} : velocidad volumétrica de la reacción j ($kmol/m^3.s$)
- T: temperatura ($^{\circ}F$)
- Ycalc: variable calculada
- Yplanta: variable medida en planta

INTRODUCCIÓN

Hoy en día la ingeniería química abarca infinidad de procesos que pueden ser representados, en su mayoría, por modelos matemáticos complejos que se relacionan entre sí. Para resolverlos se utilizan sistemas computarizados, denominados simuladores, que permiten manejar con rapidez y precisión diversos sistemas de ecuaciones lineales y no lineales, bien sea en forma numérica y/o analítica, a fin de aportar respuestas rápidas a los problemas planteados, sin la necesidad de incurrir en cálculos manuales que se caracterizan por ser lentos, tediosos y susceptibles de error.

Para la industria en general, esta herramienta representa un avance significativo porque permite reproducir o emular un proceso en estado estacionario o dinámico, con el objetivo posterior de evaluar el comportamiento de todo el proceso o de alguna sección del mismo al producirse cambios en una o varias de las variables de operación involucradas.

La simulación de procesos químicos permite el diseño, evaluación, desarrollo y optimización de plantas o equipos, sin la necesidad de realizar corridas operacionales que implican elevadas inversiones de tiempo y dinero. No todos los simuladores presentan la misma capacidad de manejo de operaciones, ecuaciones termodinámicas, correlaciones de transferencia de calor y masa; ni la misma aplicabilidad a diversos sistemas. Debido a esto es necesario establecer las ventajas, desventajas, fortalezas y limitaciones que poseen los simuladores comerciales, a fin de establecer su aplicabilidad en el análisis de un proceso dado y por lo tanto, establecer la confiabilidad de los resultados obtenidos en cada simulación.

Uno de los procesos más importantes presentes en la Refinería El Palito es el de alquilación, cuyo objetivo principal es la producción de alquilato, componente primordial en la formulación de gasolina y que se caracteriza por estar constituido por una variedad de componentes de elevado octanaje. Debido a la

importancia comercial de este producto se plantea realizar una comparación entre los resultados obtenidos con los simuladores HYSYS y PRO II a partir de la simulación de la unidad de alquilación de la Refinería El Palito, con el fin de facilitar información que pueda utilizarse en un futuro como referencia para trabajos, proyectos y consultas específicas en el área.

Para tal fin, se estudiarán las principales características de los dos paquetes de simulación empleados y las diferencias relativas al proceso estudiado. Tal comparación tendrá su base tanto en la capacidad del simulador de reflejar los datos reales de planta como en el comportamiento del proceso frente a cambios en ciertas variables críticas del mismo, evidenciando así las ventajas y desventajas de cada paquete de simulación ante el proceso de alquilación con ácido fluorhídrico como catalizador.

CAPÍTULO I. FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN

En este capítulo se presenta la descripción del problema en estudio, así como los objetivos planteados para el desarrollo del presente Trabajo Especial de Grado.

I.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Inicialmente este Trabajo Especial de Grado nace como un proyecto del CONICIT (Agenda Petróleo) cuyo objetivo principal era el estudio y simulación en HYSYS del proceso de alquilación basado en catálisis heterogénea utilizando como catalizador ácido, un lecho sólido para reemplazar los tradicionales catalizadores ácidos líquidos, como son el ácido fluorhídrico y el ácido sulfúrico. Para llevar a cabo este proyecto era necesario realizar el estudio tomando como caso base o referencia el proceso de alquilación existente en la Refinería el Palito. El desarrollo consistía en simular el proceso de alquilación a condiciones actuales de operación y en base a los resultados obtenidos realizar los cambios necesarios para implementar las nuevas tecnologías.

Este proyecto no pudo concretarse debido al incumplimiento de objetivos por la escasa información del catalizador sólido en cuanto a la relación ácido/hidrocarburo y propiedades físico-químicas, entre otras, que se necesitan como datos para desarrollar las simulaciones planteadas. Ante esta situación, surge la necesidad de reestructurar los objetivos tanto generales como específicos del proyecto inicial para aprovechar y ampliar los conocimientos adquiridos durante esta primera fase.

El planteamiento actual de los objetivos relacionados con el estudio y comparación de los simuladores está referido a un proyecto anterior realizado por la Br. Nathalia García, en la Universidad Central de Venezuela, en el año 1999, titulado "Comparación y evaluación de HYSYS y PRO II en la simulación del proceso de Isomerización", en el cual se concluyó que para el proceso de

isomerización es más recomendable el simulador PROII por reproducir mejor los datos de planta.

Adicionalmente, se plantean otros objetivos enfocados en el estudio riguroso de la sección de reacción y separación del proceso de alquilación en la cual intervienen dos fases líquidas y una fase vapor, lo que hace para efectos de las simulaciones un proceso complejo para validar. Cabe destacar, que anteriormente no se han realizado ningún tipo de estudio en la sección de reacción específicamente en la Universidad Central de Venezuela porque no se disponen de los datos teóricos en cuanto a la cinética de reacción, por lo que constituye un aporte importante para los usuarios que necesiten reproducir o mejorar el proceso.

Actualmente, el estudio exhaustivo de un proceso químico puede ser llevado a cabo de una forma más sencilla y exacta mediante la utilización de los denominados paquetes de simulación. Éstos evitan los complicados y tediosos cálculos manuales, además de minimizar las posibilidades de cometer errores. Existe una gran diversidad de simuladores, cada uno con características específicas que lo distinguen de los demás, tales como: ecuaciones termodinámicas, equipos, compuestos químicos, métodos numéricos de resolución, etc; por esta razón, al validar un proceso, no se obtienen los mismos resultados de un simulador a otro, es decir, existe uno que se ajusta mejor a la realidad de un proceso dado.

El proceso de alquilación responde a la necesidad de obtención de gasolinas de alto octanaje ya que el producto obtenido, una parafina de alto peso molecular (alquilato), es utilizado como un aditivo que, debido a sus características químicas, contribuye a aumentar el número de octanos de la gasolina. Además, la importancia del proceso de alquilación para una refinería es cada día mayor debido a la tendencia mundial de usar gasolinas sin plomo, por lo cual, se requiere incrementar la producción de componentes de alto

octanaje como el alquilato. Para alcanzar los resultados esperados, es decir, un producto de alta calidad y octanaje, se requiere la optimización de las variables críticas del proceso, como lo son la temperatura de reacción, la relación isoparafina-olefina, la concentración del catalizador y la relación ácido-hidrocarburo.

Para realizar la evaluación de dichas variables mediante una simulación, es necesario conocer cuál paquete se adapta mejor al proceso, por lo que se lleva a cabo una validación del proceso actual, tomando como modelo la Unidad de Alquilación de la Refinería El Palito, por su ubicación geográfica y sobre todo por la disponibilidad de los datos de planta. La selección del simulador, por lo tanto, se basa en la similitud entre los datos arrojados por cada paquete y los datos de planta.

La validación del proceso utilizando el simulador más apropiado permite estudiar con una mayor exactitud el comportamiento de las variables clave del proceso, es decir, determinar de qué manera influyen en el producto sin la necesidad de operarlas en planta disminuyendo los riesgos que pueden ocasionar y evitando así pérdidas económicas y de tiempo. Además, permite determinar cuáles son las condiciones óptimas en las que debe llevarse a cabo la alquilación, para obtener un alquilato con las características deseadas. Por lo anteriormente expuesto, con la realización de este Trabajo Especial de Grado se pretende alcanzar los siguientes objetivos:

I.2. OBJETIVO GENERAL

Evaluar el proceso de alquilación empleado en la Refinería El Palito a partir de los resultados obtenidos, en estado estacionario, con los simuladores HYSYS y PRO II, con el fin de determinar y comparar el efecto que tienen las variables de proceso más importantes sobre la producción de alquilato.

I.3. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ✓ Familiarizarse con el proceso de alquilación que emplea ácido fluorhídrico como catalizador.
- ✓ Realizar un estudio termodinámico y cinético del proceso de alquilación de olefinas empleando ácido fluorhídrico como catalizador.
- ✓ Realizar un análisis teórico de los simuladores HYSYS y PRO II.
- ✓ Establecer las diferencias entre ambos simuladores desde el punto de vista de definición de parámetros y manejo de los equipos.
- ✓ Definir las bases necesarias para realizar la simulación en HYSYS y PRO II.
- ✓ Simular el caso base en ambos paquetes a partir del diagrama de flujo del proceso de alquilación de la Refinería El Palito.
- ✓ Validar los resultados obtenidos a partir de la simulación.
- ✓ Establecer las causas de las posibles desviaciones entre los datos reales de planta y los reportes de cada simulador.
- ✓ Determinar la eficiencia real de platos en las columnas de separación.
- ✓ Estudiar el efecto de las variables de proceso (relación olefina – isobutano, flujos alimentados al reactor, temperatura de reacción, concentración del ácido, relación ácido – hidrocarburos, entre otros) sobre la producción de alquilato.
- ✓ Analizar los resultados obtenidos a fin de establecer las conclusiones y recomendaciones pertinentes.

CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO

En esta sección se establecerá de manera general la base teórica del proceso de alquilación, así como la descripción de la Unidad de Alquilación de la Refinería el Palito que emplea ácido fluorhídrico como catalizador. Además, se especificará la química del proceso, la cinética de las reacciones que ocurren en el mismo, las variables críticas y a grandes rasgos los factores que afectan las calidades del alquilato.

II.1. ALQUILACIÓN CON HF

El objetivo del proceso de alquilación es producir un componente de alto octanaje denominado alquilato. El alquilato constituye un excelente componente para la mezcla de gasolinas debido a su alto número de octano, su buena respuesta a la adición de plomo y a la pequeña diferencia entre su número de octano determinado por los métodos de motor (MON) y de investigación (RON) [ROSATI, 1986].

La alquilación cubre una gran variedad de reacciones. La más común de éstas es la formación de isoparafinas para combustibles de motor de alta calidad mediante la reacción de isobutano con propeno o butenos en presencia de un catalizador. En menor volumen, pero de gran importancia en la industria petroquímica, es la reacción de olefinas seleccionadas con aromáticos para producir etilbenceno, isopropilbenceno, o alquilo-aromáticos similares. Otras reacciones de interés incluyen en la alquilación compuestos que contengan fenoles, aminas aromáticas, oxígeno o azufre, y la formación de compuestos órgano metálicos.

Por ser la carga de olefinas una mezcla de diferentes tipos de hidrocarburos insaturados, al entrar en contacto con el isobutano y el ácido fluorhídrico en los reactores de la unidad, se llevan a cabo una serie de reacciones, que son relativamente complejas, cuyo mecanismo de reacción es a través del ión carbonio. Las principales reacciones que tienen lugar son la alquilación de los

amilenos, del 1-buteno, del 2-buteno, de los isobutilenos y de los propilenos [MORRISON – BOYD, 1990].

Algunas alquilaciones pueden ser llevadas a cabo térmicamente a altas presiones y a elevadas temperaturas (>510 °C), en donde las cadenas lineales como las isoparafinas pueden así ser alquiladas por olefinas. La facilidad de la alquilación térmica va disminuyendo en el siguiente orden: etileno, propileno, isobutileno y n-butanos. Las reacciones colaterales incluyen el craqueo y la polimerización. Las olefinas son añadidas lentamente a la reacción para mantener una alta relación parafina/olefina, y así minimizar las reacciones de polimerización.

Los procesos comercialmente importantes son conducidos catalíticamente. Los ácidos protónicos (ácido sulfúrico, fluoruro de hidrógeno, ácido fosfórico) y catalizadores de *Friedel-Crafts* (cloruro de aluminio, fluoruro de boro), metales alcalinos, óxidos de metales, o sales, son catalizadores representativos. El ácido sulfúrico y el ácido fluorhídrico predominan en la alquilación parafínica, y el cloruro de aluminio promovido por HCl es usado frecuentemente en la alquilación de aromáticos.

II.1.1. ALQUILACIÓN CATALÍTICA

La alquilación catalítica ocurre a condiciones moderadas, entre 0 y 40 °C, y presión suficiente para mantener los hidrocarburos en fase líquida. Los catalizadores se encuentran en una fase separada, y los reactantes y productos deben transferirse hacia y desde el catalizador. Únicamente las parafinas con carbonos terciarios sufrirán la alquilación catalizada sin obstáculos. Las reacciones secundarias incluyen transferencia de hidrógeno, polimerización y formación de ésteres.

Los catalizadores de *Friedel-Crafts*, tales como cloruro de aluminio promovido por cloruro de hidrógeno, originan la alquilación del isobutano con olefinas a temperaturas tan bajas como $-35\text{ }^{\circ}\text{C}$, a excepción del etileno que requiere de temperatura ambiente o mayores. A temperatura ambiente con las otras olefinas, el craqueo y otras reacciones colaterales producen un bajo rendimiento de los productos principales. Sin embargo, con excepción del etileno, el cual forma ésteres estables con estos ácidos, el ácido sulfúrico y el ácido fluorhídrico son utilizados casi universalmente para la alquilación del isobutano. La larga vida del ácido y su conveniente estado líquido son los responsables de su aceptación.

II.1.1.1. Química de la reacción

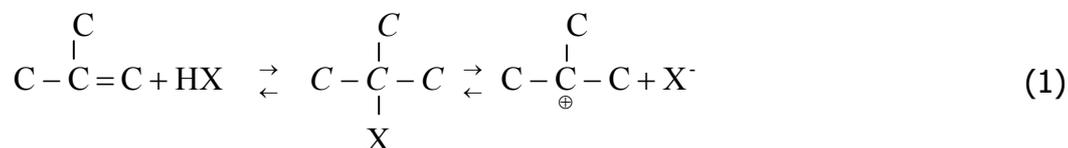
La reacción ocurre con ambos catalizadores a través del mecanismo de ión carbonio. Únicamente las isoparafinas que contienen un carbón terciario son sometidas a la alquilación catalítica.

Una molécula que contenga un átomo de carbono el cual tiene un déficit de dos electrones en su capa exterior, es conocida como ión carbonio. Posee una carga positiva y es apareado con un anión del catalizador. El anión está siempre presente, pero frecuentemente en la notación de la reacción únicamente el ión carbonio se muestra por conveniencia. La estabilidad del ión carbonio decrece en el siguiente orden: terciario, secundario y primario; siendo el terciario el único lo suficientemente estable para ser saturado mediante la reacción con la isoparafina. Los otros iones carbonio isomerizan rápidamente a un ión terciario.

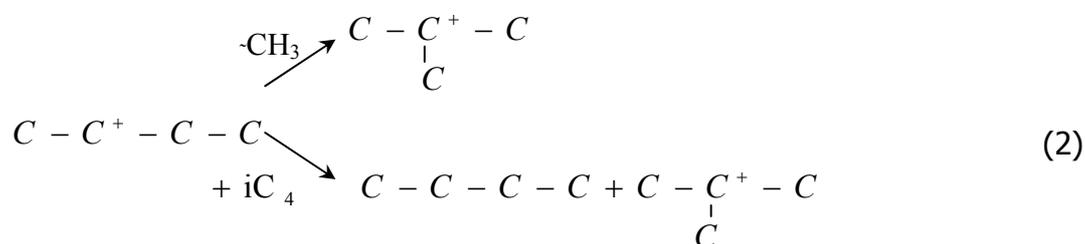
a) Esquema de Reacción

A continuación se presenta el mecanismo de reacción para la alquilación de isobutano con butano, el esquema de reacción puede ser resumido como se muestra a continuación (X es OSO_3H , F o HAlCl_4):

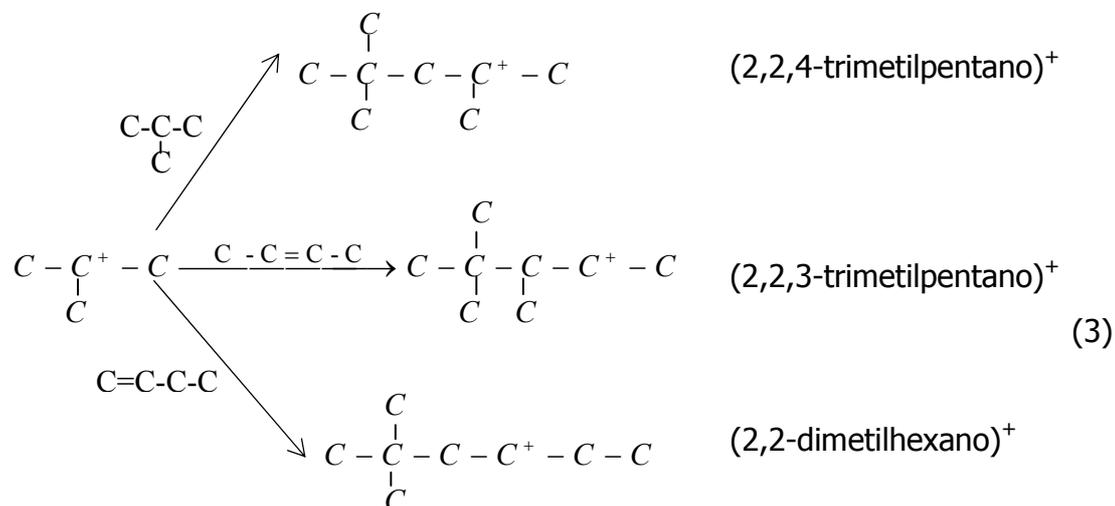
1. La primera etapa es la protonación de la olefina para formar el catión terbutilo:



Cuando se utilizan como olefinas 1-buteno ó 2-buteno, el catión sec-butilo puede isomerizarse vía salto de metilo o por transferencia de hidruro de una molécula de isobutano:

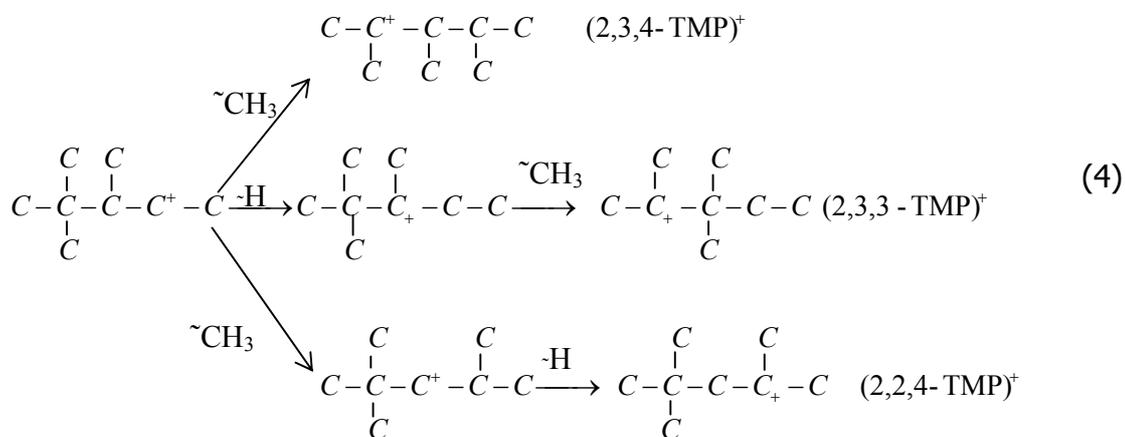


2. El catión terbutilo reacciona con la olefina y se forma un carbocatión C₈⁺:

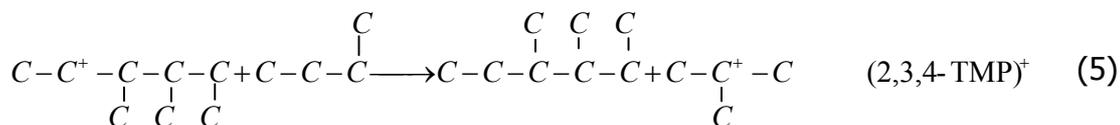


Estos carbocationes C₈⁺ pueden desorberse como las isoparafinas correspondientes por transferencia de hidruro de una molécula de isobutano.

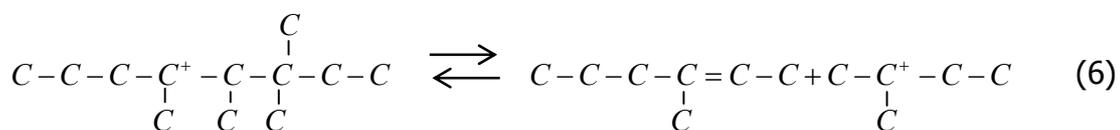
3. Los iones carbonio C_8^+ formados, pueden isomerizarse formando iones carbonio más estables:



4. Estos iones carbonio sufren rápidas transferencias de hidruro del isobutano originando los diferentes isómeros del octano y regeneran el catión terbutilo para perpetuar la secuencia de la cadena. Por ejemplo:



Los iones carbonio pueden emplearse para dar paso a una olefina y otro ión carbonio de menor peso molecular



Las reacciones N° 1 y 2 representan reacciones de iniciación y requieren de cierto tiempo de inducción para generar un nivel efectivo de iones. En estado estacionario estas reacciones son insignificantes con respecto a las otras. Para el isobuteno el ión carbonio terciario se forma directamente mediante la

reacción N° 1. Para otras olefinas los iones carbonio formados, pueden a su vez formar iones terbutilo a través de reacciones de isomerización o de transferencia de iones hídricos con isobutano. Así, las reacciones de iniciación con olefinas lineales son más lentas que aquellas con olefinas ramificadas.

La formación del producto principal procede mediante la reacción de adición de la olefina y el ión carbonio terbutilo, dada por la reacción N° 3. Este ión carbonio puede isomerizarse en una forma más estable mediante el intercambio de grupos metilo e iones hídricos, mostrado en la reacción N° 4. La saturación del ión carbonio terciario final mediante transferencia de iones del isobutano se muestra en la reacción N° 5. Las isoparafinas principales alquiladas son entonces formadas y la secuencia de la reacción es perpetuada mediante la formación de otro ión carbonio terbutilo.

La reacción de craqueo N° 6 se presenta separadamente de la reacción N° 3 en la cual la isomerización puede ocurrir antes del craqueo y resulta en una olefina diferente y un ión carbonio diferente a los de la reacción N° 9. Transferencias de hidruros intramoleculares y de radicales metilos ocurren normalmente si se transfieren carbonos adyacentes hacia el carbono que contiene la carga positiva. Sin embargo, una transferencia de un metilo del 2^{do} al 4^{to} carbono podría explicar la observación de 2,3,4-TMP (trimetilpentano) como el producto principal de la alquilación con 2-buteno.

Ya que únicamente los iones terciarios abstraen fácilmente iones hidruros del isobutano, 2,4-DMP (dimetilpentano) y 2,3-dimetilpentano son los alquilatos primarios del propileno. Bajo condiciones que minimicen la isomerización, el ión carbonio de la adición de isobuteno es saturado directamente a 2,2,4-TMP. Sin embargo, con adición de 2-butileno, el ión carbonio debe primero pasar por transferencia de hidruros o metilos para formar un ión terciario.

sección de reacción de la Unidad de Alquilación de la Refinería El Palito realizado por INTEVEP. El modelo del reactor de alquilación incluye parámetros cinéticos para trece reacciones y un parámetro hidrodinámico (diámetro de gota en la emulsión hidrocarburo-ácido). Estos parámetros son determinados a través de un procedimiento de optimización empleando calidades de alquilato obtenidas de la operación de la planta. El modelo fue validado para un caso de alquilación de propileno, butilenos y amilenos bajo las condiciones empleadas en planta en Mayo del 2000.

Las reacciones descritas anteriormente (ecuaciones N° 1 a 7) son una representación muy simplificada de las complicadas reacciones químicas que ocurren en un reactor comercial de alquilación donde la corriente de olefinas alimentada es un corte de hidrocarburo. Sin embargo, está bien documentado que para la alquilación en fase líquida de isobutano con olefinas C₃-C₄ catalizada por un ácido, más del 91 % en peso del alquilato producido está compuesto de isoparafinas C₇-C₈ [ALBRIGHT, 2000; GODFREY, 1989]. Por consiguiente, se emplearon las ecuaciones N° 1 a 7 como una aproximación para representar la química de las reacciones que fueron modeladas por INTEVEP.

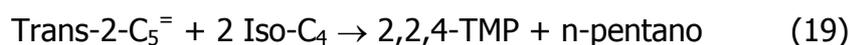
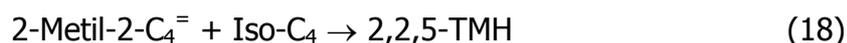
En el trabajo pionero publicado por Jernigen et al. [PACEK, 1999] y citado por Carberry [LIU, 1999] se consideró que las reacciones de alquilación de butileno con isobutano catalizadas por un ácido en fase líquida eran de primer orden respecto a cada uno de los reactantes. Usando esta aproximación, estos investigadores obtuvieron resultados consistentes entre sus predicciones y la producción de alquilato experimental para diferentes valores de velocidad espacial de olefina.

Considerando los resultados de Jernigen y el hecho que las reacciones de alquilación involucran un re-arreglo estructural de las moléculas reactantes, la relación entre las velocidades de reacción específica, $r_{j,a}$ (kmol/m²s), y volumétrica, $r_{j,v}$ (kmol/m³s), para reacciones que ocurren en la interfase fluido-

fluido, como las reacciones de alquilación, viene dada por la siguiente relación [MCGRATH, 2000]:

$$a/V_e = r_{j,v}/r_{j,a} \quad (8)$$

Además de las reacciones de alquilación de propileno, iso-buteno y 2-buteno; se puede tener alquilación de otros butilenos y de amilenos para dar origen a alquilatos más pesados como iso-parafinas C₁₀ y C₁₁. Estas reacciones adicionales al incluirse dentro del esquema de reacciones proporcionan la siguiente red de reacciones:



Las ecuaciones N^o 9 a 21 son las consideradas en el desarrollo descrito por INTEVEP para el modelaje de la cinética de las reacciones. Como las reacciones de alquilación ocurren en o cerca de la interfase ácido-hidrocarburo de la emulsión formada entre ambas fases, las velocidades volumétricas de reacción son proporcionales al área interfacial por unidad de volumen de emulsión (a/V_e), por lo que las velocidades de reacción pueden ser expresadas como:

$$r_{j,v} = (a/V_e)k_j C_A C_B \quad (22)$$

para la reacción j y donde C_A y C_B son las concentraciones de los reactantes en la fase hidrocarburo. Las velocidades de reacción $r_{j,v}$ tienen unidades de flujo por unidad de volumen de fase hidrocarburo (HC), es decir, $\text{kmol}/(\text{s m}^3_{\text{HC}})$, y las concentraciones de los reactantes tiene unidades de $\text{kmol}/\text{m}^3_{\text{HC}}$.

Cuando en un reactor de alquilación se tiene más de 50 % en volumen de ácido en la dispersión, el ácido es probablemente la fase continua y el hidrocarburo la fase dispersa [CARBERRY, 1976]. Los reactores comerciales típicamente operan en el rango de 50-65 % en volumen de ácido [ALBRIGHY, 2000] por lo que muy probablemente las condiciones de operación comúnmente encontradas en la práctica sean de emulsiones donde el ácido constituya la fase continua y el hidrocarburo la fase dispersa.

Se puede mostrar fácilmente que cuando se considera que las gotas de la fase dispersa son esféricas en la emulsión formada en el reactor, el área interfacial entre las fases hidrocarburo-ácido por unidad de volumen de fase dispersa (a/V_{disp}) es igual a $6/d_d$, donde d_d es el diámetro promedio de gota formada en la dispersión. Desafortunadamente se ha publicado muy poco acerca de metodologías para estimar tamaños promedio de gotas en emulsiones formadas por inyección a través de boquillas como es el caso de los reactores de la unidad de alquilación de la Refinería el Palito. Por esta razón en el estudio realizado en INTEVEP se tomó el diámetro promedio de gota de la fase dispersa como el parámetro hidrodinámico.

a) Metodología para el Modelaje de la Sección de Reacción

Debido a la considerable incertidumbre tanto en los parámetros cinéticos como hidrodinámicos que son cruciales para el modelaje riguroso de un reactor de alquilación donde se tiene una catálisis ácida líquido-líquido, se optimizaron

los parámetros para proseguir con el modelaje de toda la unidad. Para ello se empleó de manera resumida la siguiente metodología:

✓ El primer paso consistió en desarrollar el modelo del reactor en el marco del simulador de procesos Aspen Plus™, que tiene la capacidad de modelar sistemas reactivos multifásicos. Para el modelaje de los reactores de alquilación de la Refinería el Palito se representó el sistema como dos trenes de reacción. Cada reactor de la planta posee ocho boquillas laterales por donde se alimenta la corriente de hidrocarburos (olefinas más isobutano). Por ello se representó cada reactor empleando ocho reactores mezcla completa (cada uno con un volumen igual a 1/8 del volumen total) conectados en serie donde cada reactor es alimentado por la corriente de hidrocarburos y el ácido fluorídrico es alimentado por el fondo.

✓ Al modelo de reactor descrito anteriormente se le acopló una subrutina desarrollada en Fortran para poder describir la cinética de las reacciones de alquilación N° 9 a 21 empleando expresiones como la ecuación N° 22 para calcular la velocidad de reacción. Debido a la siguiente relación entre área interfacial por unidad de volumen de fase dispersa (V_{disp}) y por unidad de volumen de fase dispersa más fase continua (volumen total de emulsión, V_e).

$$a/V_e = \frac{6\varepsilon}{d_d} ; a/V_{disp} = \frac{6}{d_d} \quad (23)$$

✓ Como se desconocen los parámetros cinéticos e hidrodinámicos que caracterizan a este sistema reactivo se acoplaron el modelo de reactor y la subrutina cinética a un optimizador con la finalidad de determinar las trece constantes cinéticas de las reacciones N° 9 a 21 más el diámetro de gota promedio en la dispersión ácido-hidrocarburo, tal que estos parámetros cinéticos e hidrodinámico minimizen la diferencia entre las variables calculadas y determinadas en la operación real de planta. En este proceso de optimización de

parámetros se definió una función objetivo que el optimizador minimizaría. Esta función objetivo es como sigue:

$$F_{obj} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{NV} \left(\frac{Y_{calc,i} - Y_{planta,i}}{Y_{planta,i}} \right)^2}}{NV} \quad (24)$$

Donde:

NV: es el número de variables que se esperaría que el modelo pudiera predecir con la menor desviación posible.

Y_{cal} : es la variable calculada.

Y_{planta} : es la variable medida en planta.

Se puede notar que la función objetivo es una medida de la desviación relativa promedio entre los resultados del modelo y resultados de planta.

b) Resultados obtenidos en INTEVEP

En la tabla N° 1 se muestran los valores de las constantes cinéticas k_j que determinan las velocidades de formación de las diferentes iso-parafinas según la ecuación N° 22. Además se indica el diámetro de gota de la emulsión hidrocarburo-ácido obtenido mediante la ecuación N° 24.

Estos resultados indican que el modelo desarrollado describe apropiadamente el mecanismo químico de catálisis ácida líquido-líquido que ocurre en el reactor de alquilación empleando HF como catalizador, por lo que dichos resultados se emplearán para la simulación de los reactores que se realizará en este Trabajo Especial de Grado.

Tabla N° 1: Constantes cinéticas de las reacciones de alquilación y diámetro de gota de la emulsión de la función objetivo. [PACHECO, 2001]

Número de reacción según ecuaciones N° 9 a 21	k_j [$m^4/(kmol s) E+6$]
9	6,62
10	3,44
11	5,62
12	0,80
13	3,53
14	6,04
15	7,31
16	0,64
17	0,89
18	2,62
19	3,21
20	5,30
21	4,73
Diámetro promedio de gota de fase dispersa (μm)	85,3

Adicionalmente, se utilizarán los resultados obtenidos en INTEVEP en cuanto a la variación volumétrica de hidrocarburo en la emulsión hidrocarburo-ácido representada en la figura N° 1 para los cálculos tipos.

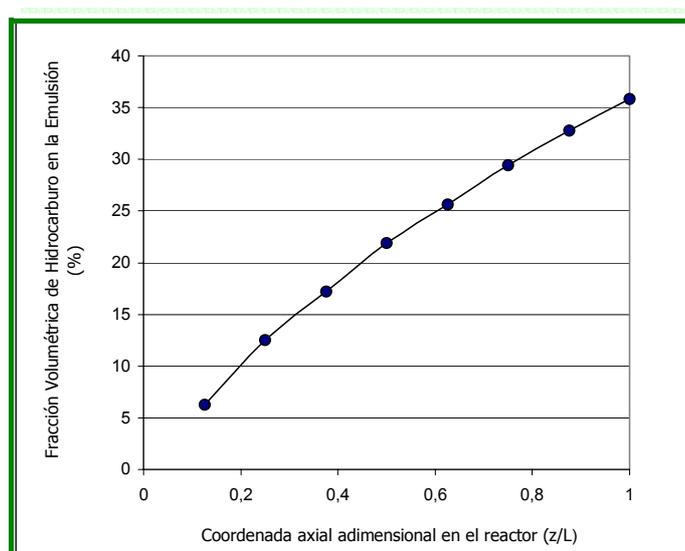


Figura N° 1: Variación de la fracción volumétrica de HC con la coordenada axial en el reactor [PACHECO, 2001]

A continuación se presenta una descripción detallada del proceso de alquilación perteneciente a la Refinería El Palito.

II.1.2. UNIDAD DE ALQUILACIÓN DE LA REFINERÍA EL PALITO

La Refinería el Palito perteneciente a Petróleos de Venezuela, S.A. (PDVSA) se encuentra ubicada en la Región Central del país en la zona denominada Punta Chávez a 10 Km de Puerto Cabello, Estado Carabobo, próxima a los centros industriales del país. Su capacidad de procesamiento se encuentra por el orden de los 130 MBDO de crudo, con una amplia gama de productos entre los cuales se encuentran gas licuado de petróleo, gasolina, destilados, residuales, solventes, aromáticos, etc.

La Refinería el Palito cuenta con una Unidad de Alquilación diseñada para procesar una carga máxima de 20,4 MBD de olefinas provenientes del Craqueo Catalítico Fluidizado y 11,3 MBD de isobutano proveniente de otras áreas del país como son la Planta de ULE Cabimas-Edo. Zulia y el Complejo Criogénico de Oriente-Planta Jose, a fin de producir 21,6 MBD de alquilato y separar 2,8 MBD de n-butano y 2,9 MBD de propano los cuales vienen asociados a la carga de olefina e isobutano

La unidad tiene como función producir una mezcla de hidrocarburos de alquilato. Éste es producido a través de un proceso de alquilación de olefinas (C₃, C₄ y C₅), en contacto con isobutano en un medio ácido provisto con ácido fluorhídrico (HF). Estas olefinas alimentadas a la unidad provienen de las unidades de FCC (propano/propileno) y oxigenados (refinado C₄ y gasolina C₅).

El proceso de alquilación se basa en las reacciones de alquilación de isoparafinas con alquenos, son del tipo exotérmicas y se llevan a cabo en intercambiadores de calor de tubo y carcaza, con agua de enfriamiento para

controlar la temperatura de la reacción. En la Unidad de Alquilación se produce propano a través de las reacciones de transferencia de hidrógeno y fluoruros orgánicos de la reacción del ión flúor con las olefinas. Estas reacciones son secundarias pero se llevan a cabo también en los reactores de la unidad. Debido al uso de un ácido como catalizador, los productos alquilato, propano y n-butano son neutralizados con potasa cáustica (KOH) antes de enviar éstos hacia almacenaje, evitando la presencia de trazas de ácido en los mismos.

La Unidad consta de tres secciones: reacción, fraccionamiento y neutralización. En la sección de reacción, las olefinas entran en contacto con el isobutano y el ácido, para formar el alquilato. En la sección de fraccionamiento, los hidrocarburos provenientes de los asentadores son separados en las diferentes corrientes: propano, isobutano de reciclo, n-butano y alquilato; y en la sección de neutralización, el polímero formado con el azufre y las diolefinas y el azeótropo HF-agua, son eliminados de la fase ácido (HF circulante) y neutralizados para su posterior disposición.

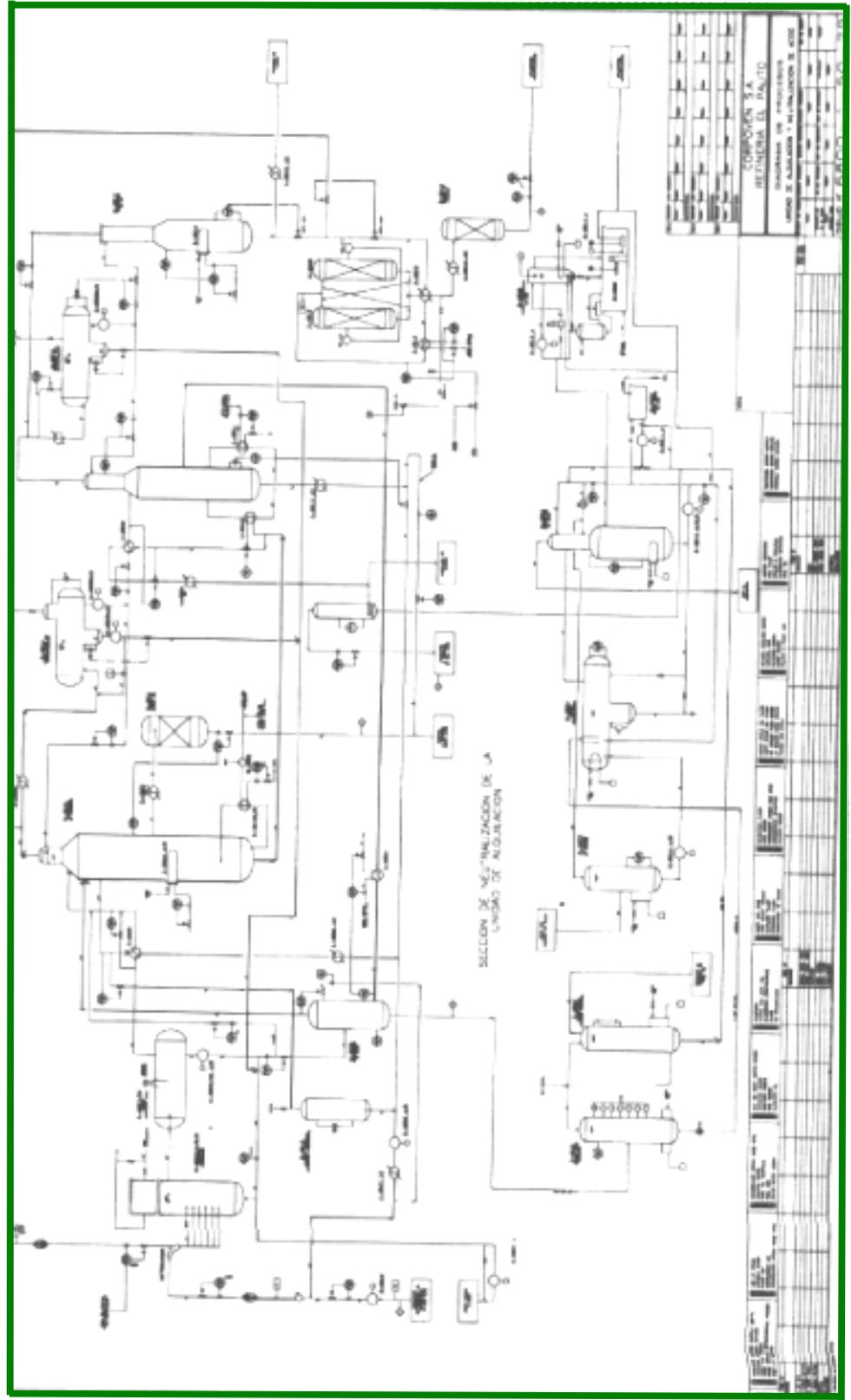
II.1.3. DESCRIPCIÓN DETALLADA DEL PROCESO

En esta sección se describen todos los equipos de operación que conforman la unidad de alquilación de la Refinería el Palito. Para tener un amplio conocimiento del proceso se recomienda revisar la figura N° 2 en donde se muestra el diagrama de flujo correspondiente. [REF, 2001]

II.1.3.1. Descripción de los equipos contenidos en las secciones de reacción y fraccionamiento

A continuación se describen las corrientes y equipos operacionales más importantes del proceso de alquilación considerando dos de las tres secciones que lo conforman.

Figura N° 2: Diagrama de flujo de la Refinería El Palito



✓ **Alimentación:** el propileno, los butilenos y los amilenos se alimentan a la Unidad como un producto de fondo de la columna de secado (D-6217) de FCC y el refinado C₄ y gasolina C₅ desde la Unidad de Remoción de Oxigenados (URO). Las olefinas se envían directamente a los reactores de alquilación a través de un tambor compensador de carga (D-6832), y se mezclan con una corriente de isobutano de reposición y reciclo. Estos hidrocarburos son enviados a los reactores a través de las bombas G-6818 A/B. El HF es despachado en recipientes cilíndricos o cisternas denominados isotanques con una capacidad de 18 TM, distribuidos por la Empresa Nitro Química de Brasil.

El HF fresco de los isotanques es trasladado a la Unidad utilizando unas mangueras especiales conectadas desde las cisternas hasta la estación de carga ubicada en la Unidad. Para desplazar el HF contenido en las cisternas se utiliza nitrógeno como medio impulsor, enviando así el HF hacia los tanques de almacenamiento D-6801 A/B.

✓ **Reactores de Alquilación (D-6803/04/05/06):** la alimentación de olefinas se mezcla con la corriente de recirculación de isobutano que proviene del despojador de isobutano (D-6810) y con el producto de fondo del depropanizador (D-6815) y la reposición de isobutano fresco que proviene del almacenamiento (Tanque 160x1). Todos estos hidrocarburos son enviados a los reactores de la Unidad de Alquilación, donde una corriente de recirculación de HF entra por el fondo de los reactores, la cual retorna de los asentadores de ácido (D-6807/08) y de las botas de los tambores acumuladores de tope del despojador de isobutano (D-6814) y del depropanizador (D-6816).

Los reactores son recipientes verticales colocados en paralelo para distribuir la carga total de olefinas en flujos equivalentes por cada reactor, y consisten en unos intercambiadores de tubo y carcasa, fluyendo agua de enfriamiento por los tubos y los hidrocarburos y el HF por el lado carcasa.

Estos reactores permiten el contacto entre las olefinas y el isobutano en presencia de HF, para formar alquilato. Debido a que es una reacción exotérmica se requiere retirar el calor generado por la reacción y mantener la temperatura de los reactores por debajo de los 105 °F. Los reactores poseen las siguientes dimensiones: 28 pies de longitud, 60 pulgadas de diámetro y 134 tubos en U. Además, poseen ocho boquillas laterales por donde se distribuyen el isobutano y las olefinas a lo largo del reactor. El ácido fluorhídrico entra al reactor por una boquilla ubicada en el fondo del recipiente.

✓ **Asentadores de Ácido (D-6807/08):** los asentadores de HF son dos recipientes cilíndricos horizontales donde se reciben los hidrocarburos y el HF provenientes de los reactores, con la finalidad de separar la fase inorgánica (HF) de la orgánica (hidrocarburos). En el fondo del asentador de HF se recolecta el ácido el cual precipita por gravedad, y luego se envía nuevamente hacia los reactores mediante control de flujo, mientras que por el tope de los asentadores salen los hidrocarburos (propano, isobutano, n-butano, isopentano y alquilato) hacia el despojador de isobutano para su posterior fraccionamiento. El asentador D-6807 recibe los hidrocarburos y el HF provenientes de los reactores D-6803 y D-6804, mientras que el asentador D-6808 recibe los hidrocarburos de los reactores D-6805 y D-6806. Estos asentadores tienen las siguientes dimensiones: 32 pies de longitud y 12 ½ pies de diámetro. El nivel de la interfase de estos asentadores se determina a través de unos instrumentos de medición de nivel que utilizan fuentes de radiaciones ionizantes.

✓ **Despojador de Isobutano (D-6810):** es la columna principal de la Unidad, compuesta por setenta (70) platos perforados, con una longitud de 216 ½ pies y dos secciones de 11 y 19 pies de diámetro. En esta columna se fraccionan los hidrocarburos provenientes de los asentadores. Por el tope de esta torre se obtiene una mezcla de isobutano con propano, el plato sesenta (60) de la torre corresponde una corriente de isobutano, en el plato veintidós

(22) se extrae el butano con el isopentano, y por el fondo de la torre se obtiene el alquilato. En esta torre se utilizan dos pares de rehervidores: los superiores (E-6802 A/B) utilizan vapor de 50 psig y los inferiores, tipo termosifón, utilizan vapor de alta presión de 600 psig. En esta torre se recibe la mezcla de hidrocarburos provenientes de los asentadores de HF para su posterior fraccionamiento. Esta mezcla es primero precalentada en los intercambiadores E-6805 A/B/C/D, donde el corte lateral de isobutano de reciclo del D-6810 se utiliza como medio de calentamiento de la carga.

Una vez precalentada la carga se alimenta al despojador, obteniéndose como producto de tope una mezcla de propano e isobutano. Además, existen dos cortes laterales en la torre; el primero de ellos es isobutano que es enviado a los precalentadores de carga y luego enfriado en los intercambiadores E-6806 A/B/C/D y bombeado a través de las bombas G-6806 A/B hacia los reactores como isobutano de reciclo. El segundo de los cortes laterales del D-6810 es el n-butano, el cual es condensado y enfriado en los intercambiadores E-6803 A/B y tratado con KOH para neutralizar cualquier traza de HF presente en esta corriente, antes de su envío hacia almacenaje.

El producto de fondo del despojador de isobutano es el alquilato, el cual es utilizado como medio de transferencia de calor en el rehervidor del depropanizador (E-6810), el precalentador de carga (E-6809) y luego es enfriado en el intercambiador E-6804 A/B, para enviarlo al tratador con KOH y neutralizar las trazas de HF que pueda contener para poder enviarlo hacia almacenaje.

✓ **Acumulador de tope del Despojador de Isobutano (D-6814):** es un tambor acumulador de la corriente de tope del despojador de isobutano. Los vapores de tope del despojador de isobutano son enviados a los condensadores (E-6808 A-H) y el líquido obtenido se acumula en el tambor (D-6814), de aquí se succiona con las bombas G-6808 A/B y se envían una parte como refluj

hacia la debutanizadora (D-6810) y la otra como alimentación al depropanizador (D-6815). En la bota de este tambor se recupera parte del HF arrastrado con los hidrocarburos, el cual es enviado hacia los asentadores a través de las bombas G-6807 A/B. El tambor posee las siguientes dimensiones: 42 pies de longitud y 14 pies de diámetro. La bota tiene una altura de 12 pies y un diámetro de 3 ½ pies.

✓ **Depropanizador (D-6815)**: esta torre tiene como finalidad separar el propano del isobutano provenientes del tope del despojador de isobutano, una vez condensados y acumulados en el tambor (D-6814). Uno de los rehervidores de esta torre utiliza normalmente como medio de calentamiento una corriente de nafta pesada proveniente de la Unidad de FCC, pudiendo utilizar alternativamente vapor de 200 psig. El otro rehervidor utiliza alquilato del fondo del despojador de isobutano. El producto de fondo es isobutano que se recircula hacia los reactores y una pequeña parte de esta corriente se utiliza para el sistema de lavado. El tope del depropanizador es rico en propano y es enviado hacia el despojador de HF. Una corriente lateral de vapor se deriva del fondo del depropanizador, para despojar el HF en el regenerador de ácido. La torre está compuesta por treinta y seis (36) platos perforados, tiene una longitud de 73 ½ pies y dos secciones de 8 ½ pies de diámetro.

✓ **Acumulador de tope del Depropanizador (D-6816)**: Este recipiente recibe el producto de tope de la depropanizadora y la salida consta de dos corrientes; una corriente se divide en dos partes, la primera es enviada como alimentación al despojador de HF utilizando las bombas G-6809 A/B y otra como reflujo a la depropanizadora; y la otra corriente de la bota sirve para recolectar el HF arrastrado con los hidrocarburos, para luego enviarlo hacia la sección de reacción. Es un tambor horizontal que tiene las siguientes dimensiones: 32 pies de longitud y 12 pies de diámetro. Además, cuenta con una bota de 9 pies de altura y 16 pies de diámetro.

- ✓ **Despojador de HF y Tratadores de Propano (D-6817)**: el despojador de ácido fluorhídrico se utiliza para remover el HF del propano. La corriente de tope del despojador contiene HF que es enviado a la corriente de tope de la torre depropanizadora (D-6815) y de allí a los condensadores E-6813 A-D. La corriente de fondo que contiene propano libre de HF es enviada hacia los tratadores de alúmina, los cuales están diseñados para remover los fluoruros combinados presentes en el producto del fondo. Posterior a la remoción de fluoruros, el propano es enviado al tratador con KOH para remover cualquier traza de HF que exista en el propano hacia almacenaje. Éste es una torre de veinte (20) platos perforados, que posee una longitud de 41 pies y dos secciones con diámetros de 4 y 6 pies.

- ✓ **Regenerador de Ácido Fluorhídrico (D-6809)**: una corriente de HF de los asentadores se envía hacia el regenerador de ácido, con la finalidad de reducir el contenido de agua en el HF del sistema; a su vez este proceso permite la eliminación del polímero formado en el reactor. Parte del isobutano de reciclaje es utilizado como reflujo al regenerador, mientras que el aceite pesado de ciclo (APC) de la Unidad de FCC se usa para sobrecalentar los vapores de isobutano retirados lateralmente del fondo del depropanizador, los cuales se utilizarán como vapor de despojamiento en el regenerador de ácido. Los vapores del tope del regenerador retornan al despojador de isobutano, con HF purificado e isobutano, mientras que por el fondo del regenerador se drenan el polímero y el CBM (azeótropo formado entre el HF y el agua), los cuales son tratados en la sección de neutralización de efluentes ácidos. Es una torre compuesta por ocho (8) platos (cuatro perforados y cuatro de válvulas), con una longitud de 27 ½ pies y un diámetro de 5 ½ pies. El regenerador de HF no opera en forma continua, sólo se coloca en servicio cuando el contenido de agua en el HF de la unidad sobrepasa el 1% en peso, así como también cuando la cantidad de polímero presente en el HF no puede ser retirada utilizando la regeneración interna.

II.1.3.2. Descripción de los equipos en la sección de neutralización

A continuación se describen las dimensiones y funciones básicas de los diferentes equipos que se encuentran involucrados en la Unidad de Alquiler de la Refinería El Palito, específicamente en la sección de neutralización:

- ✓ **Tambores de HF fresco (D-6801 A/B)**: son dos recipientes con capacidades de 200 y 400 toneladas de HF. Se utilizan para almacenar ácido fluorhídrico fresco de planta cuando es retirado del sistema durante una parada de planta. Sus dimensiones son: 31 pies de altura y 17 pies de diámetro para el D-6801 A y 62 pies de altura y 17 pies de diámetro para el D-6801 B.

- ✓ **Lavador de Gases de Alivio (D-6824)**: es un recipiente de gases que tiene una longitud de 58 pies y dos secciones con diámetros de 8 y 16 pies. Posee siete (7) platos de copas de burbujeo. La función de este lavador es neutralizar los gases ácidos venteados en la Unidad de Alquiler antes de enviarlos al sistema de mechurrio de la refinería. Los gases ácidos recolectados en el cabezal de alivio que son alimentados al D-6824 se colocan en contacto con una solución de hidróxido de potasio que es alimentada en el tope del D-6824. Además una pequeña corriente de KOH se inyecta en la alimentación al lavador de gases de alivio conjuntamente con los gases ácidos.

Los gases entran en contacto con el KOH en los siete platos y salen por el tope ya neutralizados hacia el cabezal del sistema de mechurrio. La solución del D-6824 se prepara utilizando KOH en escamas, se mantiene un nivel de 40% y una concentración entre 18 y 5% en peso (por debajo de 5% debe reemplazarse la solución).

- ✓ **Tambor Regenerador de KOH (D-6826)**: el KOH gastado de lavador de gases de alivio (D-6824) es enviado hacia este tambor, con el fin de regenerar el KOH, el cual presenta un alto contenido de fluoruro de potasio

(KF). Para efectuar la regeneración se utiliza cal y se produce una solución de KOH y un precipitado de fluoruro de calcio, el cual se desecha hacia la tanquilla de neutralización (D-6829).

✓ **Tanquilla de Neutralización (D-6829)**: es utilizada para la neutralización del agua ácida proveniente de los drenajes ácidos y del material CBM del regenerador de ácido. Esta tanquilla posee dos cámaras separadas de igual capacidad (400 barriles c/u). Mientras una cámara está recibiendo los efluentes, en la otra los efluentes almacenados se mezclan mediante el uso de agitadores mientras se le adiciona cal o cloruro de calcio, el cual es utilizado para precipitar los fluoruros presentes en el efluente. Si el contenido de éstos fluoruros en el efluente es menor a 50 ppm se envían a la Planta de Tratamiento de Efluentes.

✓ **Tambor Neutralizador de n-Butano (D-6811)**: tiene una longitud de 16 pies y un diámetro de 5 pies, y tiene por finalidad neutralizar las trazas de HF presentes en la corriente de n-butano antes de enviarlo hacia la esfera de almacenaje (D-301). Se utiliza un lecho de hidróxido de potasio sólido en forma de nueces, el cual reacciona con el ácido formando agua y la sal de fluoruro de potasio.

✓ **Tambor Neutralizador de Alquilato (D-6812)**: presenta una longitud de 20 pies y un diámetro de 13 pies, y tiene por finalidad neutralizar las trazas de HF que se encuentran en la corriente de alquilato antes de enviarlo hacia el tanque de almacenaje. Se utiliza un lecho de hidróxido de potasio al 10 – 12% en peso de concentración, a través del cual el alquilato burbujea, y las trazas de HF contenidas en éste reaccionan formando agua y la sal de fluoruro de potasio.

✓ **Tambor Recibidor de Isobutano (D-6813)**: es un tambor vertical que posee las siguientes dimensiones: 47 pies de altura y 15 pies de diámetro interno. El propósito del tambor es recibir el isobutano en exceso que se

encuentra en la Unidad, así como compensar pequeñas variaciones en el consumo del insumo. Adicionalmente, recibe el desvío de vapores calientes del despojador de isobutano, que se utiliza como control de presión de la mencionada torre.

✓ **Tambores Neutralizadores de Propano (D-6818/6818 A):** el objetivo de estos tambores es eliminar las trazas de HF presentes en el propano que es enviado a las esferas de LPG y a los tamices moleculares de URO. Para neutralizar el HF se utiliza el lecho de hidróxido de potasio en forma sólida. Estos tambores poseen las siguientes dimensiones: 16 pies de longitud y 5 pies de diámetro.

✓ **Tratadores de Alúmina (D-6819/6820):** los tratadores tienen las siguientes dimensiones: 20 pies de longitud y 5 ½ pies de diámetro. Poseen un lecho de alúmina activada de 16 ½ pies de longitud, donde se llevan a cabo las reacciones de defluorinación, es decir, el proceso de remoción de fluoruros del propano que es enviado a través de estos recipientes desde el fondo del despojador de HF. La temperatura de operación para llevar a cabo la reacción es de aproximadamente 450 °F. Los tratadores operan en serie, es decir, uno de líder y el siguiente de respaldo, indistintamente. La alúmina contenida en estos recipientes debe cambiarse al alcanzar una saturación del 45%.

✓ **Tambor Acumulador de Polímero (D-6821):** el tambor acumulador de polímero tiene una longitud de 25 pies y un diámetro de 10 pies. Este tambor está recubierto internamente con una capa de monel, para mayor resistencia a la corrosión. En él se recolecta el producto de fondo del regenerador de HF, y su función primordial es almacenar el CBM y el polímero separado del HF y asentarlos para su posterior separación permitiendo un tiempo de residencia de un día.

- ✓ **Tambor Neutralizador de Polímero (D-6822)**: este tambor posee una longitud de 25 pies y un diámetro de 10 pies. Su función es neutralizar el polímero proveniente del tambor D-6821, utilizando una solución de hidróxido de potasio, la cual ocupa un 70 % del recipiente. El polímero se alimenta por el fondo y es burbujeado a través del KOH, saliendo por el tope del recipiente hacia el sistema de residual de vacío (Fuel Oil). Asimismo, dispone de un serpentín externo de vapor para mantener el polímero en forma fluidizada.

- ✓ **Tambor Compensador de Carga (D-6832)**: este tambor permite compensar las variaciones en el flujo de alimentación a la Unidad de Alquilación, variando su nivel y manteniendo la carga a los reactores en forma estable. Asimismo permite disponer de inventario de 900 barriles, el cual resulta suficiente para alimentar a la Unidad por una hora a 20000 BPD, en caso de corte de carga a la misma. El tambor tiene una línea de recirculación para proteger a la bomba de carga de flujo mínimo y a la vez permite homogeneizar la carga a los reactores y diluir cualquier contaminante momentáneo que sea alimentado hacia la Unidad. El recipiente posee una longitud de 51 pies y un diámetro de 11 pies.

II.1.4. VARIABLES DEL PROCESO

Dentro de los parámetros de operación de la Unidad de Alquilación se deben mencionar las siguientes variables del proceso:

II.1.4.1. Relación Isobutano/Olefinas (I/O)

Esta relación se refiere a la relación molar entre el flujo de isobutano total a las olefinas reactivas contenidas en la carga. El valor mínimo de la relación para una carga en la unidad es de 8:1. Normalmente en la unidad se trabaja con valores altos de la relación, que van desde 10:1 hasta 14:1, para garantizar que todas las olefinas de la corriente de alimentación reaccionen, y se ajusta de

acuerdo al flujo de carga, es decir a mayor carga menor relación, debido a limitaciones hidráulicas.

Los efectos de esta relación I/O se muestran en la figura N° 3, donde se observa que a medida que se incrementa la misma, mejora el octanaje del alquilato, disminuye la formación de polímero y fluoruros así como el punto final de ebullición del alquilato. Una buena relación de I/O viene dada directamente por la concentración de isobutano en la corriente de isobutano de reciclo, la cual se obtiene manteniendo condiciones estables en el despojador de isobutano (D-6810). Es importante mencionar que se requiere siempre un exceso de isobutano para que las reacciones de alquilación se lleven a cabo, debido a que éste es el reactivo limitante.

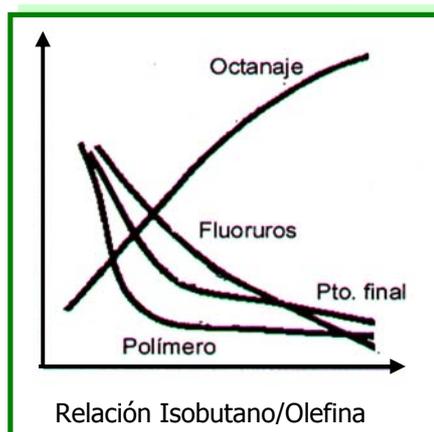


Figura N° 3: Efectos de la relación I/O sobre la calidad del Alquilato. [UOP, 1998]

La relación molar I/O se puede calcular según la siguiente ecuación:

$$iC_4/\text{olefinas} = \frac{A + B + C}{D + E + F} \quad (25)$$

Donde:

A: moles de iC_4 presentes en la alimentación de olefinas, B D

B: moles de iC_4 presentes en la alimentación de isobutano de reposición, BD

C: moles de iC_4 presentes en el isobutano de reciclo, BD

D: moles de propilenos presentes en la alimentación de olefinas, BD

E: moles de butilenos presentes en la alimentación de olefinas, BD

F: moles de amilenos presentes en la alimentación de olefinas, BD

II.1.4.2. Relación Ácido/Hidrocarburo (HF/HC)

Al igual que la relación I/O, la de ácido a hidrocarburo se refiere al flujo total de ácido que circula con relación al flujo total de hidrocarburos al reactor, es decir, el flujo de HF dividido por el de isobutano más las olefinas totales.

Esta relación se mantiene entre 1:1 y 2:1 en volumen; por debajo de 1:1 disminuye la calidad del alquilato, bajando el octanaje e incrementándose el contenido de fluoruros combinados, polímeros y el punto final del alquilato. A relaciones por encima de 2:1, no se obtienen beneficios apreciables en la calidad de los productos, por lo que generalmente la relación 2:1 es considerada como el valor máximo de operación.

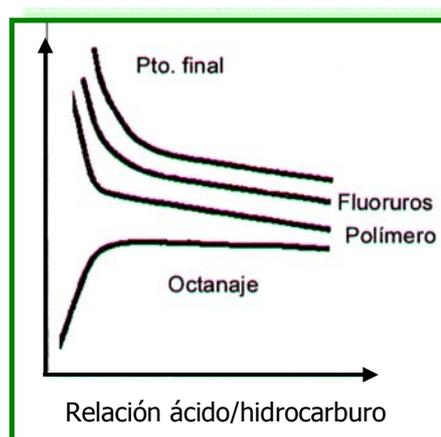


Figura N° 4: Efectos de la relación HF/HC sobre la calidad del alquilato.

[UOP, 1998]

La relación volumétrica ácido/hidrocarburo se puede calcular según la siguiente ecuación: [UOP, 1998].

$$\text{HF/HC} = \frac{\text{Flujo volumétrico de ácido circulante}}{\text{Flujo vol. de olefinas alim.} + \text{Flujo vol. de } i\text{C}_4 \text{ corriente de reciclo}}$$

El efecto de la relación HF/HC se muestra en la figura N° 4, donde se observa que a medida que la relación aumenta disminuye la formación de fluoruros, polímeros y el punto final de ebullición del alquilato, y aumenta el octanaje del alquilato a valores bajos para luego estabilizarse.

II.1.4.3. Concentración de HF

La concentración de ácido circulante es resultado de una serie de factores tales como la eficiencia de los secadores de la alimentación, presencia de diolefinas y compuestos de azufre en la alimentación, condiciones de la sección de reacción, velocidad, frecuencia y eficiencia de la regeneración del ácido, entre otras. El HF circulante en la unidad debe mantenerse entre 88 y 92% en peso de pureza, para garantizar la producción del alquilato. Por debajo de 87% en peso de pureza se corre el riesgo de formar una emulsión con los hidrocarburos que no puede separarse en los asentadores y por lo tanto todos los productos se contaminarán con HF, causando corrosión de la sección de fraccionamiento; este descontrol operacional se denomina Acid Run Hawaii. Los efectos en la formación de fluoruros y polímero así como en el octanaje del alquilato se muestran en la figura N° 5.

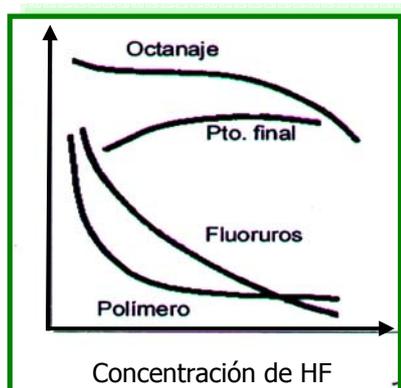


Figura N° 5: Efectos de la concentración del HF sobre la calidad del Alquilato.

II.1.4.4. Temperatura de Reacción

Debido a que las reacciones de alquilación son exotérmicas, la temperatura de los reactores debe controlarse por debajo de 105°F para mejorar la calidad del alquilato, aumentando el octanaje y disminuyendo el punto final de ebullición, reduciendo la formación de polímeros. Una temperatura extremadamente baja (<60 °F) no es recomendable ya que puede traer como consecuencia una reacción incompleta y una temperatura alta (>120 °F) promueve la formación de polímero que degrada al alquilato y el HF, tal como se observa en la figura N° 6.

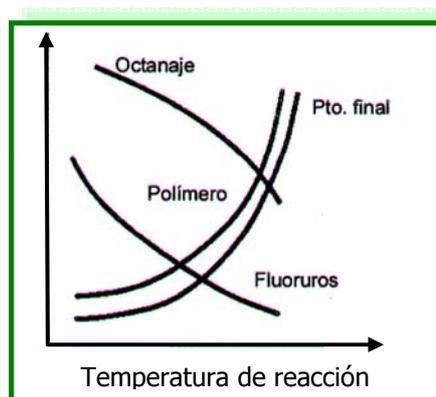


Figura N° 6: Efectos de la temperatura de reacción sobre la calidad del alquilato.

Para controlar la temperatura de los reactores se hace fluir agua de enfriamiento por los haces tubulares de los reactores para retirar el calor generado por las reacciones. Este flujo se mantiene entre 20 y 32 mil galones por minuto, y se mide como flujo total a los reactores, no existe medición por cada reactor.

II.1.5. FACTORES QUE AFECTAN LAS CALIDADES DE LOS PRODUCTOS

Existen algunos factores importantes que deben tomarse en cuenta para asegurar un buen funcionamiento de la Unidad de Alquilar, garantizando así las calidades deseadas de los productos finales. Entre estos factores se tienen:

II.1.5.1. Porcentaje de n-butano en el isobutano de reciclo

Un aumento en el contenido de n-butano en el isobutano de reciclo puede ocasionar una disminución en la pureza del isobutano de reciclo, acumulación de n-butano en la torre D-6810 y baja calidad de los productos. Esta variable es afectada por diversos factores, entre los cuales se encuentran:

- ✓ Temperatura de carga al Despojador de Isobutano: entre 140 y 160 °F.
- ✓ Temperatura de tope del Despojador de Isobutano: entre 142 y 155 psig.
- ✓ Presión de tope del Despojador de isobutano.
- ✓ Presión en el plato de extracción de isobutano.
- ✓ Contenido de n-butano en las olefinas y en el isobutano de reposición.
- ✓ Flujo de isobutano a almacén.

II.1.5.2. Pérdidas de isobutano en el n-butano a almacén

Una vez que el n-butano es extraído del despojador de isobutano, éste es condensado, tratado con KOH y enviado a almacén. Por esta razón se considera

como pérdida el isobutano que sale con el n-butano, ya que el mismo no puede ser retornado con el isobutano de reciclo a la sección de reacción. Debido a esto, es importante controlar la cantidad de isobutano que se pierde en el n-butano a almacén, la cual está influenciada por las siguientes variables:

- ✓ Flujo total de condensado.
- ✓ Temperatura del plato 31, la cual debe mantenerse entre 88 y 192 °F.

II.1.5.3. Especificaciones del Alquilato

El alquilato es el principal producto de la Unidad de Alquilación y se obtiene por el fondo del despojador de isobutano en forma líquida. Su producción se ve afectada por:

- ✓ RVP del Alquilato: una de las principales propiedades del alquilato es la presión de vapor Reid (RVP), la cual se controla entre 5 y 6 psia.
- ✓ Punto final de ebullición del alquilato: Las variables que influyen sobre la formación de polímeros, y por ende, sobre el punto final del alquilato son la temperatura de reacción, la relación isobutano/olefinas, la concentración de ácido y la relación ácido/hidrocarburo.

II.1.5.4. Fluoruros combinados en el n-butano y el propano

Una de las reacciones colaterales indeseadas que se producen en los reactores es la que da lugar a la formación de fluoruros combinados. La reacción consiste en la adición de flúor a una olefina. La reacción puede darse con una olefina C₃ o C₄. Los fluoruros combinados de C₃ ebulen en el mismo intervalo de temperatura del propano, por lo que son descargados junto con la corriente de este compuesto por el fondo del despojador de ácido, para luego entrar en los tratadores de alúmina o defluorinadores, en los cuales se revierte la reacción, ya que no es deseable que el propano contenga estos fluoruros.

Por otra parte, los fluoruros formados a partir de olefinas C_4 , son descargados junto con la corriente de n-butano, ya que se encuentran en el mismo intervalo de ebullición que los compuestos presentes en esta corriente.

II.1.5.5. Porcentaje de agua en el ácido fluorhídrico circulante

A la unidad de alquilación entran, inevitablemente, pequeñas cantidades de agua en las corrientes de olefinas y de isobutano de reposición. La función principal del regenerador de ácido es eliminar la mayor parte del agua cargada a los reactores, la cual sale por el fondo junto con la mayoría de los polímeros formados.

El agua sale como un compuesto de punto de ebullición constante o CBM (azeótropo) formado con el ácido. De esta forma, por cada libra de agua alimentada a la sección de reacción, se pierde aproximadamente una libra de ácido. Además, el CBM es una mezcla altamente corrosiva, por lo cual un incremento de agua en el sistema aumentará los requerimientos de mantenimiento, reduciendo el tiempo de operación de los equipos.

II.1.5.6. Regeneración del ácido fluorhídrico

Durante el proceso de alquilación, el ácido va reduciendo su concentración debido a una serie de contaminantes presentes en la alimentación, por lo que se requiere una regeneración constante del mismo. Un incremento en la cantidad de compuestos contaminantes en la alimentación, bajará la concentración del ácido. La concentración de ácido óptima varía en todas las unidades dependiendo del diseño, tipo de contaminantes y condiciones de operación. La regeneración del ácido se hace a través de dos sistemas, estas son regeneración interna y externa.

La regeneración interna es la que se hace al ácido en la columna principal de la Unidad de Alquilación o despojador de isobutano (D-6810) y consiste en

alimentar a la fraccionadora un flujo mínimo de ácido desde los asentadores, para entrar conjuntamente con la alimentación en el plato 64 de la columna. Con la regeneración interna se logra que el ácido recupere su concentración, ya que se eliminan los polímeros. Esta regeneración se debe realizar cuando el contenido de agua en la corriente de ácido circulante es menor de 1% en peso y la pureza del ácido está por encima de 88% en peso. Cuando ocurra un descontrol en la Unidad o cambio de coloración en el alquilato se debe parar inmediatamente la regeneración interna.

Entre tantas ventajas que se obtienen al aplicar la regeneración interna se encuentran: la regeneración del ácido es más eficiente, se elimina el desecho de polímeros, no se degrada el producto, no existe consumo de servicios, no existe consumo de químicos, los cuales se utilizan para neutralizar la corriente de fondo del regenerador y el consumo de ácido se reduce considerablemente en la Unidad, incrementando la eficiencia.

A diferencia de la regeneración interna, en la regeneración externa se recuperan más rápidamente las propiedades originales del ácido fluorhídrico, ya que además de eliminar los polímeros, también se elimina un alto contenido de agua, el cual representa el contaminante más importante de la Unidad de Alquilación.

La regeneración externa entra en servicio cuando el porcentaje en peso de agua en el ácido alcanza valores que van desde 1.0 a 2.5% o cuando la concentración del ácido está por debajo del 87%. Se lleva a cabo en el regenerador de ácido (D-6809), cuya alimentación proviene de los asentadores (D-6807/08), el producto de tope (ácido regenerado) se alimenta al debutanizador (D-6810) y los productos de fondo se alimentan al sistema de neutralización de la Unidad.

II.1.5.7. Temperatura de precalentamiento de la carga a la Depropanizadora y presión de tope de la depropanizadora

Para permitir que la carga a la depropanizadora entre semie vaporada se precalienta en los intercambiadores (E-6804 A/B) hasta una temperatura aproximada de 180 °F, utilizando alquilato del fondo del D-6810 como medio de calentamiento.

La presión debe mantenerse entre 290 y 300 psig, para lograr el fraccionamiento deseado en la depropanizadora. Cuando la presión sobrepasa los 300 psig debe abrirse el venteo del tambor de tope D-6816 para permitir la salida de productos incondensables que ocasionan el incremento de presión en la torre. Por el contrario si la presión disminuye se desvían vapores calientes del tope de la D-6815 para aumentar la presión al no condensar parte de los vapores producidos. Entre las variables que influyen en la presión de tope se tienen:

- ✓ Temperatura del plato 30: la temperatura que se controla se encuentra entre 148 y 151°F.
- ✓ Reflujo de la torre.

II.1.5.8. Flujo de gases del despojador de ácido

Los gases de tope están compuestos principalmente por ácido fluorhídrico. En este equipo se desea despojar la mayor cantidad de ácido, ya que así, se obtiene el propano con menor acidez. Entre las variables de las que depende el flujo de gases de tope tenemos:

- ✓ Flujo de carga: La relación se ajusta entre 0.31 y 0.34 MSCFH de vapor de tope/MBPD de carga.
- ✓ Temperatura de fondo del despojador debe estar por encima de 145 °F.

II.2. SIMULADORES

Existen ciertas variables críticas que afectan el proceso de alquilación tales como: temperatura de reacción, relación olefinas - isoparafinas, concentración de catalizador y relación de ácido - hidrocarburo, entre otras; las cuales influyen la calidad del alquilato como componente de alto octanaje. Para estimar las consecuencias que sobre el proceso y, en particular, sobre la producción de alquilato tiene el realizar cambios en dichas variables, es necesario el uso de simuladores, herramientas que permiten ajustar el comportamiento de diversos procesos.

La simulación de procesos químicos permite el desarrollo y optimización de plantas químicas o equipos, sin la necesidad de realizar corridas operacionales que implican elevadas inversiones y pérdida de tiempo. No todos estos simuladores tienen la misma capacidad de manejo de operaciones ni de ecuaciones termodinámicas; por ello se realizará una comparación entre dos de los más utilizados (HYSYS y PRO II) para determinar las ventajas y desventajas de los mismos, específicamente en la simulación del proceso de alquilación.

Actualmente, en el mercado se dispone de varias casas dedicadas a la elaboración de simuladores, las cuales han creado el HYSYS, ASPEN PLUS, CHEMICAL, PROII, etc. Estos simuladores requieren análisis a fin de validarlos y aplicarlos correctamente en las tareas habituales. Con el objeto de introducirse de lleno en los simuladores se realiza a continuación una breve reseña de HYSYS y PRO II.

II.2.1. HYSYS 1.5

HYSYS, desarrollado por Hyprotech C.A., es una poderosa herramienta para la simulación de procesos, en la cual se construye un modelo interactivo del proceso, se realizan automáticamente los cálculos relacionados con el

funcionamiento de cada unidad y de los paquetes de propiedades haciendo uso de los grados de libertad de cada corriente, equipo, unidad, etc. Además, permite un acceso directo e inmediato a los resultados, proporcionando una mayor y mejor comprensión del proceso simulado [GARCÍA, 1999].

Realizar la simulación en HYSYS es un proceso sencillo, en el cual se construye un modelo conceptual, determinando los equipos que se requieren en el proceso, las bases de diseño y condiciones de operación, se fijan las ecuaciones que determinarán las propiedades termodinámicas y si es necesario se hace también el modelo dinámico determinado así las estrategias de control más apropiadas. Luego que se conocen todos los parámetros que se describieron anteriormente se ejecuta un modelaje de un proceso conocido introduciendo los datos necesarios de la planta en estudio.

II.2.1.1. Modelos Termodinámicos

La selección de los modelos termodinámicos apropiados es muy importante para la solución de la simulación de un proceso. Existen diversos métodos para realizar los cálculos de las propiedades termodinámicas, para los cuales el usuario debe determinar y seleccionar el más conveniente según los requerimientos del problema. El programa está dotado de un sistema de ayuda que asesora al usuario en la elección del modelo más adecuado. Los métodos desarrollados en HYSYS se pueden clasificar en cinco (5) categorías: ecuaciones de estado, modelos de actividad, modelos Chao Seader, modelos de presión de vapor y misceláneos.

HYSYS recomienda para la simulación del proceso de alquilación utilizar como herramienta termodinámica las ecuaciones de estado y los modelos de actividad, los cuales serán descritos a continuación.

a) Ecuaciones de estado

Hysys ofrece las ecuaciones de estado **Peng - Robinson (PR)** y **Soave – Redlich - Kwong (SRK)**. Adicionalmente dispone de varios métodos los cuales son modificaciones de estos paquetes de propiedades incluyendo; **Peng – Robinson – Stryjek – Vera (PRSV)**, **Zudkevitch – Joffe (ZJ)** y **Kabadi Danner (KD)**. **Lee – Kesler – Plocker (LKP)** es una adaptación de la ecuación de LK para mezclas.

La ecuación de estado PR soporta el mayor rango de condiciones de operación y se aplica en la mayoría de los sistemas. Las ecuaciones de estado PR y SRK generan todo el equilibrio requerido y las propiedades termodinámicas directamente. El paquete de propiedades PR posee varias opciones las cuales son: **Sour – Peng – Robinson (SPR)** y PRSV. Las opciones para las ecuaciones de estado SRK son: **Sour – Soave – Redlich – Kwong (SSRK)**, KD y ZJ. [HYPROTECH, 1999]

b) Modelos de Actividad

Los modelos de actividad son usados en el modelaje de sistemas altamente no ideales. Los primeros modelos utilizados por HYSYS fueron **Margules** y **Van Laar (VL)**, los cuales proveen una representación empírica de la función de energía libre de Gibbs que limita su aplicación. Los modelos recientes tales como **Wilson, Non – Random – Two – Liquid (NRTL)** y **UNIQUAC** utilizan el concepto de composición local y proporcionan un mejoramiento en su aplicación general. Dentro de las opciones de NRTL se tienen: **NRTL extensivo** y **NRTL general**. El modelo de actividad **Chien – Null** es aplicable para modelos binarios, permitiendo seleccionar el mejor modelo de actividad para cada par de componentes. [HYPROTECH, 1999]

II.2.1.2. Equipos de operación

HYSYS tiene un número de operaciones que se agrupan en el esquema de operación "Flowsheet"; con ellos se puede modelar procesos como los petroquímicos, químicos, de aceites y gases conectando las unidades de operación y las corrientes que estos involucren.

Toda información acerca del funcionamiento de una unidad de operación puede encontrarse tabulada en las páginas de vista de propiedades (Property View). Cada página en la vista de propiedades pertenece a un cierto aspecto de la operación, (conexiones de las corrientes), parámetros físicos (caída de presión y la entrada de energía) o parámetros dinámicos (volumen del tanque e información acerca de la válvula).

Las operaciones son divididas por categorías que contienen varios funcionamientos específicos en cada una. Para el Flowsheet principal las funciones disponibles se dividen en las siguientes categorías: tanques, equipos de transferencia de calor, equipos rotatorios, equipos de tuberías, manipuladores de sólidos, reactores, presideño de columnas, cortes de columnas, subflowsheets y lógica.

II.2.2. PRO II/PROVISION

PRO II es un paquete de simulación de procesos en estado estacionario diseñado por la empresa Simulation Sciences (Simsci) para el uso de la industria química, de refinación de petróleo, de gas natural y petroquímica en general. En este sistema se combina la fuente de datos de una extensa librería de componentes químicos y de métodos de predicción de propiedades químicas; con la más avanzada y flexible técnica de operación unitaria para ofrecer al ingeniero de procesos la facilidad de cálculos en el manejo de balances de masa y energía [SIMSCI, 1997].

II.2.2.1. Modelos Termodinámicos

Las propiedades de transporte son seleccionadas en conjunto con los métodos termodinámicos y comprenden las viscosidades del vapor y del líquido, las conductividades térmicas del vapor y del líquido y la difusividad del líquido. Al predecir las propiedades de las mezclas, bien sea, vapor-líquido, líquido-líquido, sólido-líquido, constantes de equilibrio, entalpías, entropías, densidades y propiedades de transporte, Pro II hace uso de ecuaciones o métodos termodinámicos para así reproducir el comportamiento de las unidades.

Este paquete dispone de métodos para el cálculo de ecuaciones de estado, coeficientes de actividad de líquidos, correlaciones generalizadas, paquetes especiales y polímeros. Al igual que en HYSYS, PRO II recomienda utilizar en el proceso de alquilación las ecuaciones de estado y los coeficientes de actividad para seleccionar la herramienta termodinámica más adecuada.

a) Ecuaciones de estado

Las ecuaciones de estado son aplicables para amplios rangos de temperaturas y presiones. Pueden ser utilizadas para calcular todas las propiedades termodinámicas, utilizando el gas ideal como sistema de referencia. Las ecuaciones cúbicas, en particular, son capaces de predecir acertadamente condiciones críticas y supercríticas. Las ecuaciones de estado con las que cuenta este paquete son: **Soave-Redlich-Kwong (SRK), SRK-Kabadi-Danner (SRKGD), SRK-Huron-Vidal (SRKH), SRK-Panagiotopoulos-Reid (SRKP), SRK-Modified-Panagiotopoulos-Reid, SRK-SIMSCI (SRKS), SRK Hexamer (HEXAMER), Peng Robinson (PR), PR-Huron-Vidal (PRP), PR-Modified-Panagiotopoulos-Reid (PRM), BWRS, Lee-Kesler-Plocker (LKP) y Uniwaals.**

b) Coeficientes de Actividad de Líquidos

Los métodos de actividad de líquidos utilizan modelos de coeficientes de actividad para representar la mezcla líquida en los cálculos de equilibrio de fases. Esta aproximación es capaz de modelar comportamientos de líquidos altamente no ideales. Los métodos disponibles en PROII incluyen: **NRTL, UNIQUAC, Wilson, Van Laar, Margules, Regular Solution, Flory-Huggins, UNIFAC, UNIFAC TDep-1, UNIFAC TDep-2, UNIFAC TDep-3, UNIFAC Free Volume, e Ideal.**

II.2.2.2. Equipos de operación

Si se desea modelar un proceso se deben definir en el banco de datos (databank) las unidades del proceso, las corrientes del mismo y los componentes químicos de las corrientes. También se debe escoger el modelo termodinámico apropiado según el proceso para que se definan las propiedades físicas de los componentes y mezclas del proceso; y especificar tanto las condiciones de operación de las corrientes como las de los equipos del proceso. Cuando se ha especificado todas estas informaciones ya se ha definido el modelo de simulación del proceso.

En el simulador PRO II las unidades de operación poseen equipos como mezcladores, separadores, intercambiadores, entre otras. Estas operaciones al igual que HYSYS se encuentran agrupadas por categorías de acuerdo al tipo de operación.

II.2.3. DESCRIPCIÓN DE LOS EQUIPOS A SIMULAR

Luego de especificar las categorías que dispone PRO II y HYSYS se realiza una descripción detallada de las bombas, columnas, reactores, tanques, intercambiadores y separadores, ya que éstos son los equipos que se emplearán para el modelaje del proceso de Alquilación de la Refinería El Palito.

✓ **Bombas:** esta unidad aumenta la presión de un fluido incompresible que fluye a través de una tubería, utilizando cierta cantidad de energía que es añadida en la entalpía de alimentación. Se debe tener en cuenta que si se desea manejar fluidos compresibles se debe utilizar un compresor en vez de una bomba. Únicamente se considera una fase líquida en los cálculos.

Para realizar la simulación de este equipo se le deben definir los siguientes parámetros: las características de la corriente de alimentación (temperatura, presión, fracción molar y fracción másica), la eficiencia y la presión de salida del fluido o la caída de presión en la bomba, dando como resultado la temperatura de descarga y la eficiencia de la bomba.

✓ **Intercambiadores:** por referencia, las corrientes y los productos son agrupados de acuerdo al lado del intercambiador como "fría" o "caliente", donde la(s) corriente(s) de alimentación en el lado caliente son enfriadas y la(s) corriente(s) de alimentación en el lado frío son calentadas. Son permitidas múltiples corrientes de alimentación del proceso, utilizando la menor presión de alimentación como la presión de entrada. El producto de cada lado de un intercambiador puede ser separado como se desee en múltiples corrientes de producto, donde éste puede ser líquido, vapor, fases mezcladas y agua decantada.

Si se va a simular un intercambiador de tubo y carcasa se debe especificar la corriente de alimentación tanto del lado de los tubos como del lado de carcasa, la caída de presión por los lados y por último la temperatura de salida de alguno de los dos lados.

En el caso de HYSYS, si se va a simular enfriador (Cooler) o un calentador (Heater) basta con definirle la corriente de entrada, la caída de presión y la temperatura de salida del fluido. El simulador automáticamente efectúa todos los cálculos necesarios bajo esas condiciones y arroja todos los resultados como

la energía que se debe suministrar o retirar, las condiciones bajo las que sale dicha corriente, como fracción de vapor, presión y el flujo de calor, entre otras.

✓ **Separadores:** los simuladores contienen cálculos para las operaciones de equilibrio flash como separadores, mezcladores y tanques. La unidad mezcladora combina dos o más corrientes para convertirlas en una corriente simple de producto. La presión de salida puede ser especificada si se desea. Las condiciones de temperatura y de fase de la corriente de salida son siempre determinadas mediante un flash adiabático a partir de las condiciones de la alimentación. La presión de entrada se asume como la menor de las corrientes de alimentación. No existe límite en el número de corrientes a mezclar.

En los separadores automáticamente se fijan las condiciones de temperatura y de fase del producto. Si se desea una separación de fases, debe ser utilizado un separador flash para este propósito. Para los separadores se deben especificar dos variables, éstas pueden ser: temperatura, presión o caída de presión, energía, punto de burbuja o alguna composición, entre otras.

✓ **Columnas:** la operación unitaria puede ser utilizada para simular una destilación o un proceso de extracción líquido-líquido. Una columna debe contener al menos una etapa de equilibrio o plato teórico. No existen límites en el número de platos en el modelo de columna. El condensador, cuando está presente, es siempre enumerado como plato 1, y al rehedidor, cuando existe, se le asigna el número de etapa máxima en el modelo. Cualquier plato puede tener una alimentación, una salida de producto, o un intercambio de energía.

Las columnas de destilación pueden simular procesos de equilibrio vapor/líquido, vapor/líquido/agua o vapor/líquido/líquido. Una columna típica puede tener una sola alimentación o múltiples, un rehedidor, un condensador, bombas y/o intercambiadores.

Las corrientes de alimentación y productos son introducidas durante la construcción del diagrama en la ventana principal PFD. En este tipo de equipos se debe especificar completamente la corriente de alimentación, la caída de presión de la torre, presión en el tope de la misma, reflujo, temperaturas aproximadas del rehervidor y condensador o los calores necesarios, número de platos y cualquier otra variable, como por ejemplo composición de algún compuesto en el destilado, residuo o en algún corte lateral.

✓ **Reactores:** la operación de los reactores se divide en cinco tipos, éstos son: reactor de conversión, reactor de equilibrio, reactor de Gibbs, reactor flujo pistón y reactor mezcla completa. Todos los funcionamientos de los reactores, con la excepción del reactor flujo pistón, se encuentran en la misma vista de propiedades básicas. Las diferencias son en función del tipo de reacción que se asocia a cada uno de ellos (conversión, cinética o equilibrio). Para determinar el estado estacionario de los reactores se define en la página de conexiones, las corrientes de alimentación requerida y por lo menos una de las corrientes a la salida del reactor (vapor o líquido); la corriente de energía es opcional. Se debe definir sus parámetros como lo son la caída de presión, volumen del tanque, la energía y su comportamiento.

Reactores de Conversión: para este tipo de reactores no se necesita ningún dato cinético de la reacción, sólo se especifica la conversión y la estequiometría de los componentes de la reacción. La conversión puede especificarse, también, en función de la temperatura.

Reactores de Equilibrio: es un tanque que modela reacciones de equilibrio. Puede contener un número ilimitado de reacciones de equilibrio que serán resueltas simultáneamente. El mezclado, en este tipo de reactor, no es ideal, donde HYSYS computa la actividad química de cada componente en la mezcla basándose en las fugacidades de los componentes y de la mezcla. No se necesita información acerca de la cinética de la reacción.

Reactores de Gibbs: calcula las composiciones que se logran en la fase y el equilibrio de las corrientes a la salida. Sin embargo, este reactor no necesita el uso de la estequiometría de la reacción para calcular la composición de las corrientes a la salida del reactor. Este tipo de reactor es muy versátil, ya que permite funcionar como un separador, como un reactor que minimiza la energía libre de Gibbs sin reacción o como un reactor que acepta sólo reacciones de equilibrio.

Reactor Mezcla Completa: se utiliza cuando se conoce la cinética de la reacción. Éste asume mezclado completo, los volúmenes del reactor tienen la misma composición y propiedades como la de la toma de la corriente de salida. Las opciones para el reactor son vapor o líquido. Las opciones para las bases de actividad en fase vapor son concentración molar, presión parcial o fugacidad. Para la fase líquida, las opciones son concentración molar, fugacidad o actividad. A este tipo de reactor se le debe especificar las condiciones de operación (presión y temperatura) y también se debe suministrar el volumen o el tiempo de residencia.

Reactor Flujo Pistón: se usa cuando se conoce la cinética de la reacción. El RFP (reactor flujo pistón) no asume mezclado en la dirección axial, pero sí en la dirección radial. Se deben especificar los siguientes parámetros de la ecuación cinética: factor preexponencial, energía de activación, exponente de la temperatura, componente base y el orden de la reacción.

✓ **Bifurcaciones:** esta unidad puede ser utilizada para separar una corriente simple o una mezcla de corrientes de alimentación en dos o más productos de composición y fase idénticas. La presión de la corriente de salida puede ser especificada si se desea y se utiliza un flash adiabático para determinar la temperatura y fase de la corriente de salida. Esta operación puede tener múltiples corrientes de alimentación. La menor presión de la alimentación es la utilizada para la alimentación combinada. Una bifurcación debe tener dos o

más corrientes de producto. Todas las corrientes de salida tienen idénticas condiciones de composición y de fase.

✓ **División de componentes:** el funcionamiento del divisor de componentes es similar al fraccionador. En esta unidad se requiere la especificación de la fracción de cada componente alimentado que sale por el tope. Por consiguiente, como un divisor (splitter) del componente, puede usarse en procesos de separación no estandarizados, los parámetros que pueden especificarse incluyen las fracciones de vapor y la presión de tope y fondo. Una vez conocida la composición, las fracciones de vapor y la presión de la corriente, se determinan las temperaturas y los flujos de calor. Un balance de energía global se realiza para obtener el flujo de calor en la corriente de energía.

CAPÍTULO III. METODOLOGÍA

En el presente trabajo, de carácter fundamentalmente teórico, se ejecutarán las simulaciones básicas de una planta de alquilación. Para tal finalidad es necesario seguir los siguientes pasos una vez culminada la revisión bibliográfica suministrada en el Capítulo II.

III.1. RECOPIACIÓN DE DATOS

Este es uno de los pasos más importantes, por lo cual se visitó la planta de Alquilación de la Refinería el Palito y el Instituto de Tecnología Venezolana Petrolera (INTEVEP) donde se recopilaron los datos de diseño de todos los equipos que se encuentran involucrados en el proceso, la cinética de las reacciones y el diagrama de flujo (PFD) con su respectivo balance de masa y energía. Con estos datos se pudo validar el proceso con los paquetes de simulación descritos anteriormente.

Los datos suministrados por la Refinería el Palito para la simulación del caso base (Octubre de 2000) incluyen: composición (molar y másica) y peso molecular de cada corriente, entre las cuales se destacan: alimentación, ácido fluorhídrico, isobutano de reciclo, isobutano de reposición, propano a almacenaje, n-butano a almacenaje y alquilato a almacenaje. Las tablas de datos correspondientes se aprecian en el anexo A.

Mediante el programa de Control Estadístico de la Refinería, se recopilaron los datos asociados con las condiciones de presión y temperatura a las cuales operan los equipos que conforman la Unidad, así como los flujos procesados en los mismos, los cuales están reportados en horas, tomando como base para el estudio reportes diarios, ya que la unidad básica de los balances volumétricos en la Refinería están expresados en barriles por día. Entre los equipos a los cuales se recopiló información, se pueden mencionar: tren de reacción, asentadores de ácido, despojador de isobutano, depropanizadora y despojador de ácido.

A través de una visita realizada a INTEVEP, en el área de Procesos, se obtuvieron los datos cinéticos necesarios para la realización de las simulaciones a partir de un modelaje desarrollado por el Ing. Manuel Pacheco. Cabe destacar que el propósito de utilizar estos resultados en las simulaciones es validar el tren de reacción del proceso de alquilación y asemejarlo al proceso real sin incurrir en la mejora del modelaje ya desarrollado.

III.2. COMPARACIÓN TEÓRICA DE LOS SIMULADORES

La comparación teórica entre ambos simuladores se refiere a ciertas características significativas de cada uno de ellos. Entre estas se puede mencionar: ambiente de trabajo, creación de reportes, componentes que manejan dentro del proceso de alquilación, capacidad de simulación en estado dinámico, número de ecuaciones termodinámicas y la capacidad de programación interna. De esta manera se establecen las ventajas y desventajas que implica el utilizar cada uno de los simuladores dándole al usuario un perfil a groso modo de las herramientas de las cuales disponen.

III.3. DIAGRAMA SIMPLIFICADO Y BALANCE DE MASA

Realizar un diagrama simplificado de la Unidad de Alquilación de la Refinería El Palito implica presentar los equipos y corrientes a simular en base a la información recopilada.

Para representar el proceso se simplificó la unidad eliminando el pretratamiento de la alimentación, debido a que no mantiene una relación directa con la producción de alquilato por ser una etapa de acondicionamiento de las materias primas. Con respecto a la sección de neutralización, también se simplificó porque el tratamiento del ácido proveniente de la sección de reacción y de fraccionamiento no es relevante para el estudio ya que no interviene en la producción de alquilato. El desarrollo del Trabajo Especial de Grado se limitará

entonces al estudio de las secciones de reacción y separación como se muestra en la figura N° 7. Las corrientes principales contenidas en la Unidad de Alquilación se aprecian en la tabla N° 2.

Tabla N° 2: Principales corrientes de la Unidad de Alquilación

CÓDIGOS	CORRIENTES
C ₁	Isobutano de reposición
C ₂	Alimentación de olefinas
C ₃	Isobutano de reciclo
C ₈	Ácido fluorhídrico a reacción
C ₄₁	Alquilato a D-6807
C ₄₂	Alquilato proveniente de D-6807
C ₄₃	Ácido Fluorhídrico a regeneración
S ₅₅	Mezcla de hidrocarburos al D-6810
S ₅₇	Isobutano del D-6810
S ₅₈	alquilato del D-6810
S ₅₉	Butano a almacenaje del D-6810
S ₆₀	Propano proveniente del D-6809
S ₆₁	Isobutano de reciclo al E-6805
S ₆₅	Ácido proveniente del D-6814
S ₆₉	Reflujo al D-6810
S ₇₃	Ácido del despojador D-6817
S ₇₅	Propano del D-6815
S ₇₆	Hidrocarburos del D-6815
S ₇₇	Propano al D-6817 proveniente del D-6815
S ₇₈	Propano al D-6809 proveniente del D-6815
S ₇₉	Isobutano y propano al D-6815
S ₈₇	Reflujo al D-6815
S ₈₉	Propano del D-6817 a almacenaje
S ₁₀₂	Ácido proveniente del D-6807
S ₁₀₃	Ácido del D-6809
S ₁₀₄	CBM del D-6809

III.3.1. ESPECIFICACIÓN DE LOS EQUIPOS A SIMULAR

A continuación se mencionan los datos que se suministran en cada equipo para ambos simuladores:

- ✓ Los reactores D-6803/04/05/06 se simulan como reactores cinéticos. En este caso se deben definir, en primer lugar, las reacciones que ocurren en el proceso, con su debida estequiometría y la velocidad de reacción de cada una de ellas. Luego, debe especificarse el volumen del reactor y la caída de presión en el mismo.
- ✓ El asentador de ácido D-6807 y el regenerador de ácido D-6809 se simulan como un divisor de componentes en el caso de HYSYS y un divisor de corrientes en PROII, donde deben definirse para ambos el flujo y las composiciones de una de las corrientes de salida, además de sus condiciones de temperatura y presión.
- ✓ Todos los intercambiadores de calor se simulan como calentadores o enfriadores, dependiendo del caso; a estos equipos deben suministrarse una corriente de entrada y las condiciones de temperatura y presión de la corriente de salida. Únicamente los intercambiadores E-6805/09 son representados en HYSYS como un LNG Exchanger, ya que en este paquete los calentadores y enfriadores no manejan dos corrientes simultáneas.
- ✓ Las fraccionadoras D-6810, D-6815 y D-6817 son simuladas como columnas de destilación a las que deben especificarse los siguientes datos: alimentación, número de platos teóricos, plato de alimentación, flujo de tope, presión y temperatura del rehervidor, salidas laterales y relación de reflujo.
- ✓ Los tambores carga de la torre debutanizadora y depropanizadora D-6814 y D-6816 se simulan en HYSYS como un splitter y en PROII como un tambor

flash al que debe especificarse la presión y temperatura de salida de una de las corrientes.

III.3.2. BALANCE DE MASA Y ALQUILATO PRODUCIDO

Al culminar la etapa de recolección de datos en el marco del presente estudio, es necesario realizar los siguientes pasos a fin de asegurar hasta donde sea posible la confiabilidad de los datos. En principio, se efectúa un balance de masa global de la Unidad de Alquilación de la Refinería El Palito basándose en el diagrama simplificado para verificar su cumplimiento; posteriormente se realizan los balances de masa para los equipos principales del proceso. Estos equipos son: reactor, asentador de ácido, torre debutanizadora, torre depropanizadora, despojador de ácido y regenerador de ácido. Adicionalmente, para verificar la confiabilidad de los datos proporcionados por la Refinería El Palito se procede a calcular el alquilato esperado producido en la sección de reacción tomando en cuenta notas de la UOP donde afirma que la cantidad volumétrica de alquilato producido es aproximadamente igual a la cantidad volumétrica de olefinas alimentadas a la Unidad y así compararla con la obtenida en las simulaciones.

III.4. SELECCIÓN DE LOS REACTORES

Para la selección del reactor se requiere hacer un estudio de los tipos de reactores disponibles en ambos simuladores, y de ésta manera determinar cuáles datos de entrada requieren los paquetes para definir completamente el equipo. Ambos simuladores disponen de una gran variedad de reactores asociados a diferentes tipos de reacciones tales como conversión, cinética o equilibrio. Como primer paso, se pre-seleccionan los reactores asociados a reacciones cinéticas ya que como se mencionó en la sección anterior, los datos disponibles para la sección de reacción son de tipo cinético, por ser resultados

obtenidos en el modelaje cinético desarrollado por INTEVEP en el mes de Mayo de 2000.

Partiendo de los reactores pre-seleccionados se procede a la simulación de la sección de reacción utilizando los datos proporcionados por INTEVEP de manera de elegir el tipo de reactor que se empleará en las simulaciones del caso base. Para el desarrollo de la selección del reactor se seguirán los siguientes pasos:

- ✓ Se calcula el volumen total del reactor considerando que en planta es un intercambiador de tubo y carcaza en donde la reacción ocurre en la carcaza y por los tubos circula agua de enfriamiento.
- ✓ En la base de datos de las simulaciones se introducen las trece reacciones (Nº 9 a 21 correspondientes al marco teórico) que tienen lugar en el proceso de alquilación.
- ✓ En la estructura del simulador se requiere introducir los datos de las constantes cinéticas para calcular la velocidad de reacción. Como las constantes cinéticas de las reacciones de alquilación reportadas por INTEVEP, las cuales se observan en la tabla Nº 1 mostrada en el marco teórico, están reportadas en otras unidades deben adaptarse mediante las ecuaciones Nº 22 y 23 para expresarlas en términos que sean consistentes al de velocidad de reacción en unidades de $\text{m}^3/\text{kmol} \times \text{s}$.
- ✓ De los reactores preseleccionados se escoge uno arbitrariamente para dar inicio a las simulaciones en la sección de reacción en donde se fija el valor de la fracción volumétrica de hidrocarburo (ϵ) en el mínimo (0,06) y el diámetro de gota en un valor de 85,3 μm para analizar el comportamiento en cuanto a la producción de alquilato del utilizando el simulador HYSYS por ser más amigable; para este estudio no se utiliza el simulador PROII ya que debe registrarse la misma tendencia para ambos simuladores. Adicionalmente, se varía la caída de

presión utilizando valores de 0 y 10 psi para determinar cuál es su influencia en la producción de alquilato.

✓ Del caso anterior se selecciona la caída de presión que se utilizará en la sección de reacción, dejando fijo el valor del diámetro de gota. En el siguiente análisis se estudia el efecto de la variación de la fracción volumétrica de hidrocarburo utilizando el valor máximo (tope del reactor) correspondiente a 0,36 y el mínimo (fondo del reactor) correspondiente a 0,06 sobre la cantidad de alquilato producido.

✓ Físicamente el reactor consta de 8 boquillas laterales por las cuales se alimentan las olefinas y por el fondo el ácido; este sistema se debe adaptar a los tipos de reactores que contienen los simuladores mediante los resultados obtenidos en INTEVEP como se observa la figura N° 1 representado en el capítulo II, en la cual se aprecia la fracción volumétrica de hidrocarburo respecto la coordenada axial en el reactor. Por lo tanto, se disponen 8 reactores colocados en serie, introduciendo los diferentes valores de ε desde el fondo hasta el tope, manteniendo el tamaño del diámetro de gota para compararlo con la cantidad de alquilato producido en el punto anterior que presente menor desviación en relación a los datos de planta.

✓ Al arreglo seleccionado en la sección anterior, se fija el diámetro de gota en su valor mínimo (10 μm) con la finalidad de determinar el efecto de la variación de éste parámetro en la producción de alquilato. Paralelamente, se comparan las cantidades volumétricas del producto utilizando los diferentes modelos termodinámicos para HYSYS, de manera de verificar que la ecuación de estado no influye en la producción de alquilato por ser un proceso isotérmico.

Una vez seleccionados los parámetros que intervienen en la sección de reacción, se reproducen las características del reactor utilizado en planta lo más cercano a la realidad posible, de acuerdo a los alcances de los simuladores. Para

ello, se colocan dos (2) trenes en paralelo de ocho (8) reactores en serie cada uno, ya que en planta existen dos reactores colocados en paralelo. En este desarrollo se consideró que la separación entre las boquillas era constante y por lo tanto se dividió el volumen total de dispersión en ocho secciones diferentes cada una alimentada por una corriente de hidrocarburos igual a un octavo de la corriente total que alimenta al reactor y se comparan con los otros reactores preseleccionados para seleccionar cuál de ellos es el reactor definitivo finalizando así con la sección de reacción en el simulador HYSYS.

✓ Para comparar cual simulador representa mejor la sección de reacción en base a la cantidad de alquilato obtenido por cada uno de ellos y el alquilato esperado; se introducen los datos de planta, el arreglo fijado y los parámetros seleccionados en HYSYS en el simulador PROII y continuar con la sección de separación como se presenta a continuación.

III.5. BASES DE LA SIMULACIÓN

El siguiente paso, es fijar las bases de las simulaciones en cuanto a las características de las corrientes, número de fases, tipos de equipos a simular, condiciones operacionales y flujos másicos de las corrientes involucradas. De acuerdo al estudio de estos parámetros y utilizando los datos de planta recopilados (Octubre del 2000), se efectúan las corridas de las columnas de destilación (debutanizadora y depropanizadora) que intervienen en la simulación para seleccionar los modelos termodinámicos en cada paquete, ya que estos equipos son los más sensibles a la particularidad del proceso de tener dos fases líquidas y otra fase vapor. Conjuntamente, para la selección se compararán los flujos másicos y condiciones de operación de las corrientes más importantes del proceso, como son: producción de alquilato, recuperación de isobutano, recuperación de ácido, isobutano de reciclo y recuperación de propano. Para establecer las bases de la simulación se consideran las siguientes pautas:

-
- ✓ Especificar los equipos a simular en base al diagrama simplificado.
 - ✓ El reactor a utilizar es de tipo cinético de acuerdo a los datos recopilados.
 - ✓ El modelo termodinámico debe ser compatible con los procesos de refinación y soportar sistemas vapor-líquido-líquido.
 - ✓ Para la simulación de una torre se le debe suministrar el número de platos. Considerando que éstos son teóricos, se determina una eficiencia de platos para convertir los platos reales en platos ideales o teóricos.
 - ✓ Las torres se simulan sólo con rehervidores. Se considera como equipo independiente la combinación condensador-separador trifásico ya que en una columna prediseñada con condensador incluido se tiene una separación bifásica.

III.6. SELECCIÓN DE LOS MODELOS TERMODINÁMICOS

El proceso de alquilación de isoparafinas con olefinas utilizando un catalizador líquido tiene la particularidad de poseer dos fases líquidas (una orgánica y otra inorgánica) y una fase vapor, siendo esta característica una limitante en la selección del modelo termodinámico. Tanto HYSYS como PROII recomiendan para la simulación utilizar como herramienta termodinámica las ecuaciones de estado y los modelos de actividad. Considerando este fundamento teórico se pre-seleccionarán aquellos modelos que se adapten al proceso en estudio, reduciendo así el número de simulaciones.

- ✓ En HYSYS y PROII se simula la sección de separación específicamente en las torres debutanizadora, depropanizadora y despojador de ácido utilizando todos los modelos termodinámicos preseleccionados. De ellos se selecciona para cada simulador una ecuación de estado y un modelo de actividad de acuerdo al que presente menor desviación con respecto a los datos de planta considerando solamente las corrientes más importantes del proceso de alquilación.

✓ De estos modelos se escoge uno solo para cada simulador tomando en cuenta los criterios mencionados en el punto anterior. A partir de esta selección se estudia las condiciones de operación de cada una de las torres en cuanto a presión y temperatura y se comparan ambos simuladores para evaluar el equilibrio termodinámico.

III.7. EFICIENCIA REAL DE PLATOS

Debido a que los simuladores trabajan con etapas ideales y los datos proporcionados en la Refinería corresponden a condiciones reales, es necesario realizar un análisis para determinar la eficiencia real de los platos en las torres debutanizadora, depropanizadora y despojador de ácido. Cabe destacar, que en las simulaciones realizadas previamente se fijó una eficiencia de 0,8 en cada plato por ser un valor típico de eficiencia global de columna.

Para este estudio, se trabaja con valores de eficiencia de 0,6; 0,8 y 1,0 con la finalidad de comprobar la eficiencia real de platos en las columnas considerando los mismos criterios establecidos en la selección del modelo termodinámico. Es importante resaltar que en esta sección se realizan las simulaciones tanto para HYSYS como para PROII utilizando el modelo termodinámico elegido en cada uno de ellos.

III.8. SELECCIÓN DE LAS VARIABLES CRÍTICAS DEL PROCESO

Culminadas las simulaciones del caso base es relevante realizar variaciones sobre el proceso para determinar su sensibilidad. Las variables más importantes que afectan al proceso de alquilación son: la relación isobutano/olefinas, la relación ácido/hidrocarburo, la concentración del ácido fluorhídrico y la temperatura del reactor. Estas cuatro variables se seleccionan porque afectan directamente el proceso de alquilación y porque se disponen de los datos

teóricos en cuanto a valores máximos y mínimos permisibles. En la tabla N° 3 se establecen los rangos de las variaciones permitidas en cada variable para la posterior simulación. Estos rangos fueron proporcionados por la Refinería El Palito.

Cabe destacar que el análisis de sensibilidad se realiza al simulador que represente mejor el proceso en estudio. En caso de ambos presentar desviaciones similares el análisis se aplica al proceso simulado en los dos paquetes.

Tabla N° 3 Variables críticas del proceso de alquilación.

Variables	Valor mínimo	Caso base	Valor máximo
Relación I/O	8:1	10:1	14:1
Relación HF/HC	1:1	1.5:1	2:1
Concentración de HF (%)	88	90	92
Temperatura del reactor (°F)	60	101	120

Fuente: [UOP, 2000]

III.9. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Para facilitar la comprensión de los resultados obtenidos se sigue un orden lógico y secuencial de los mismos separándolos en seis secciones principales.

1.- Se realizan comparaciones operacionales de los simuladores, limitaciones que éstos presentan y diferencias teóricas entre ambos.

2.- Se comprueba el balance de masa y se calcula el alquilato esperado producido respecto a las olefinas alimentadas.

3.- Se definen los parámetros necesarios de la sección de reacción, como lo son el tipo de reactor y la velocidad de reacción en función del diámetro de gota y producción de alquilato, de acuerdo a los criterios ya mencionados.

4.- Se obtiene el modelo termodinámico que mejor reproduce el proceso de alquilación para cada simulador, siendo éste el que presente una menor desviación con respecto a los datos de planta en base al balance de masa global, por equipo y condiciones de operación; a su vez, se analizan las posibles causas de estas desviaciones, en base a los fundamentos teóricos.

5.- Se determina la eficiencia real de las columnas para cada simulador comparando los flujos de los componentes claves en las corrientes principales de cada equipo.

6.- Se realiza un estudio de sensibilidad del proceso frente a variaciones de temperatura del reactor, de la relación de isobutano/olefina, de la relación de ácido/hidrocarburo y de la concentración de ácido.

Por último se establecen las conclusiones y recomendaciones pertinentes en base a los análisis obtenidos.

Es importante destacar que los criterios utilizados para determinar las desviaciones son los siguientes: para el error relativo, correspondiente a presiones y flujos procesados, se considera como satisfactorio desviaciones menores o iguales al 10%, y para errores absolutos, correspondientes a el cálculo de las desviaciones de las temperaturas de operación y calidades de los productos, se toma el criterio de experiencia del Departamento de Ingeniería de Procesos de la Refinería el Palito, el cual considera como satisfactorio desviaciones menores o iguales a 10 unidades.

CAPÍTULO IV. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En este capítulo se presenta el análisis y discusión de los resultados obtenidos en las simulaciones de la Unidad de Alquilación considerando la eficiencia de las columnas y los cambios de las variables críticas tanto para HYSYS como para PROII.

IV.1. COMPARACIÓN TEÓRICA DE LOS SIMULADORES

El análisis de la comparación teórica de los simuladores está basado en los tipos de compuestos que manejan, en las ecuaciones termodinámicas y el tipo de aplicaciones que poseen, resaltando así las ventajas y desventajas entre ambos simuladores para el proceso de alquilación.

A pesar que ambos simuladores trabajan en el mismo ambiente (Windows), la presentación en HYSYS es más agradable, las corridas son más rápidas y además ejecuta la simulación de forma automática creando un reporte de los resultados. Por el contrario, PROII requiere la ejecución manual tanto de la simulación como del reporte de los resultados.

En cuanto al número de componentes disponible en su librería, ambos simuladores contienen todos los compuestos principales que intervienen en el proceso de alquilación, sin la necesidad de crearlos hipotéticamente, como se observa en la tabla N° 4.

En la misma tabla, se aprecia la ventaja más importante que presenta HYSYS sobre PROII porque se puede utilizar en estado dinámico, lo que indica que la metodología de cálculo es más compleja, tomando en cuenta las perturbaciones que puedan tener lugar en el proceso, realizando los cálculos de todos los parámetros que involucre la simulación en estado no estacionario.

En HYSYS se puede enumerar los platos en las columnas tanto desde el fondo como desde el tope. Además, para ayudar la convergencia de las

columnas en HYSYS se puede monitorear los flujos especificados mientras está iterando.

PROII posee otras ventajas no menos importantes sobre HYSYS en cuanto a que posee un mayor número de modelos termodinámicos, pudiendo así obtener una mejor aproximación de los parámetros termodinámicos para una mayor variedad de procesos. La ventaja más resaltante que posee este simulador es que el usuario puede crear su propio modelo termodinámico y cinético modelando una sub-rutina en un lenguaje de programación, específicamente en FORTRAN.

Tabla Nº 4: Comparación teórica de los Simuladores

VARIABLES	HYSYS	PROII
Ambiente de trabajo	Windows	Windows
Reportes	Automático	Manual
Componentes que manejan	27	27
Dinámico	Si	No
Ecuaciones de estado	8	16
Modelos de actividad	8	13
Sub-rutina	No	Si

IV.2. BALANCE DE MASA

Como primer paso se realizó el balance de masa global de la Unidad de Alquilación obteniéndose una desviación de 2,7 E-04 % y los balances de masa por equipo verificando su cumplimiento específicamente en el reactor arrojando una desviación de 2,3 E-03 % como se observa en el anexo B, ecuaciones Nº 25 y 26 respectivamente.

Para adicionar la sección de reacción a la simulación y verificar la confiabilidad de los resultados, se toma como referencia las notas de la UOP, en

las cuales se afirma que la cantidad volumétrica de alquilato producido es aproximadamente igual a la cantidad volumétrica de olefinas alimentadas a la unidad. Como se muestra en la tabla N° 5, cuyos cálculos se presentan en el anexo B, ecuaciones 27 a 30, la desviación relativa es menor al 10% lo que corrobora la confiabilidad de los resultados pudiendo así proceder a las simulaciones del proceso de alquilación.

Tabla N° 5: Producción esperada de alquilato respecto a las olefinas alimentadas

Olefinas alimentadas (BD)	Alquilato esperado producido (BD)	Desviación (%)
16818	15813	6,0

IV.3. SELECCIÓN DEL REACTOR

Al disponer de los datos cinéticos de las reacciones, se consideraron los reactores que trabajan con este tipo de datos. En ambos simuladores, las reacciones cinéticas son compatibles con reactores mezcla completa y reactores flujo pistón, por lo que se pre-seleccionaron para el posterior estudio.

El primer parámetro a determinar en esta sección es el volumen del reactor, el cual se calculó como se observa en el anexo B, ecuación N° 21, tomando en cuenta que en planta el reactor es un intercambiador de tubo y carcaza donde la reacción ocurre solamente en la carcaza. El volumen total del reactor es de 14,92 m³. El cálculo para adaptar las constantes cinéticas a unidades consistentes con las requeridas al simulador también está reflejado en el anexo B, tablas N° 34, 35, 36 y 37.

Para efecto del estudio de la sección de reacción, se analizó el comportamiento de un reactor mezcla completa (RMC) en el simulador HYSYS

en cuanto a la capacidad de producción de alquilato utilizando el valor mínimo de ϵ igual a 0,06 fijando el diámetro de gota de la fase dispersa en 85,3 μm . En el estudio también se varió la caída de presión con un máximo de 10 psi para comprobar que no influye en la producción de alquilato ya que la reacción se lleva a cabo en fase líquida como se observa en la tabla N° 6, quedando para el estudio una caída de presión nula. En las tablas N° 46 y 47 del Anexo C, se observan los flujos volumétricos de alquilato por componentes, mientras que en la tabla N° 6 se muestran únicamente los flujos totales.

Tabla N° 6: Efecto de la caída de presión en la producción del alquilato

Modelos	Alquilato total (BD)	
	$\Delta P = 0$ psi	$\Delta P = 10$ psi
Kabadi Danner	5812,64	5812,14
Sour SRK	5813,41	5812,91
Chien Null	5732,97	5732,71
NRTL extensive	5733,42	5733,14
Margules	5733,42	5733,14
UNIQUAC	5733,42	5733,14
Van Laar	5732,92	5732,72
Wilson	5733,42	5733,14

Para el caso estudiado anteriormente, se determinó el efecto de la variación de la fracción volumétrica (ϵ) en la producción del alquilato utilizando un valor máximo de $\epsilon = 0,36$ obteniéndose, que para ese valor se favorece la cantidad de alquilato total aproximadamente en 3500 BD como puede observarse en la tabla N° 7. Este resultado es lógico, ya que al utilizar el máximo de la fracción volumétrica de la fase hidrocarburo se incrementa la cantidad volumétrica de isobutano en la alimentación.

Cabe destacar, que las diferencias entre el alquilato producido para cada modelo son fracciones de barriles, no reflejándose éste en los reportes ya que

se usaron cifras significativas enteras porque se manejan grandes cantidades de flujos volumétricos.

Tabla N° 7: Efecto de ϵ en la producción del alquilato

Modelos	Alquilato total (BD)	
	$\epsilon = 0,06$	$\epsilon = 0,36$
Kabadi Danner	5812	9347
Sour SRK	5812	9348
Chien Null	5733	9329
NRTL extensive	5733	9329
Margules	5733	9329
UNIQUAC	5733	9329
Van Laar	5732	9329
Wilson	5733	9329

Para llevar el estudio del reactor lo más cercano a la sección de reacción en planta, se arreglaron ocho reactores mezcla completa en serie con variaciones de ϵ entre 0,06 y 0,36 como se aprecia en la figura N° 1 representado en el marco teórico, para evaluar su efecto en la producción del alquilato y a su vez comparar las desviaciones relativas cuando se utiliza un reactor mezcla completa con ϵ igual a 0,36.

Como se puede observar en la tabla N° 8, si se utilizan ocho reactores en serie la cantidad de alquilato es menor que la obtenida al emplear un RMC. Esto se explica por la estructura interna del reactor, ya que ésta permite un aumento progresivo en el valor de ϵ . En cambio, al utilizar 1 RMC con el valor máximo de ϵ , no se representa este aumento, y al permanecer constante la fracción volumétrica se genera un exceso de alquilato que no corresponde a la estructura original del reactor empleado para el proceso de alquilación. Sin embargo, los resultados son satisfactorios en relación a la desviación relativa entre ellos, siendo ésta menor que el 1%, por lo que se considerará para los estudios posteriores el arreglo de ocho reactores en serie, en vez de usar un solo reactor.

Tabla N° 8: Efecto de la variación de ϵ en la producción del alquilato para 8 RMC en serie y un RMC

Modelos	Alquilato total (BD)		D _{relativa} (%)
	8 RMC	1 RMC	
Kabadi Danner	9309	9347	< 1,0
Sour SRK	9300	9348	< 1,0
Chien Null	9272	9329	< 1,0
NRTL extensive	9272	9329	< 1,0
Margules	9272	9329	< 1,0
UNIQUAC	9272	9329	< 1,0
Van Laar	9272	9329	< 1,0
Wilson	9272	9329	< 1,0

Otro parámetro que está involucrado en la selección del reactor es el tamaño del diámetro de gota que está íntimamente relacionado con la velocidad de reacción. Para ello se consideraron en el estudio ocho reactores mezcla completa en serie utilizando el valor máximo (85,3 μm) y el mínimo (10 μm) obteniéndose, como resultado que el menor tamaño de gota es más favorable para la producción de alquilato, debido a que implica un mayor contacto en la interfase hidrocarburo-ácido ya que aumenta el área en la interfase mejorando la transferencia de masa. Este resultado puede distinguirse en la tabla N° 9 la cual está referida a las tablas N° 48 y 49 del anexo C presentando un incremento general de 3000 barriles por día de alquilato total.

Tabla N° 9: Efecto de la variación del D_g en la producción del alquilato

Modelos	Alquilato total (BD)	
	$D_g = 85,3 \mu\text{m}$	$D_g = 10 \mu\text{m}$
Kabadi Danner	9309	12311
Sour SRK	9300	12316
Chien Null	9272	12305
NRTL extensive	9272	12310
Margules	9272	12310
UNIQUAC	9272	12310
Van Laar	9272	12310
Wilson	9272	12310

Adicionalmente en la misma tabla, se compararon los diferentes modelos termodinámicos haciendo uso del simulador HYSYS verificándose la hipótesis que por ser un reactor isotérmico no interviene la selección del modelo en la producción del alquilato. Esto se explica ya que al fijar la temperatura en el reactor, el balance de masa se realiza en forma independiente del balance de energía, el cual incluye el uso de la ecuación de estado.

Seleccionado el diámetro de gota promedio (10 μm), una caída de presión nula y barriendo la alimentación al reactor con variaciones de la fracción volumétrica de hidrocarburo en la emulsión (ϵ), se procedió a estudiar dos trenes en paralelo para los reactores pre-seleccionados con ocho reactores en serie cada uno, introduciendo en cada tren de reacción un 1/2 de la alimentación y en cada reactor un 1/8 de lo que se alimenta, con la finalidad de escoger el reactor más apropiado para este tipo de proceso. Como el modelo termodinámico no influye en la selección del reactor se seleccionó el modelo de actividad UNIQUAC en HYSYS arbitrariamente para comparar los reactores mezcla completa y flujo pistón respectivamente.

En la tabla N° 10, se puede ver el aumento del alquilato total cuando se usan reactores flujo pistón, verificándose así la teoría, que sostiene que un reactor flujo pistón proporciona una conversión mayor que la que se obtiene de varios reactores mezcla completa conectados en serie, ya que para que las conversiones se igualen se necesitarían infinitos reactores mezcla completa.

Tabla N° 10: Producción del alquilato para los reactores flujo pistón y mezcla completa utilizando el modelo de actividad UNIQUAC

Alquilato total (BD)			D _{HYSYS/PROII} (%)
Esperado	RFP	RMC	
15813	13571	12336	9,0

A pesar que la desviación relativa entre ambos reactores está por debajo del 10%, para el estudio de la planta de alquilación tanto para HYSYS como para PROII se utilizarán los reactores flujo pistón, ya que es el que produce una cantidad de alquilato que más se acerca al volumen de alquilato esperado. El tipo de arreglo seleccionado fue de dos (2) trenes de reacción en paralelo con ocho (8) reactores flujo pistón en serie, por ser el que presenta una menor desviación en la producción de alquilato con respecto a los datos de planta.

Para verificar la fidelidad de operación del reactor isotérmico simulado en el proceso, se compararon los datos arrojados por el simulador en la corriente de salida de los reactores en cuanto a la producción de alquilato respecto a la producción teórica de los mismos utilizando el modelo de actividad NRTL, como se muestra en la tabla N° 11.

Tabla N° 11: Producción de alquilato en la sección de conversión

Alquilato esperado (BD)	Alquilato producido HYSYS (BD)	Desviación relativa HYSYS (%)	Alquilato producido PROII (BD)	Desviación relativa PROII (%)
15813	13572	14,2	13610	13,9

Las desviaciones en ambos simuladores son mayores al 10 % considerándose moderadamente satisfactorias. Esto puede explicarse por el modelo cinético utilizado, el cual se ajustó a un conjunto de datos que no ha sido verificado posteriormente para comprobar su reproducibilidad. Como se mencionó anteriormente la cinética introducida es resultado de un modelaje realizado en el marco del simulador de procesos Aspen Plus mediante una subrutina desarrollada en Fortran.

Cabe destacar, que al ser un modelaje éste es adaptado al simulador den el cual se crea y cuando se utiliza en otro paquete pueden acarrear desviaciones por incompatibilidad de las constantes cinéticas. En cuanto a la producción de

alquilato comparando los dos simuladores se obtiene una desviación menor al 1%.

La variación en estos resultados, a pesar de emplear la misma ecuación termodinámica, se puede explicar por varias razones, entre ellas las limitaciones del modelo cinético utilizado ya que se empleó un intervalo reducido de condiciones de operación, un número limitado de reacciones de alquilación y no se consideraron los efectos de variaciones de las propiedades termofísicas de la emulsión existente en el reactor sobre el tamaño promedio de gota de la emulsión hidrocarburo/ácido. Además, los métodos iterativos para los cálculos del proceso, entre un simulador y otro, son diferentes y por lo tanto los ajustes que resultan son distintos. Pero como se aprecia, las variaciones entre ambos no son significativas, aunque la mejor aproximación que realizan estos métodos es el que posee el simulador PROII, ya que produce más alquilato y por lo tanto menor desviación.

IV.4. SELECCIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO

Con la finalidad de seleccionar los modelos que más se adapten al proceso estudiado se realizó una pre-selección teórica de ciertas ecuaciones de estado y modelos de actividad para cada simulador, basándose en los diferentes alcances y limitaciones de cada modelo termodinámico con respecto al proceso de alquilación. Las ecuaciones de estado y modelos de actividad pre-seleccionados para cada simulador se observan en la tabla N° 12.

De las ecuaciones de estado que pertenecen a HYSYS y PROII se preseleccionaron Lee Kesler Plocker, Peng Robinson, Soave Redlich Kwong y sus respectivas modificaciones. En cuanto a los modelos de actividad existen para ambos simuladores cuatro modelos comunes, éstos son: Non Randon Two Liquid, UNIQUAC, Van Laar y Margules.

Tabla N° 12: Pre-selección teórica de los modelos de actividad en HYSYS y PROII

	Modelos Termodinámicos	HYSYS	PROII
Ecuaciones de estado	Peng-Robinson Stryjek-Vera (PRSV)	Si	No
	Sour Soave-Redlich-Kwong (SSRK)	Si	No
	Lee-Kesler Plocker (LKP)	Si	Si
	SRK Hurón-Vidal	No	Si
	SRK SIMSCI	No	Si
	SRK Panagiotopoulos-Reid	No	Si
	SRK Hexamer	No	Si
	PR Huron-Vidal (PRH)	No	Si
	PR modified Panagiotopoulos-Reid (PRM)	No	Si
Modelos de actividad	Non-Random-Two-Liquid (NRTL)	Si	Si
	Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)	Si	Si
	Margules	Si	Si
	Van Laar (VL)	Si	Si
	Chien Null (CN)	Si	No
	Kabadi Danner (KD)	Si	No
	NRTL Extensive	Si	No
	UNIFAC	No	Si
	SRK modified	No	Si

Una vez realizada esta pre-selección se procedió a probar cada modelo en la sección de fraccionamiento, específicamente en las torres debutanizadora y depropanizadora por ser las más sensibles a los cambios en la termodinámica del proceso, ya que toman en cuenta el equilibrio entre dos fases líquidas y una fase vapor.

En vista de la cantidad de parámetros a evaluar en el proceso de alquilación, el estudio se basó en los valores de flujos por componentes de las corrientes principales en las torres para cada simulación. En las siguientes tablas, N° 13 al 16, se presentan los flujos volumétricos de las corrientes seleccionadas para el análisis, así como su correspondiente desviación con los datos de planta.

Tabla N° 13: Validación de las características del isobutano de reciclo de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano	4631,00 68669,85 5322,18	4082,80	6,38	3475,15	20,31
	Isobutano		67324,00	1,96	70290,36	2,36
	n-Butano		6584,10	23,71	5816,22	9,28
UNIQUAC	Propano		4165,90	4,47	*	*
	Isobutano		67258,00	2,06		
	n-Butano		5934,40	11,5		
NRTL extensivo	Propano		4082,10	6,39	**	**
	Isobutano		67321,00	1,96		
	n-Butano		6583,80	23,70		
SRKM	Propano		**	**	4737,96	8,64
	Isobutano		**	**	69052,79	<1,00
	n-Butano		**	**	5395,00	1,37
KABADI	Propano		5101,60	16,97	**	**
	Isobutano		66311,00	3,43		
	n-Butano		6057,10	13,80		
PRSV	Propano	5095,60	16,84	**	**	
	Isobutano	66581,00	3,04			
	n-Butano	3096,80	41,81			
SSRK	Propano	5101,50	16,96	**	**	
	Isobutano	66332,00	3,40			
	n-Butano	6040,40	13,49			
PRH	Propano	**	**	4614,68	5,82	
	Isobutano	**	**	69113,73	<1,00	
	n-Butano	**	**	5514,66	3,62	
PRM	Propano	**	**	4719,95	8,23	
	Isobutano	**	**	69041,59	<1,00	
	n-Butano	**	**	5405,82	1,57	
MARGULES	Propano	4108,30	5,81	3457,91	20,71	
	Isobutano	67343,00	1,93	70396,23	2,51	
	n-Butano	6569,60	23,44	5728,40	7,63	
VAN LAAR	Propano	4100,9	5,98	3457,65	20,71	
	Isobutano	67316,00	1,97	70396,27	2,51	
	n-Butano	6564,10	23,33	5728,60	7,63	
CHIEN NULL	Propano	3991,60	8,48	**	**	
	Isobutano	67419,00	1,82			
	n-Butano	6585,80	23,74			

Tabla N° 14: Validación de las características de n-Butano de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Isobutano n-Butano	43,99 1561,34	0,00 0,00	100,00 100,00	11,30 1665,14	74,32 6,65
UNIQUAC	Isobutano n-Butano		734,44 7,72	>100,00 99,50	*	*
NRTL extensivo	Isobutano n-Butano		0,00 0,00	100,00 100,00	**	**
SRKM	Isobutano n-Butano		**	**	95,48 1707,14	>100,00 9,34
KABADI	Isobutano n-Butano		7,62 584,65	82,68 62,50	**	**
PRSV	Isobutano n-Butano		13,48 534,87	69,36 65,74	**	**
SSRK	Isobutano n-Butano		8,03 562,03	81,74 64,00	**	**
PRH	Isobutano n-Butano		**	**	93,60 1628,97	>100,00 4,40
PRM	Isobutano n-Butano		**	**	112,99 1690,29	>100,00 8,26
MARGULES	Isobutano n-Butano		0,00 0,00	100,00 100,00	11,36 1661,57	74,17 6,42
VAN LAAR	Isobutano n-Butano		0,00 0,00	100,00 100,00	11,36 1661,71	74,17 6,43
CHIEN NULL	Isobutano n-Butano		0,00 0,00	100,00 100,00	**	**

Tabla N° 15: Validación de las características del fondo de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Alquilato C ₆ ⁺	14186,21 739,83	13206,03 750,44	6,90 1,43	13245,12 514,89	6,63 30,40
UNIQUAC	Alquilato C ₆ ⁺		12817,52 750,60	9,65 1,46	*	*
NRTL extensivo	Alquilato C ₆ ⁺		13204,80 750,77	6,92 1,46	**	**
SRKM	Alquilato C ₆ ⁺		**	**	12969,85 499,65	8,57 32,46
KABADI	Alquilato C ₆ ⁺		12890,97 750,40	9,13 1,43	**	**
PRSV	Alquilato C ₆ ⁺		12866,60 750,68	9,30 1,47	**	**
SSRK	Alquilato C ₆ ⁺		12874,28 750,46	9,25 1,44	**	**
PRH	Alquilato C ₆ ⁺		**	**	12954,28 499,08	8,68 32,54
PRM	Alquilato C ₆ ⁺		**	**	12957,61 498,84	8,66 32,57
MARGULES	Alquilato C ₆ ⁺		13180,85 750,67	7,10 1,46	10848,24 1073,39	23,53 45,09
VAN LAAR	Alquilato C ₆ ⁺		13206,06 750,77	6,91 1,48	13248,41 515,11	6,61 30,37
CHIEN NULL	Alquilato C ₆ ⁺		13203,10 750,84	6,93 1,49	**	**

Tabla N° 16: Validación de las características del tope de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano Isobutano	22240,71 350,1	22757,00 4,38	2,32 98,75	31168,38 3,59	40,14 98,97
UNIQUAC	Propano Isobutano		22630,00 130,95	1,75 62,60	*	*
NRTL extensivo	Propano Isobutano		22757,00 4,83	2,32 98,62	**	**
SRKM	Propano Isobutano		**	**	21095,13 416,23	5,15 18,89
KABADI	Propano Isobutano		224430,00 330,29	<1,00 5,65	**	**
PRSV	Propano Isobutano		22343,00 417,80	<1,00 19,34	**	**
SSRK	Propano Isobutano		22371,00 389,10	<1,00 11,14	**	**
PRH	Propano Isobutano		**	**	22470,05 423,65	1,03 21,21
PRM	Propano Isobutano		**	**	20886,65 403,00	6,09 15,19
MARGULES	Propano Isobutano		22761,00 0,63	2,33 99,82	31842,45 2,95	43,17 99,16
VAN LAAR	Propano Isobutano		19938,00 10,38	10,35 97,03	31485,82 3,02	41,57 99,14
CHIEN NULL	Propano Isobutano		22757,00 4,85	2,32 98,61	**	**

En la Unidad de Alquileración están involucradas otras corrientes las cuales se encuentran reportadas en el anexo D, es importante resaltar que éstas no son menos importantes aunque para la comparación entre ambos simuladores se consideraron las más críticas de cada columna.

Tomando como referencia las tablas presentadas anteriormente, para cada paquete se seleccionó la ecuación de estado y el modelo de actividad que presentó una menor desviación relativa con respecto a los datos del proceso. Para realizar este análisis se seleccionó la corriente de isobutano, el corte de n-butano y el alquilato proveniente de la torre debutanizadora, tomados de las tablas N° 13, 14 y 15 respectivamente, así como también la corriente de propano obtenida por el tope de la torre depropanizadora, tomada de la tabla N° 16. La selección de los modelos termodinámicos para el simulador HYSYS y los flujos de corrientes mencionadas se presentan en la tabla N° 17, así como su desviación de los datos de planta.

Tabla N° 17: Selección de los modelos termodinámicos para el simulador HYSYS

Modelos	Compuestos	Planta (BD)	HYSYS (BD)	% $D_{relativa}$
PRSV	iC ₄ (D-6810)	68670	66581	3,0
	n-Butano (D-6810)	1561	535	65,7
	Alquilato (D-6810)	14186	12867	9,3
	Propano (D-6815)	22241	22343	< 1,0
KABADI	iC ₄ (D-6810)	68670	66311	3,4
	n-Butano (D-6810)	1561	585	62,5
	Alquilato (D-6810)	14186	12891	9,1
	Propano (D-6815)	22241	22430	< 1,0

En el caso del simulador HYSYS, el modelo que presenta una menor desviación con respecto a los componentes de interés, es la ecuación de estado Peng Rovinson Stryjek Vera (PRSV), por ser una modificación de la ecuación de

Peng Robinson para ampliar el rango de aplicabilidad en sistemas no ideales para sistemas de hidrocarburos y compuestos de refinería.

El modelo de actividad seleccionado por representar mejor el proceso, establecido en los mismos parámetros de selección de la ecuación de estado, es Kabadi Danner. Esto se explica ya que es un modelo desarrollado especialmente para cálculos de equilibrio de vapor-líquido-líquido para sistemas de hidrocarburos, la cual es una de las características más importantes del proceso de alquilación.

Para el simulador PROII, tal como se observa en la tabla N° 18, la ecuación de estado elegida es Peng Robinson Huron Vidal (PRH), que igualmente es una modificación de la ecuación Peng Robinson donde implica una mayor aplicabilidad de éste para sistemas que se alejan de la idealidad, como es el proceso de alquilación con ácido fluorhídrico.

Tabla N° 18: Selección de los modelos termodinámicos para el simulador PROII

Modelos	Compuestos	Planta (BD)	PROII (BD)	% $D_{relativa}$
PRH	iC ₄ (D-6810)	68670	69114	< 1,0
	n-Butano (D-6810)	1561	1629	4,4
	Alquilato (D-6810)	14186	12954	16,3
	Propano (D-6815)	22241	22470	1,0
Van Laar	iC ₄ (D-6810)	68670	70396	2,5
	n-Butano (D-6810)	1561	1662	6,4
	Alquilato (D-6810)	14186	13248	6,6
	Propano (D-6815)	22241	31486	41,6

El modelo de actividad de líquidos Van Laar fue el que arrojó resultados más cercanos a los datos de planta en relación a los modelos pre-seleccionados como se observa en las tablas previas, este modelo también es utilizado favorablemente en sistemas no ideales. Cabe destacar, si comparamos las

desviaciones de los modelos de actividad con las ecuaciones de estado, se observa que otras ecuaciones de estado pre-seleccionadas tales como SRKM y PRM proporcionan desviaciones menores que el modelo de actividad Van Laar siendo éstos más cercanos a los reportes de planta, por lo tanto, los modelos de actividad en éste simulador, no constituyen una aproximación confiable en el proceso de alquilación.

En ambos simuladores la ecuación de estado seleccionada presentó menor desviación que el modelo de actividad con respecto a la realidad, siendo satisfactorio para efectos de la validación por ser inferiores al 10%. Es lógico este resultado porque como se mencionó anteriormente, ambas ecuaciones son modificaciones de la ecuación de estado Peng Robinson por ser la alquilación con ácido fluorhídrico un proceso no ideal donde intervienen hidrocarburos.

Al comparar los resultados logrados en ambos simuladores, se observa que existe cierta variación entre ellos, la cual puede explicarse porque al utilizar ecuaciones de estado distintas, la base termodinámica de propiedades y los parámetros de las ecuaciones son diferentes entre un simulador y otro. De las desviaciones presentes en las tablas N° 17 y 18, puede deducirse que el simulador más apropiado para el proceso de alquilación con HF es PROII utilizando la ecuación de estado Peng Robinson Hurón Vidal siendo éste menor al 1,0% en la recuperación de isobutano y para HYSYS 3,0% y para el caso de la recuperación de n-Butano, la desviación entre ambos simuladores es notoria arrojando una desviación para PROII del 4,4 % y para HYSYS del 65,4% debido a las limitaciones que el modelo termodinámico presenta en este simulador.

A continuación se presenta en las figuras N° 8 y 9 el diagrama de flujo del caso base reportado en los simuladores HYSYS y PRO II, de manera de constatar que en ambos simuladores se utilizó el mismo arreglo en la sección de reacción, así como los mismos equipos de la sección de purificación.

Figura N° 8: Diagrama representado en HYSYS

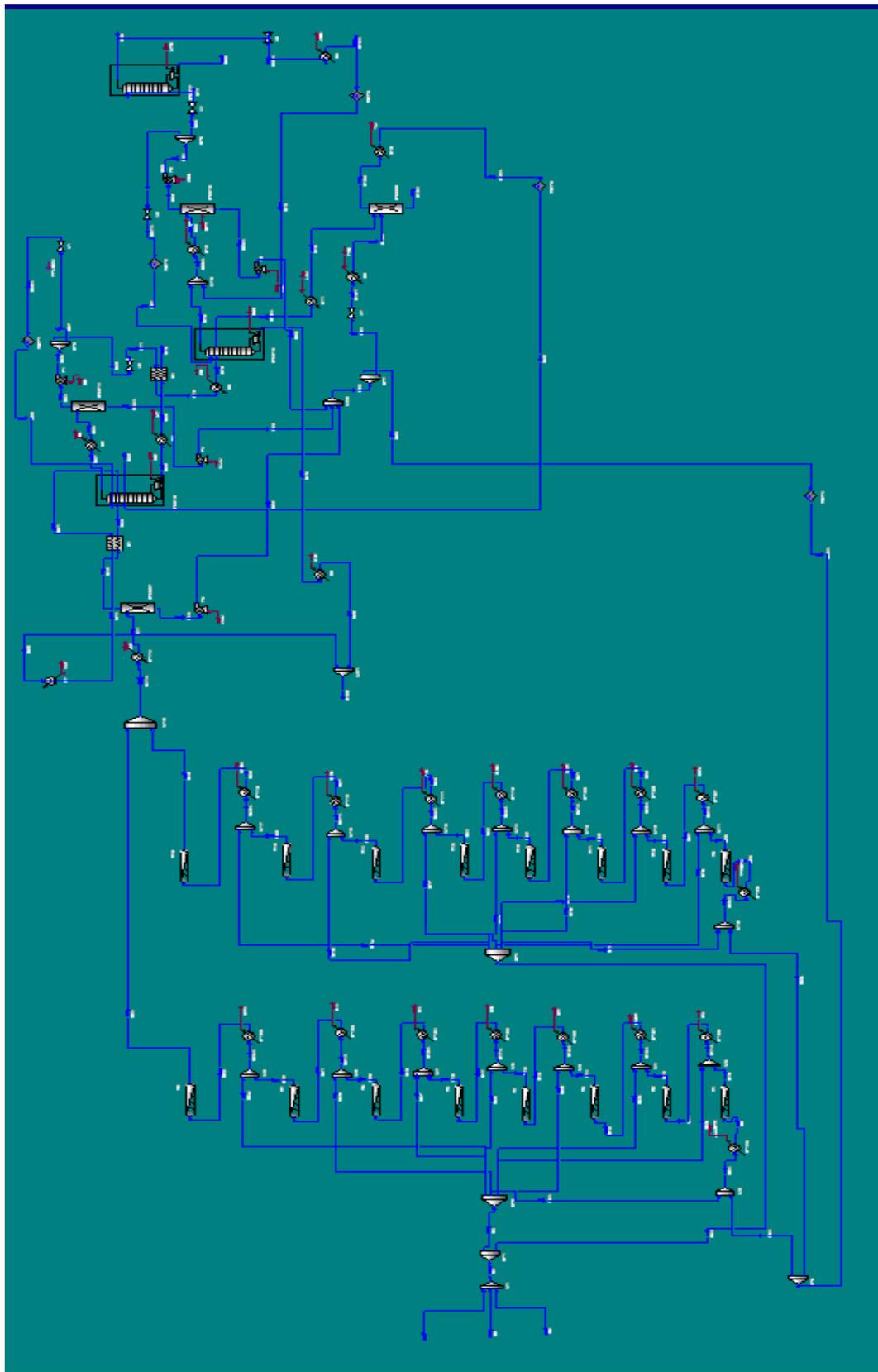
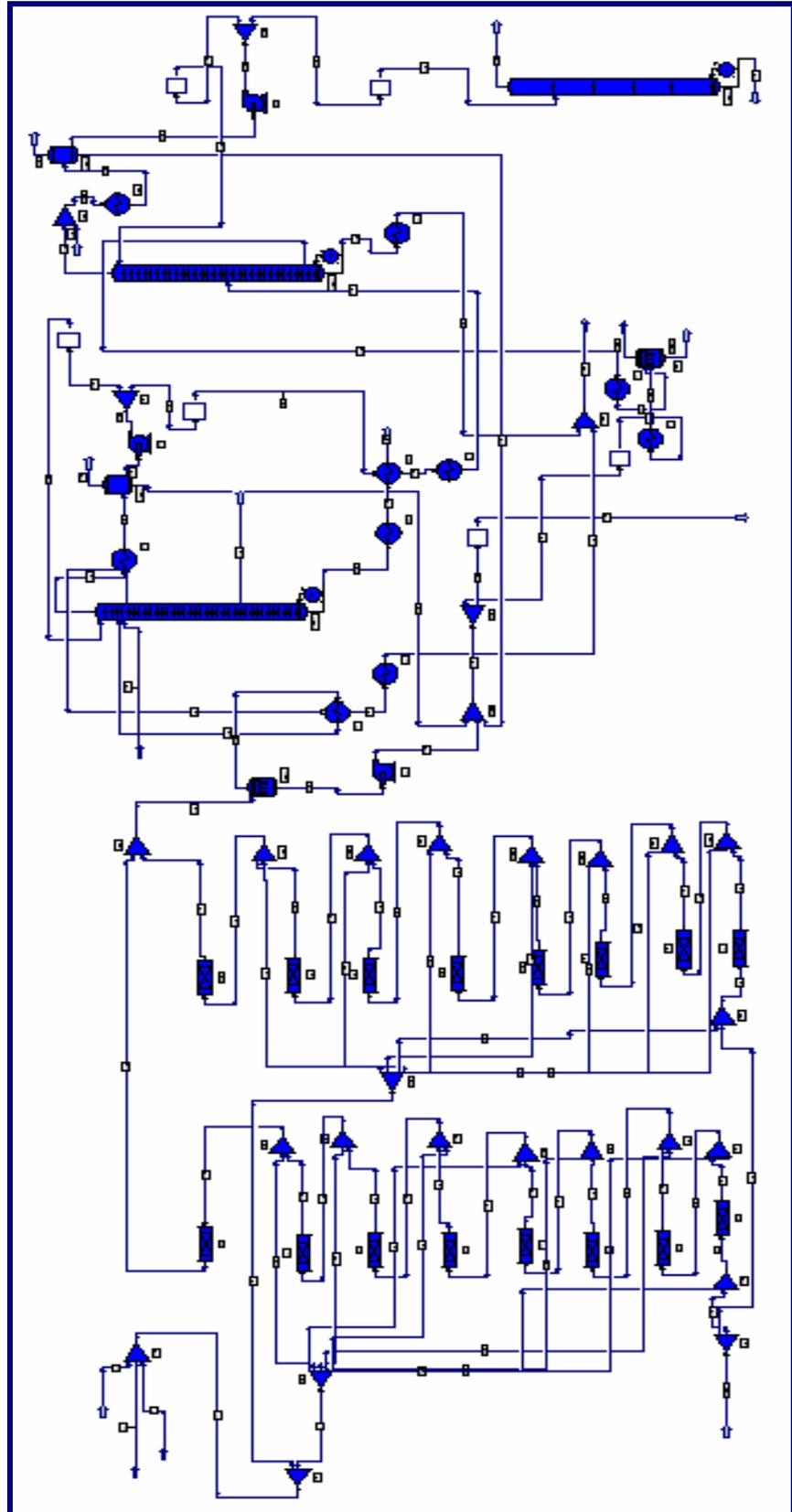


Figura N° 9: Diagrama representado en PROII



A continuación se analiza el comportamiento de las condiciones de operación de la torre debutanizadora (D-6810) con las ecuaciones de estado seleccionadas anteriormente, donde se observó que las máximas desviaciones en cuanto al perfil de presión y temperatura se presentan en el corte de extracción de n-Butano en el caso del simulador HYSYS, y en la corriente de tope con el simulador PROII. Estas desviaciones afectan las calidades de las corrientes, como se puede observar en la tabla N° 19, donde la desviación del corte de n-Butano arrojada en HYSYS es superior a 10 °F, debido a que los parámetros para los modelos termodinámicos en el caso de los alquilatos no están contenidos en la base de datos de este simulador, por lo que son calculados resultando un equilibrio vapor líquido líquido poco confiable.

Tabla N° 19: Validación de las condiciones de operación de la torre D-6810

Variable	Corte	Planta	HYSYS	D _{A,H}	PROII	D _{A,P}
Temperatura (°F)	Tope	133,7	140,4	3,7	145,0	11,3
	Extracción de iC ₄	164,2	163,6	0,6	164,9	<1,0
	Extracción de n-B	200,1	237,6	37,5	206,8	6,7
	Fondo	371,	388,5	16,8	371,3	<1,0
Variable	Corte	Planta	HYSYS	%D _H	PROII	%D _P
Presión (Psig)	Tope	143,0	143,0	0,0	143,00	0,0
	Extracción de iC ₄	145,0	144,0	<1,0	144,00	<1,0
	Extracción de n-B	145,0	148,6	2,5	148,7	2,6
	Fondo	150,4	151,0	<1,0	151,0	<1,0

Analizando las desviaciones obtenidas en ambos simuladores, se aprecia que en PROII para las condiciones de temperatura de fondo y corrientes laterales se obtiene una desviación absoluta menor a 7 °F, representando así mejor el comportamiento de la torre. En cuanto a las desviaciones relativas reportadas para las condiciones de presión, se observa una similitud para ambos simuladores ya que los datos de entrada permanecen con valores fijados por el usuario.

De igual manera, se compara el comportamiento de la columna depropanizadora (D-6815), donde se obtuvieron las máximas desviaciones en cuanto al perfil de temperatura para ambos simuladores principalmente en la corriente de fondo de la torre. La máxima desviación de la presión se observa en la corriente de tope, igualmente para los dos paquetes según la tabla N° 20. Las desviaciones absolutas del perfil de temperatura y las desviaciones relativas en la presión, se encuentran dentro de los parámetros aceptables por lo que se considera que las simulaciones representan satisfactoriamente el comportamiento de la torre.

Al igual que en la columna debutanizadora, el simulador PROII arroja menores desviaciones, aunque la diferencia entre ambos simuladores es poco significativa.

Tabla N° 20: Validación de las condiciones de operación de la torre D-6815

Variable	Corte	Planta	HYSYS	D _{A,H}	PROII	D _{A,P}
Temperatura (°F)	Tope	136,0	141,4	5,4	141,4	5,4
	Fondo	217,3	208,4	8,9	210,0	7,4
Variable	Corte	Planta	HYSYS	%D _H	PROII	%D _P
Presión (Psig)	Tope	294,2	295,0	<1,0	295,0	<1,0
	Fondo	299,9	300,0	<1,0	300,0	<1,0

Por último, se estudia el comportamiento del despojador de ácido (D-6817), donde la mayor desviación se presentó en la corriente de tope respecto al perfil de temperatura resultando éste en 15,6 °F y 7,5 °F para HYSYS y PROII respectivamente. En cuanto al perfil de presión la desviación se mantiene en un valor del 0,6% para el tope y fondo en ambos simuladores como se nota en la tabla N° 21. De la misma manera que en las torres analizadas anteriormente, en el simulador PROII las condiciones de operación permanecen en un valor más cercano al real respecto a HYSYS.

Tabla N° 21: Validación de las condiciones de operación de la torre D-6817

Variable	Corte	Planta	HYSYS	D _{A,H}	PROII	D _{A,P}
Temperatura (°F)	Tope	130,5	146,1	15,6	138,0	7,5
	Fondo	146,5	147,7	1,2	146,4	0,1
Variable	Corte	Planta	HYSYS	%D _H	PROII	%D _P
Presión (Psig)	Tope	315,2	315,0	<1,0	315,0	<1,0
	Fondo	320,2	320,0	<1,0	320,0	<1,0

IV.5. DETERMINACIÓN DE LA EFICIENCIA REAL DE PLATO EN LAS TORRES

Debido a que los simuladores trabajan con etapas ideales y los datos proporcionados en la refinería corresponden a condiciones reales, se realizó el siguiente análisis utilizando eficiencias de 0,6; 0,8 y 1,0 para comprobar la eficiencia real de los platos en las torres D-6810, D-6815 y D-6817 para el caso base y con los parámetros seleccionados en la sección anterior, es decir, para las ecuaciones de estado PRSV y PRH en HYSYS y PROII respectivamente. Cabe destacar que todos los resultados obtenidos hasta el momento fueron trabajados con una eficiencia de 0,8 en cada plato por ser un valor típico de eficiencia global de columna. En las tablas N° 22 y 23 se presentan estos cambios.

Tabla N° 22: Selección de la eficiencia en las torres para el simulador HYSYS con la ecuación de estado seleccionado PRSV

Compuestos	Planta (BD)	Flujos Volumétricos (BD)					
		e = 0,6	% D _{rel.}	e = 0,8	% D _{rel.}	e = 1,0	% D _{rel.}
iC ₄ (D-6810)	68670	66340	3,4	66581	3,0	66700	2,9
n-Butano (D-6810)	1561	527	66,3	535	65,7	527	66,3
Alquilato (D-6810)	14186	12866	9,3	12867	9,3	12866	9,3
Propano (D-6815)	22241	21372	3,9	22343	<1,0	22699	2,0

En el caso del simulador HYSYS, las mayores desviaciones en los compuestos de interés se presentaron al utilizar una eficiencia de platos de 0,6 aunque en general estas son menores al 10%, excepto por el corte de n-Butano el cual presenta discrepancia a causa de la temperatura como se explicó anteriormente, reflejándose en un aumento de la desviación relativa en el flujo. Cuando se utiliza una eficiencia del 100 % las desviaciones comparadas con las obtenidas con un 80% son muy cercanas aunque en general, los resultados son más próximos a los datos de planta utilizando la eficiencia de platos en las torres en 0,8 como se observa en la siguiente tabla.

Tabla N° 23: Selección de la eficiencia en las torres para el simulador PROII con la ecuación de estado seleccionado PRH

Compuestos	Planta (BD)	Flujos Volumétricos (BD)					
		e = 0,6 (BD)	% D _{rel.} 0,6	e = 0,8 (BD)	% D _{rel.} 0,8	e = 1,0 (BD)	% D _{rel.} 1,0
iC ₄ (D-6810)	68670	68897	<1,0	69114	< 1,0	69012	1,1
n-Butano (D-6810)	1561	1724	10,4	1629	4,4	1697	8,8
Alquilato (D-6810)	14186	12935	8,8	12954	8,7	1295	8,7
Propano (D-6815)	22241	20007	10,1	22470	1,0	23037	3,6

Para el simulador PROII, las máximas desviaciones en los componentes analizados se obtienen al usar una eficiencia de platos de 0,6, siguiendo la misma tendencia que HYSYS. Igualmente, los resultados son más exactos al emplear una eficiencia de 0,8 en su totalidad.

En general, las menores desviaciones se obtienen con el simulador PROII para las tres eficiencias estudiadas, ya que el error permanece en el rango establecido (< 10%) para las corrientes analizadas. Por lo tanto en el siguiente estudio del análisis de sensibilidad se trabajó con una eficiencia de 0,8 para ambos simuladores.

IV.6. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

En esta sección se analizó el comportamiento de la simulación frente a cambios en las variables críticas del proceso, tales como: relación de isobutano/olefina, relación ácido/hidrocarburo, temperatura de reacción y concentración de ácido en la alimentación al reactor, haciendo oscilar estos valores entre el mínimo y el máximo permitido para el proceso comparándolo con las relaciones que se obtienen de planta. Los cálculos respectivos para determinar los valores máximos y mínimos de estas variables están presentados en el anexo B.

Debido a las similitudes en los resultados obtenidos en el caso base para ambos simuladores, el estudio de sensibilidad se hizo tanto para HYSYS como para PROII.

IV.6.1. RELACIÓN ISOBUTANO/OLEFINA

La relación determinada para el caso base está en el rango de 11:1 quedando dentro de los límites especificados. En las tablas Nº 24 y 25 se representan los resultados de las validaciones del caso base para ambos paquetes, su intención es tener facilidad para las discusiones pertinentes.

Tabla Nº 24: Efecto de la variación de la relación isobutano/olefina en HYSYS

Compuestos	Planta (BD)	Mínimo 8:1 (BD)	Caso 11:1 (BD)	Máximo 14:1 (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	61239	66581	71604
n-Butano (D-6810)	1561	527	535	520
Alquilato (D-6810)	14186	12421	12867	13696
Propano (D-6815)	22241	5201	22343	22600
Alquilato (D-6803)	15813	13376	13572	13880

Cuando se utiliza la mínima relación de I/O tanto en PROII como en HYSYS, disminuye la cantidad de alquilato producido en la sección de reacción debido a que la cantidad de isobutano en la alimentación al reactor es menor y esta cantidad se ve obligada a reaccionar con la misma cantidad de las olefinas. Asimismo, disminuye el flujo volumétrico de la corriente de isobutano de reciclo, lo cual es lógico ya que se está procesando un menor flujo de alimentación a la torre empleando los mismos equipos bajo las mismas condiciones, y por lo tanto hay una menor recuperación.

Tabla N° 25: Efecto de la variación de la relación isobutano/olefina en PROII

Compuestos	Planta (BD)	Mínimo 8:1 (BD)	Caso 11:1 (BD)	Máximo 14:1 (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	63568	69114	74353
n-Butano (D-6810)	1561	1602	1629	1110
Alquilato (D-6810)	14186	12504	12954	13823
Propano (D-6815)	22241	5054	22470	22704
Alquilato (D-6803)	15813	13414	13610	13920

La corriente de alquilato proveniente del fondo de la torre debutanizadora, disminuye con la relación mínima debido a que la cantidad de alquilato producido en los reactores es menor, por consumirse una pequeña cantidad de isobutano, tal como se explicó anteriormente. La corriente de propano del tope de la depropanizadora, disminuye notablemente como se puede observar en la tabla antepuesta ya que la cantidad de propano producida por la reacción N° 18, descrita en el capítulo II ($C_3^- + iC_4 \longrightarrow iC_4^- + C_3$) es menor, además porque en la torre la separación de este componente al disminuir el flujo de alimentación es menos eficiente.

Al fijar la relación I/O en un valor de 14:1, se observan aumentos en la corriente producto de alquilato proveniente de la sección de reacción, esto se

explica ya que al incrementarse la carga al reactor, se garantiza que reaccionen todas las olefinas presentes en la alimentación. En cuanto a la cantidad de isobutano de reciclo, éste aumenta en unos 5000 BD, debido a que se ve afectada directamente al aumentar la cantidad de isobutano en la alimentación. La corriente de propano de la torre D-6815 presenta un aumento de aproximadamente 230 BD ya que el exceso de isobutano reacciona con el propileno para formar una mayor cantidad de propano.

IV.6.2. RELACIÓN ÁCIDO/HIDROCARBURO

La relación calculada para el caso base está en el rango de 1,9:1 quedando también dentro de los límites especificados. Los valores mínimos y máximos permisibles para esta relación son 1:1 y 2:1 respectivamente.

Para el valor mínimo de la relación HF/HC, en la tabla N° 26 se observa una disminución en el alquilato producido cercano a 600 BD, ya que a una menor relación, disminuye la calidad y cantidad de alquilato, dando origen a la formación de compuestos indeseables.

Tabla N° 26: Efecto de la variación de la relación ácido/hidrocarburo en HYSYS

Compuestos	Planta (BD)	Mínimo 1:1 (BD)	Caso 1,9:1 (BD)	Máximo 2:1 (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	66472	66581	66710
n-Butano (D-6810)	1561	532	535	580
Alquilato (D-6810)	14186	11668	12867	12888
Propano (D-6815)	22241	22472	22343	22525
Alquilato (D-6803)	15813	12987	13572	13601

Al fijar la relación en su valor máximo no se observa un aumento significativo en el alquilato, debido a que la relación calculada para los datos de planta se encuentra en el límite superior siendo éste de 1,9:1. Además, cuando

esta relación está cercana o por encima de su máximo, no se obtienen beneficios apreciables en la calidad de los productos tal como se observa en las tablas N° 27 y 28 para HYSYS y PROII respectivamente. Sin embargo, a medida que se incrementa esta relación la reacción olefina/hidrocarburo es mejor catalizada y reduce la reacción olefina/olefina. Es importante destacar, que para ambos simuladores la tendencia es la misma.

Tabla N° 27: Efecto de la variación de la relación ácido/hidrocarburo en PROII

Compuestos	Planta (BD)	Mínimo 1:1 (BD)	Caso 1,9:1 (BD)	Máximo 2:1 (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	69111	69114	69245
n-Butano (D-6810)	1561	1621	1629	1721
Alquilato (D-6810)	14186	11750	12954	12986
Propano (D-6815)	22241	22598	22470	22652
Alquilato (D-6803)	15813	13006	13610	13638

IV.6.3. TEMPERATURA DE REACCIÓN

Según los fundamentos teóricos, la temperatura mínima permitida en los reactores de alquilación es de 60 °F y la máxima de 120 °F, para el caso base se empleó una temperatura promedio de 101 °F.

Tabla N° 28: Efecto de la variación de la temperatura de reacción en HYSYS

Compuestos	Planta (BD)	Mínimo 60 °F (BD)	Base 101 °F (BD)	Máximo 120 °F (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	66333	66581	66270
n-Butano (D-6810)	1561	563	535	505
Alquilato (D-6810)	14186	12928	12867	12880
Propano (D-6815)	22241	22430	22343	22431
Alquilato (D-6803)	15813	13592	13572	13655

Tabla N° 29: Efecto de la variación de la temperatura de reacción en HYSYS

Compuestos	Planta (BD)	Mínimo 60 °F (BD)	Base 101 °F (BD)	Máximo 120 °F (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	69116	68670	69116
n-Butano (D-6810)	1561	1630	1561	1630
Alquilato (D-6810)	14186	12961	14186	12951
Propano (D-6815)	22241	22530	22241	22506
Alquilato (D-6803)	15813	13619	13610	13608

Para ambos simuladores, al emplear una temperatura de 60 °F, aumenta la producción de alquilato como se aprecia en las tablas N° 28 y 29, por ser la reacción de tipo exotérmico. El inconveniente de usar bajas temperaturas de reacción, es el incremento de la formación de fluoruros, el cual no se ve reflejado ya que estas reacciones no se tomaron en cuenta en las simulaciones.

Al fijar la temperatura de reacción en 120 °F, disminuye la cantidad de alquilato producido en esta sección, además de un aumento en el consumo de isobutano por la naturaleza exotérmica de la reacción. Es importante señalar que el efecto del cambio de temperatura en la velocidad de reacción no se ve reflejado en los resultados ya que la constante cinética fue determinada a una temperatura específica sin realizar variaciones en ella, únicamente se puede apreciar el efecto termodinámico.

IV.6.4. CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO

En base a la revisión bibliográfica, la concentración mínima de ácido para el proceso de alquilación es de 88% y la máxima de 92%. Sin embargo, de acuerdo a los datos de planta suministrados por la refinera, la concentración utilizada para el caso base es de 99%, por lo tanto el análisis de sensibilidad se efectuó solamente para el valor mínimo de concentración de HF como se muestra en la tabla N° 30.

De los compuestos más importantes seleccionados, no se observaron cambios notables, salvo ligeras disminuciones en el orden de los 100 BD excepto en la corriente de n-Butano. El que la producción de alquilato se mantenga casi constante, se debe a que no se consideraron en las simulaciones del caso base las reacciones de formación de fluoruros como se explicó anteriormente, estas se incrementan ante una baja concentración de ácido, lo cual es originado cuando existe un alto porcentaje de agua en la alimentación. Sin embargo, esta pequeña variación puede explicarse también ya que se cataliza un menor número de reacciones de alquilación.

Tabla N° 30: Efecto de la variación de la concentración de ácido

Compuestos	Planta (BD)	HYSYS		PROII	
		Mínimo 88% (BD)	Caso 99% (BD)	Mínimo 88% (BD)	Caso 99% (BD)
iC ₄ (D-6810)	68670	66570	66581	69107	68670
n-Butano (D-6810)	1561	536	535	1621	1561
Alquilato (D-6810)	14186	12862	12867	12949	14186
Propano (D-6815)	22241	22457	22343	22594	22241
Alquilato (D-6803)	15813	13549	13572	13585	15813

Todos los resultados representados en las tablas anteriores para el análisis y discusión de resultados fueron obtenidas a través de las simulaciones del caso base tanto para HYSYS como para PROII reportadas en el anexo D y E respectivamente.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

De acuerdo a los objetivos planteados y en función de los alcances de los objetivos logrados en el presente Trabajo Especial de Grado, se presentan a continuación las conclusiones y recomendaciones pertinentes.

- ✓ En el análisis teórico de los simuladores, el paquete de simulación HYSYS tiene diversas ventajas sobre PROII en cuanto a la velocidad de las corridas, presentación de los reportes, capacidad de funcionar en estado dinámico y en el fácil manejo para el usuario.
- ✓ Cuando se disponen de datos cinéticos, el reactor más apropiado para representar la sección de reacción es el reactor flujo pistón tanto para PROII como para HYSYS.
- ✓ La producción de alquilato aumenta al variar la fracción volumétrica de hidrocarburo desde su valor mínimo hasta el máximo, utilizando un diámetro de gota promedio de 10 μm .
- ✓ La caída de presión en el reactor no influye en la producción de alquilato.
- ✓ La selección del modelo termodinámico no afecta los resultados de la producción de alquilato en la sección de reacción.
- ✓ El arreglo que permite aproximarse más a los datos de planta es de dos trenes en paralelo con ocho reactores flujo pistón de igual volumen en serie cada uno.
- ✓ El modelo termodinámico más adecuado para el proceso de alquilación en el paquete de simulación PROII es la ecuación de estado Peng Robinson Huron Vidal.

- ✓ El modelo termodinámico más adecuado para el proceso en el paquete de simulación HYSYS es la ecuación de estado Peng Robinson Stryjek Vera.
- ✓ Aunque la desviación de los resultados dados por HYSYS y PROII son satisfactorias, PROII es el simulador que más se aproxima a los datos de planta.
- ✓ Para el estudio de columnas de destilación, es recomendable el uso de PROII.
- ✓ El comportamiento de las torres en cuanto a condiciones de operación es representado satisfactoriamente por los simuladores, siendo PROII más apropiado.
- ✓ La desviación en el corte lateral de n-Butano arrojada por el simulador HYSYS se debe a limitaciones del modelo termodinámico que originan un cambio brusco en el perfil de temperatura.
- ✓ La eficiencia real aproximada de los platos en las torres debutanizadora, depropanizadora y despojador de ácido obtenida es de 0,8.
- ✓ Altas relaciones de isobutano/olefinas favorecen la producción de alquilato y aumentan la recuperación de isobutano.
- ✓ Se comprobó que la reacción de alquilación se ve favorecida a bajas temperaturas no menores de 60 °F, al no tomar en cuenta el efecto cinético.
- ✓ Altas relaciones de ácido/hidrocarburo no proporcionan beneficios apreciables en la calidad de los productos, aunque relaciones bajas disminuyen notablemente la cantidad y calidad del alquilato.

- ✓ La concentración de ácido dentro del rango establecido no presenta variaciones apreciables en la cantidad de alquilato. Sin embargo, en planta al usar bajas concentraciones se favorecen la formación de fluoruros.
- ✓ Se recomienda realizar un análisis similar al realizado en este Trabajo especial de Grado para otros simuladores y otros procesos de manera de crear una base de datos donde se indique qué simulador es más apropiado para un proceso específico según las necesidades que se tengan en el momento, tal como lo refirió la Bachiller Natalia García en su Trabajo Especial de Grado titulado "Comparación y Evaluación de HYSYS y PROII en la simulación del proceso de Isomerización".
- ✓ Se recomienda realizar una simulación en procesos que presenten condiciones extremas bien sean procesos de refinación, petroquímicos o de la industria química, donde sus equipos no son fácilmente simulables, evaluando así el comportamiento de éstos ante dichas situaciones.
- ✓ Se recomienda también realizar una sub-rutina en PROII para determinar las constantes cinéticas de las reacciones de alquilación basándose en los resultados obtenidos en INTEVEP y posteriormente compararlos con HYSYS.
- ✓ Es aconsejable realizar un estudio sobre el efecto de la variación de la temperatura de reacción sobre las constantes cinéticas, para así obtener expresiones de éstas en función de la temperatura, y de esta manera llegar a resultados más aproximados a la realidad al variar las condiciones de operación.
- ✓ Se deben reproducir las constantes cinéticas utilizando datos de planta diferentes a los del modelo, y de esta manera realizar los ajustes necesarios en los valores actualmente disponibles.

- ✓ Se propone además estudiar el comportamiento de las torres empleando valores de eficiencia por platos distintos a los seleccionados, pero que se encuentren dentro del rango estudiado.

BIBLIOGRAFÍA

-
- ✓ ALBRIGHT, L. F.; *Purdue University*. Personal communication, 2000.
 - ✓ CARBERRY, J. J. *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*. New York, 1976.
 - ✓ DEER, E. and DEAL, C. *Inst. Chem. Eng. Symp*, 1969.
 - ✓ GARCÍA, N. *Comparación y evaluación de Hysys y Pro II en la simulación de Procesos*. Trabajo Especial de Grado, UCV, 1999.
 - ✓ GODFREY, J.C.; Obi, F.I.N.; Reeve, R. N.; *Measuring Drop Size in Continuous Liquid-Liquid Mixers*. Chem. Eng. Progress, Dec. 1989.
 - ✓ HANSEN, H., RASMUSSEN, P. and FREDENSLUND, A. *Vapor-liquid equilibria by UNIFAC group contribution*, 1991.
 - ✓ HARRIS, R. *Chem. Eng*, 1972.
 - ✓ HOFFMAN, H. *Hidrofluoric Acid Alkylation*. Hydrocarbon Processing. November 2000.
 - ✓ HURON, M. and VIDAL, J. *New Mixing Rules in Simple Equations of state for representing Vapor-Liquid equilibria of Strongly non-ideal mixtures*, 1979.
 - ✓ HYPROTECH. *Manual de HYSYS*. Versión 1.1. Volumen 1 y 2, 1999.
 - ✓ KABADI, N and DANNER, R. *A Modified Soave-Redlich-Kwong equation of state for water-hydrocarbon phase equilibria*. Volume 24. Nº 3, 1985.
 - ✓ PACEK, A.; CHAMSART, S.; NIENOW, A and BAKKER, A. *The Influence of Impeller Type on Mean Drop Size and Drop Size Distribution in an Agitated Vessel*. Chem. Eng. Sci., 54, 1999.
 - ✓ PACHECO, M. y CALDERÓN, L. *Desarrollo técnico de un modelo riguroso para las secciones de reacción y separación de la Unidad de Alquilación de la Refinería el Palito*. INTEVEP, 2001.
 - ✓ Refinería El Palito. *Manual del proceso de Alquilación*, 2000.

- ✓ REF. *Datos de planta suministrados por la refinería El Palito*, 2000.
- ✓ SIMSCI. *Manual de PRO II. User's Guide*. Versión 5, 1997.
- ✓ UOP HF Alkylation Process. *General Operating Manual*. PDVSA, El Palito Refinery, Venezuela, Julio 21-23, 1998.
- ✓ VAN WOEZIK, B. and WESTERTERP, K. *Measurement of Interfacial Areas with the Chemical Method for a System with Alternating Dispersed Phases*. Chem. Eng. And Processing, 2000.
- ✓ ZABOLOTNYJ, M. *Efectos del incremento de la carga en la Unidad de Alquilación y factibilidad de producción de isobutano en la Refinería el Palito*. Trabajo Especial de Grado. Universidad de Carabobo. Valencia, Marzo de 2001.

ANEXOS

ANEXO A: TABLAS DE DATOS

En esta sección se muestran los datos pertenecientes al proceso de alquilación de la Refinería El Palito.

A.1. CONDICIONES DE LAS CORRIENTES DE ALQUILACIÓN

A continuación, en las tablas N° 31, 32, y 33, se muestran las características de las corrientes a simular de la Unidad de Alquilación proporcionados por la Refinería El Palito en el mes de Octubre del 2000.

Tabla N° 31: Características de las corrientes intermedias para la validación de la simulación a condiciones actuales de operación.

Componentes	Isobutano de Reciclo del D-6810 (BPD)	Isobutano del D-6815 al D-6809 (BPD)	Reflujo al D-6810 (BPD)	Reflujo al D-6815 (BPD)
Propano	4361,00	39,95	5060,52	19496,44
Isobutano	68669,85	4135,04	19152,83	303,70
n-Butano	5322,18	523,55	1003,41	0,24
Isopentano	889,17	-	23,00	-
Pentano	59,64	-	0,72	-
Agua	3,99	-	0,89	-
Alquilato	786,41	-	-	-
HF	2,39	-	0,25	144,95
C6 ⁺	22,04	-	-	-
Flujo Total (BPD)	79227,51	4698,53	25241,62	19945,33
Temperatura (°F)	167	450	166	100
Presión (psig)	146	150	303	
Fracción Líquida	0,00	0,00	0,00	0,9999

Fuente: [REF, 2000]

Tabla N° 32: Características de las corrientes de alimentación para la validación de la simulación a condiciones actuales de operación.

Componentes	Alimentación de olefinas (BPD)	Isobutano de reposición (BPD)	Isobutano de reciclaje (BPD)	Ácido Fluorhídrico (BPD)
Propano	1907,80	118,96	7735,08	-
Propeno	4149,52	-	-	-
Isobutano	3216,20	8221,81	83010,20	-
n-Butano	1299,02	344,38	5974,89	-
1-Buteno	980,77	-	-	-
Isobutileno	170,89	-	-	-
Trans-2-Buteno	1402,00	-	-	-
Isopentano	1641,47	6,84	1141,53	-
Cis-2-Buteno	1083,36	-	-	-
n-Pentano	221,82	-	-	-
1-Penteno	81,73	-	-	-
Trans-2-Penteno	319,17	-	-	-
Cis-2-Penteno	71,30	-	-	-
3-metil-1-Buteno	79,93	-	-	-
2-metil-1-Bueno	88,70	-	-	-
2-metil-2-Buteno	104,27	-	-	-
C6 ⁺	-	-	751,98	-
Agua	-	-	-	1121,96
Ácido Fluorhídrico	-	-	-	220451,38
Flujo Total (BPD)	16817,94	8691,99	98613,7	221573,34
Temperatura (°F)	101,00	101,00	101,00	101,00
Presión (Psig)	230,00	230,00	230,00	230,00
Peso Molecular	48,97	57,83	57,10	-

Fuente: [REF, 2000]

Tabla N° 33: Condiciones de operación de las torres de fraccionamiento para la validación de la simulación a condiciones actuales de operación.

Condiciones de Operación		D-6810	D-6815	D-6817
Flujos	Fondo (BPD)	16973,28	20407,30	2790,42
	n-Butano (BPD)	1913,78	-	-
	Tope (BPD)	54904,97	22762,18	499,73
Temperatura (°F)	Tope	133,71	136,00	130,52
	Fondo	371,73	217,30	146,51
	Rehervidor	387,7	217,30	149,00
Presión (Psig)	Tope	142,96	294,17	315,16
	ΔP	8	5	5

Fuente: [REF, 2000]

ANEXO B: CÁLCULOS TIPOS

Para lograr una mayor comprensión y entendimiento del presente Trabajo Especial de Grado, se presentan en esta sección los cálculos tipos necesarios para realizar las simulaciones tanto en HYSYS como en PROII de la Unidad de Alquiler de la Refinería el Palito.

B.1. CASO BASE

A continuación, se presentan los cálculos tipos requeridos para las corridas de las simulaciones realizadas, para así conformar una plataforma que sirva de apoyo para el alcance de los objetivos planteados en el Trabajo Especial de Grado.

B.1.1. BALANCE DE MASA

Para lograr el balance de masa global de la Unidad se consideraron las fronteras de la planta, donde los flujos volumétricos en barriles por día de las alimentaciones corresponden a los códigos C₁, C₂ y C₃ y las Salidas S₅₈, S₅₉, S₈₉, S₁₀₀ y S₁₀₄ como se puede observar la ecuación N° 26. Para llevar los flujos volumétricos a másicos se utiliza la ecuación N° 25:

$$F = \frac{F_j \times \%Vol_k \times \rho_t}{PM_m \times \left(\frac{1}{42}\right) \times 100} \quad (25)$$

Donde:

F: moles totales de cada corriente, Lbmol.

F_j: flujo volumétrico de cada corriente, BD.

%V_k: porcentaje de olefinas e isobutano alimentados al reactor, adm.

ρ_t: densidad de las corrientes, Lb/gal

PM_m: peso molecular de las corrientes, Lb/Lbmol.

$$C_1 + C_2 = S_{58} + S_{59} + S_{89} + S_{104} \quad (26)$$

Donde:

C_1 : isobutano de reposición, Lb/h

C_2 : alimentación de olefinas, Lb/h

S_{58} : fondo del D-6810, Lb/h

S_{59} : butano a almacenaje, Lb/h

S_{89} : fondo del D-6817, Lb/h

S_{104} : fondo del D-6809, Lb/h

$$71334,32 + 139573,00 = 174427,37 + 16896,97 + 20648,82 + 12338,07$$

$$210907,32 \text{ Lb/h} = 210907,89 \text{ Lb/h}$$

$$\% \text{ Variación} = 2,7 \text{ E-4}\%$$

Este mismo procedimiento se consideró para realizar el balance de masa por equipo, los cuales son: reactor, asentador, torres debutanizadora y depropanizadora, despojador de ácido y regenerador de ácido. Solamente se calculará como ejemplo el balance de masa al reactor de conversión de la Unidad.

✓ Reactor D-6803/04/05/06:

$$C_4 + S_{96} = C_{41}$$

Donde:

C_4 : ácido total al reactor, Lb/h

S_{96} : mezcla de olefinas e isobutano total al sistema, Lb/h

S_{41} : Salida del reactor, Lb/h

$$1019873,00 + 3156158,29 = 4175935,10$$

$$4176031,29 \text{ Lb/h} = 4175935,10 \text{ Lb/h}$$

$$\% \text{ Variación} = 2,3 \text{ E-3}\%$$

B.1.2. DETERMINACIÓN TEÓRICA DEL ALQUILATO

Según reporte de la UOP, la producción teórica de alquilato en la Unidad de Alquilación es equivalente a la cantidad de olefinas alimentadas a la misma, esta relación viene dada por:

$$\text{Propilenos:} \quad FC_7^+ = 1,76 \times \text{olefina (C}_3^-) \quad (27)$$

$$\text{Butilenos:} \quad FC_8^+ = 1,77 \times \text{olefina (C}_4^-) \quad (28)$$

$$\text{Amilenos:} \quad FC_9^+ = 1,70 \times \text{olefina (C}_5^-) \quad (29)$$

Donde:

FC_7^+ : flujo de alquilato producido según la cantidad de propilenos alimentados, BD

FC_8^+ : flujo de alquilato producido según la cantidad de butilenos alimentados, BD

FC_9^+ : flujo de alquilato producido según la cantidad de amilenos alimentados, BD

A partir de las ecuaciones N° 27, 28 y 29, respectivamente y tomando los datos de la tabla N° 32, se tiene:

$$FC_7^+ = 1,76 \times 4149,52 = 7303,16 \text{ BD}$$

De igual manera se obtienen los flujos de alquilatos C_8^+ y C_9^+ producidos a partir de los butilenos y amilenos. Para obtener la cantidad total de alquilato producido en la Unidad, se considera el alquilato producido según la cantidad de olefinas alimentadas tomadas de la tabla N° 32, más la cantidad de alquilato contenido en el isobutano de reciclo, cuyo dato será tomado de la tabla N° 33.

$$A_T = \sum (FC_7^+ + FC_8^+ + FC_9^+ + F_{\text{reciclo}}) \quad (30)$$

Donde:

A_T : alquilato total, BD

F_{reciclo} : flujo de alquilato contenido en el isobutano de reciclo, BD

$$A_T = 7303,16 + 6920,63 + 802,62 + 786,41 = 15812,82 \text{ BD}$$

B.1.3. VOLUMEN REAL DEL REACTOR

Como los reactores son de forma cilíndrica, se utilizará para el cálculo del mismo la siguiente ecuación:

$$V = \pi \times D^2 \times L \times N^{\circ} \text{ tubos} / 4 \quad (31)$$

Donde:

D: 1,524 m

L: 8,534 m

Nº tubos: 1

Sustituyendo estos datos a la ecuación queda que el volumen total del reactor es:

$$V = \pi \times (1,524 \text{ m})^2 \times 8,534 \text{ m} / 4 = 15,568 \text{ m}^3$$

El siguiente paso es calcular el volumen que ocupan los tubos considerando que el diámetro de los tubos es 0,019 m, la longitud que éstos ocupan es el doble por estar colocados en U y además están formados por 134 tubos.

$$V_{\text{Tubos}} = \pi \times 0,019^2 \times 17,069 \times 134 / 4 = 0,652 \text{ m}^3$$

El volumen real del reactor, es la diferencia entre el volumen total y el volumen que ocupan los tubos quedando 14,915 m³. Este volumen calculado se divide en ocho partes iguales para utilizarlo finalmente en las simulaciones respectivas quedando un volumen de 1,86 m³ cada reactor.

B.1.4. CÁLCULO DE LAS VELOCIDADES DE REACCIÓN

Para calcular la velocidad de reacción, se debe conocer la relación del área interfacial por volumen total de emulsión mediante la ecuación N° 23 del Capítulo II y apoyado en la figura N° 1 donde se leyeron ocho valores de la fracción volumétrica de hidrocarburo en la emulsión (ϵ) que varían desde 0,06 hasta 0,36. La ecuación es: $a/V_e = 6 \times \epsilon / d_g$ donde d_g es el diámetro de gota promedio (10 μm ; 45 μm y 85,3 μm).

$$a/V_e = 6 \times 0,06 / 1,00 \text{ E-5 m} = 3,60 \text{ E+04 m}$$

A continuación se presenta la tabla de datos N° 34 construída variando ϵ y el diámetro de gota promedio.

Tabla N°34: Relación entre el área interfacial por unidad de volumen total de emulsión

Fracción volumétrica de hidrocarburo en la emulsión (adimensional)								
	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4	ϵ_5	ϵ_6	ϵ_7	ϵ_8
	0,06	0,13	0,17	0,21	0,26	0,29	0,32	0,36
D_g (μm)	$a/V_{\epsilon 1}$	$a/V_{\epsilon 2}$	$a/V_{\epsilon 3}$	$a/V_{\epsilon 4}$	$a/V_{\epsilon 5}$	$a/V_{\epsilon 6}$	$a/V_{\epsilon 7}$	$a/V_{\epsilon 8}$
85,3	4,22E+03	9,14E+03	1,20E+04	1,48E+04	1,83E+04	2,04E+04	2,25E+04	2,53E+04
45	8,00E+03	1,73E+04	2,27E+04	2,80E+04	3,47E+04	3,87E+04	4,27E+04	4,80E+04
10	3,60E+04	7,80E+04	1,02E+05	1,26E+05	1,56E+05	1,74E+05	1,92E+05	2,16E+05

A partir de la ecuación N° 22 y la tabla N° 34 se calcularon las constantes volumétricas de reacción que tienen unidades por unidad de volumen de fase hidrocarburo ($\text{Kmol/s m}^3_{\text{HC}}$), y las concentraciones de los reactantes tienen unidades de $\text{Kmol/m}^3_{\text{HC}}$. Estas constantes se usarán como datos de entrada en la sección de reacción de los simuladores como se muestra a continuación:

$$r_{j,v} = (a/V_e)k_j C_A C_B$$

Donde:

$$a/V_{e1} = 3,60 \text{ E+4 m}^{-1}$$

$$k_1 = 6,62 \text{ E-6 m}^4/\text{Kmol S}$$

Por lo tanto, la constante cinética en unidades consistentes con las del simulador, se calcula como sigue:

$$k_1' = 3,60\text{E+4m}^{-1} \times 6,62 \text{ E-6 m}^4/\text{Kmol S} = 0,237\text{m}^3/\text{Kmol.s}$$

Cuando se incorporan estos parámetros en la ecuación de velocidad de reacción se consiguen las unidades consistentes de la constante cinética el cual será aplicado directamente en las simulaciones. En las tablas N° 35, 36 y 37 se generaron los datos de las constantes cinéticas variando el diámetro de gota promedio para el estudio de la sección de reacción.

Tabla N° 35: Valores de la constante cinética para un diámetro de gota promedio de 85,3 μm variando a/V_{ϵ}

	K_i INTEVEP	$a/V_{\epsilon 1}$	$a/V_{\epsilon 2}$	$a/V_{\epsilon 3}$	$a/V_{\epsilon 4}$	$a/V_{\epsilon 5}$	$a/V_{\epsilon 6}$	$a/V_{\epsilon 7}$	$a/V_{\epsilon 8}$
$K_{i1} =$	6,62E-6	2,79E-2	6,05E-2	7,92E-2	9,78E-2	1,21E-1	1,35E-1	1,49E-1	1,68E-1
$K_{i2} =$	3,44E-6	1,45E-2	3,15E-2	4,11E-2	5,08E-2	6,29E-2	7,02E-2	7,74E-2	8,71E-2
$K_{i3} =$	5,62E-6	2,37E-2	5,14E-2	6,72E-2	8,30E-2	1,03E-1	1,15E-1	1,26E-1	1,42E-1
$K_{i4} =$	8,00E-7	3,38E-3	7,32E-3	9,57E-3	1,18E-2	1,46E-2	1,63E-2	1,80E-2	2,03E-2
$K_{i5} =$	3,53E-6	1,49E-2	3,23E-2	4,22E-2	5,21E-2	6,46E-2	7,20E-2	7,95E-2	8,94E-2
$K_{i6} =$	6,04E-6	2,55E-2	5,52E-2	7,22E-2	8,92E-2	1,10E-1	1,23E-1	1,36E-1	1,53E-1
$K_{i7} =$	7,31E-6	3,09E-2	6,68E-2	8,74E-2	1,08E-1	1,34E-1	1,49E-1	1,65E-1	1,85E-1
$K_{i8} =$	6,40E-7	2,70E-3	5,85E-3	7,65E-3	9,45E-3	1,17E-2	1,31E-2	1,44E-2	1,62E-2
$K_{i9} =$	8,90E-7	3,76E-3	8,14E-3	1,06E-2	1,31E-2	1,63E-2	1,82E-2	2,00E-2	2,25E-2
$K_{i10} =$	2,62E-6	1,11E-2	2,40E-2	3,13E-2	3,87E-2	4,79E-2	5,34E-2	5,90E-2	6,63E-2
$K_{i11} =$	3,21E-6	1,35E-2	2,94E-2	3,84E-2	4,74E-2	5,87E-2	6,55E-2	7,23E-2	8,13E-2
$K_{i12} =$	5,30E-6	2,24E-2	4,85E-2	6,34E-2	7,83E-2	9,69E-2	1,08E-1	1,19E-1	1,34E-1
$K_{i13} =$	4,73E-6	2,00E-2	4,33E-2	5,66E-2	6,99E-2	8,65E-2	9,65E-2	1,06E-1	1,20E-1

Tabla N° 36: Valores de la constante cinética para un diámetro de gota promedio de 45 μm variando a/V_ϵ

	K_i INTEVEP	$a/V_{\epsilon 1}$	$a/V_{\epsilon 2}$	$a/V_{\epsilon 3}$	$a/V_{\epsilon 4}$	$a/V_{\epsilon 5}$	$a/V_{\epsilon 6}$	$a/V_{\epsilon 7}$	$a/V_{\epsilon 8}$
$K_{i1} =$	6,62E-6	5,30E-2	1,15E-1	1,50E-1	1,85E-1	2,29E-1	2,56E-1	2,82E-1	3,18E-1
$K_{i2} =$	3,44E-6	2,75E-2	5,96E-2	7,80E-2	9,63E-2	1,19E-1	1,33E-1	1,47E-1	1,65E-1
$K_{i3} =$	5,62E-6	4,50E-2	9,74E-2	1,27E-1	1,57E-1	1,95E-1	2,17E-1	2,40E-1	2,70E-1
$K_{i4} =$	8,00E-7	6,40E-3	1,39E-2	1,81E-2	2,24E-2	2,77E-2	3,09E-2	3,41E-2	3,84E-2
$K_{i5} =$	3,53E-6	2,82E-2	6,12E-2	8,00E-2	9,88E-2	1,22E-1	1,36E-1	1,51E-1	1,69E-1
$K_{i6} =$	6,04E-6	4,83E-2	1,05E-1	1,37E-1	1,69E-1	2,09E-1	2,34E-1	2,58E-1	2,90E-1
$K_{i7} =$	7,31E-6	5,85E-2	1,27E-1	1,66E-1	2,05E-1	2,53E-1	2,83E-1	3,12E-1	3,51E-1
$K_{i8} =$	6,40E-7	5,12E-3	1,11E-2	1,45E-2	1,79E-2	2,22E-2	2,47E-2	2,73E-2	3,07E-2
$K_{i9} =$	8,90E-7	7,12E-3	1,54E-2	2,02E-2	2,49E-2	3,09E-2	3,44E-2	3,80E-2	4,27E-2
$K_{i10} =$	2,62E-6	2,10E-2	4,54E-2	5,94E-2	7,34E-2	9,08E-2	1,01E-1	1,12E-1	1,26E-1
$K_{i11} =$	3,21E-6	2,57E-2	5,56E-2	7,28E-2	8,99E-2	1,11E-1	1,24E-1	1,37E-1	1,54E-1
$K_{i12} =$	5,30E-6	4,24E-2	9,19E-2	1,20E-1	1,48E-1	1,84E-1	2,05E-1	2,26E-1	2,54E-1
$K_{i13} =$	4,73E-6	3,78E-0	8,20E-2	1,07E-1	1,32E-1	1,64E-1	1,83E-1	2,02E-1	2,27E-1

Tabla N° 37: Valores de la constante cinética para un diámetro de gota promedio de 10 μm variando a/V_ϵ

	K_i INTEVEP	$a/V_{\epsilon 1}$	$a/V_{\epsilon 2}$	$a/V_{\epsilon 3}$	$a/V_{\epsilon 4}$	$a/V_{\epsilon 5}$	$a/V_{\epsilon 6}$	$a/V_{\epsilon 7}$	$a/V_{\epsilon 8}$
$K_{i1} =$	6,62E-6	2,38E-1	5,16E-1	6,75E-1	8,34E-1	1,03E+0	1,15E+0	1,27E+0	1,43E+0
$K_{i2} =$	3,44E-6	1,24E-1	2,68E-1	3,51E-1	4,33E-1	5,37E-1	5,99E-1	6,60E-1	7,43E-1
$K_{i3} =$	5,62E-6	2,02E-1	4,38E-1	5,73E-1	7,08E-1	8,77E-1	9,78E-1	1,08E+0	1,21E+0
$K_{i4} =$	8,00E-7	2,88E-2	6,24E-2	8,16E-2	1,01E-1	1,25E-1	1,39E-1	1,54E-1	1,73E-1
$K_{i5} =$	3,53E-6	1,27E-1	2,75E-1	3,60E-1	4,45E-1	5,51E-1	6,14E-1	6,78E-1	7,62E-1
$K_{i6} =$	6,04E-6	2,17E-1	4,71E-1	6,16E-1	7,61E-1	9,42E-1	1,05E+0	1,16E+0	1,30E+0
$K_{i7} =$	7,31E-6	2,63E-1	5,70E-1	7,46E-1	9,21E-1	1,14E+0	1,27E+0	1,40E+0	1,58E+0
$K_{i8} =$	6,40E-7	2,30E-2	4,99E-2	6,53E-2	8,06E-2	9,98E-2	1,11E-1	1,23E-1	1,38E-1
$K_{i9} =$	8,90E-7	3,20E-2	6,94E-2	9,08E-2	1,12E-1	1,39E-1	1,55E-1	1,71E-1	1,92E-1
$K_{i10} =$	2,62E-6	9,43E-2	2,04E-1	2,67E-1	3,30E-1	4,09E-1	4,56E-1	5,03E-1	5,66E-1
$K_{i11} =$	3,21E-6	1,16E-1	2,50E-1	3,27E-1	4,04E-1	5,01E-1	5,59E-1	6,16E-1	6,93E-1
$K_{i12} =$	5,30E-6	1,91E-1	4,13E-1	5,41E-1	6,68E-1	8,27E-1	9,22E-1	1,02E+0	1,14E+0
$K_{i13} =$	4,73E-6	1,70E-1	3,69E-1	4,82E-1	5,96E-1	7,38E-1	8,23E-1	9,08E-1	1,02E+0

B.2. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Este análisis se realiza al modelo seleccionado del caso base en ambos simuladores, para efecto de los cálculos tipos se usaran los resultados del simulador PROII.

B.2.1. CÁLCULO DE LA RELACIÓN ISOBUTANO/OLEFINA

Tomando la ecuación N° 25 del Capítulo II, y los valores de la tabla N° 31 se obtiene la relación I/O donde los barriles de isobutano por barriles de olefina que entra al reactor es:

$$I/O = (A + B + C)/(D + E + F)$$

Donde:

A: moles de iC_4 presentes en la alimentación de olefinas, BD

B: moles de iC_4 presentes en la alimentación de isobutano de reposición, BD

C: moles de iC_4 presentes en el isobutano de reciclo, BD

D: moles de propilenos presentes en la alimentación de olefinas, BD

E: moles de butilenos presentes en la alimentación de olefinas, BD

F: moles de amilenos presentes en la alimentación de olefinas, BD

$$E = (980,77 + 170,89 + 1402,00 + 1083,36 + 79,93 + 88,70 + 104,27) \text{ BD}$$

$$E = 3909,92 \text{ BD}$$

$$F = (81,73 + 319,17 + 71,3) \text{ BD} = 472,20 \text{ BD}$$

$$I/O = (3216,20 + 83010,20 + 8221,81)/(4149,52 + 3909,92 + 472,20)$$

$$I/O = 11,07$$

B.2.1.1. Valor mínimo para la relación isobutano/olefina

Como la relación mínima es 8:1 se realiza el cálculo de la siguiente manera:

$$I/O = 8/1 \longrightarrow \text{Isobutano} = 8 \times \text{Olefinas} = 8 \times (D + E + D)$$

$$\text{Isobutano}_{\text{mínimo}} = 8 \times (4149,52 + 3909,92 + 472,20) = 68253,12 \text{ BD}$$

B.2.1.2. Valor máximo para la relación isobutano/olefina

Como la relación máxima es 14:1 se realiza el cálculo de la siguiente manera:

$$I/O = 14/1 \longrightarrow \text{Isobutano} = 14 \times \text{Olefinas} = 14 \times (D + E + D)$$

$$\text{Isobutano}_{\text{máximo}} = 14 \times (4149,52 + 3909,92 + 472,20) = 119442,96 \text{ BD}$$

B.2.2. CÁLCULO DE LA RELACIÓN ÁCIDO/HIDROCARBURO

Considerando la siguiente ecuación y los valores de la tabla N° 31 se obtiene la relación HF/HC donde los barriles de ácido por barriles de hidrocarburo que entran al reactor es:

$$\text{HF/HC} = \frac{\text{Flujo volumétrico de ácido circulante}}{\text{Flujo vol. de olefinas alim.} + \text{Flujo vol. de } iC_4 \text{ corriente de reciclo}}$$

$$\text{HF/HC} = 221573,34 / (16817,94 + 98613,7) = 1,92$$

B.2.2.1. Valor mínimo para la relación ácido/hidrocarburo

Como la relación mínima es 1:1 se realiza el cálculo de la siguiente manera:

$$\text{HF/HC} = 1/1 \longrightarrow \text{Ácido} = 1 \times \text{Hidrocarburos} = (16817,94 + 98613,7)$$

$$\text{Flujo volumétrico de ácido}_{\text{mínimo}} = 115432,64 \text{ BD}$$

B.2.2.2. Valor máximo para la relación isobutano/olefina

Como la relación máxima es 2:1 se realiza el cálculo de la siguiente manera:

$$\text{HF/HC} = 2/1 \longrightarrow \text{Ácido} = 2 \times \text{Hidrocarburos} = 2 \times (16817,94 + 98613,7)$$

$$\text{Flujo volumétrico de ácido}_{\text{máximo}} = 230863,28 \text{ BD}$$

B.2.3. CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO

Considerando la ecuación N° 32 y los datos de la tabla N° 27 se obtiene la concentración de ácido fluorhídrico donde en barriles días.

$$\% \text{ Ácido} = \text{Vol HF} / (\text{Vol HF} + \text{V H}_2\text{O}) = 220451,38 / (220451,38 + 1121,96) \times 100$$
$$\% \text{ Ácido} = 99,45 \%$$

B.2.3.1. Valor mínimo para la concentración de ácido

Como la concentración mínima es 88% se realiza el cálculo de la siguiente manera:

$$0,88 = 220451,38 / (\text{V H}_2\text{O} + 220451,38)$$

$$0,88 \times (\text{V H}_2\text{O} + 220451,38) = 220451,38$$

$$\text{V H}_2\text{O} = (220451,38 - 0,88 \times 220451,38) / 0,88 = 30061,55 \text{ BD}$$

ANEXO C: TABLAS DE RESULTADOS

Las siguientes tablas son resultados obtenidos en el estudio de la sección de reacción en el paquete de simulación HYSYS variando todos los parámetros posibles para seleccionar el reactor cinético que más se ajuste al proceso de alquilación de la Refinería el Palito.

Tabla N° 38: Un RMC con $\Delta P = 0$ psi, $D_g = 85,3 \mu\text{m}$ y $\varepsilon = 0,06$

(BD)	Kabadi	S-SRK	C-Null	NRTL ex	Margules	UNIQUAC	Van Laar	WILSON
2,3,4-TMP	889,30	889,40	886,71	886,71	886,71	886,71	886,69	886,71
2,4-DMH	361,48	361,55	359,71	359,72	359,72	359,72	359,72	359,72
2,3,3-TMP	947,55	947,66	944,79	944,79	944,79	944,79	944,77	944,79
2,4-DMP	288,76	288,79	227,92	228,06	228,06	228,06	227,92	228,06
2,2,5-TMH	102,90	102,92	102,33	102,42	102,42	102,42	102,33	102,42
2,3-DMH	80,65	80,67	80,26	80,46	80,46	80,46	80,26	80,46
2,2,4-TMP	807,60	807,72	804,45	804,46	804,46	804,46	804,43	804,46
2,3-DMP	2334,40	2334,70	2326,80	2326,80	2326,80	2326,80	2326,80	2326,80
Total=	5812,64	5813,41	5732,97	5733,42	5733,42	5733,42	5732,92	5733,42

Tabla N° 39: Un RMC con $\Delta P = 10$ psi, $D_g = 85,3 \mu\text{m}$ y $\varepsilon = 0,06$

(BD)	Kabadi	S-SRK	C-Null	NRTL ex	Margules	UNIQUAC	Van Laar	WILSON
2,3,4-TMP	889,24	889,34	886,67	886,67	886,67	886,67	886,68	886,67
2,4-DMH	361,44	361,51	359,69	359,69	359,69	359,69	359,69	359,69
2,3,3-TMP	947,48	947,57	944,75	944,75	944,75	944,75	944,75	944,75
2,4-DMP	288,74	288,77	227,91	228,05	228,05	228,05	227,91	228,05
2,2,5-TMH	102,88	102,91	102,33	102,41	102,41	102,41	102,33	102,41
2,3-DMH	80,64	80,66	80,25	80,46	80,46	80,46	80,25	80,46
2,2,4-TMP	807,52	807,65	804,41	804,41	804,41	804,41	804,41	804,41
2,3-DMP	2334,20	2334,50	2326,70	2326,70	2326,70	2326,70	2326,70	2326,70
Total=	5812,14	5812,91	5732,71	5733,14	5733,14	5733,14	5732,72	5733,14

Tabla N° 40: Un RMC con $\Delta P = 0$ psi, $D_g = 85,3 \mu\text{m}$ y $\varepsilon = 0,36$

(BD)	Kabadi	S-SRK	C-Null	NRTL ex	Margules	UNIQUAC	Van Laar	WILSON
2,3,4-TMP	1341,10	1341,10	1339,20	1339,20	1339,20	1339,20	1339,20	1339,20
2,4-DMH	869,68	869,74	865,72	865,72	865,72	865,72	865,72	865,78
2,3,3-TMP	1431,00	1431,00	1428,90	1428,90	1428,90	1428,90	1428,90	1428,90
2,4-DMP	396,87	396,89	395,95	395,95	395,95	395,95	395,95	395,98
2,2,5-TMH	295,37	295,40	293,57	293,57	293,57	293,57	293,57	293,60
2,3-DMH	194,23	194,25	193,35	193,35	193,35	193,35	193,35	193,36
2,2,4-TMP	1200,20	1200,20	1198,40	1198,40	1198,40	1198,40	1198,40	1198,50
2,3-DMP	3618,90	3618,90	3613,80	3613,80	3613,80	3613,80	3613,80	3613,90
Total=	9347,35	9347,48	9328,89	9328,89	9328,89	9328,89	9328,89	9329,22

Tabla N° 41: Ocho RMC en serie, $D_g = 85,3 \mu\text{m}$ y variando ε

(BD)	Kabadi	S-SRK	C-Null	NRTL ex	Margules	UNIQUAC	Van Laar	WILSON
2,3,4-TMP	1357,80	1357,90	1355,40	1355,40	1355,40	1355,40	1355,40	1355,40
2,4-DMH	640,84	630,95	627,53	627,53	627,53	627,53	627,53	627,53
2,3,3-TMP	1443,70	1443,80	1441,10	1441,10	1441,10	1441,10	1441,10	1441,10
2,4-DMP	379,09	379,13	377,86	377,86	377,86	377,86	377,86	377,86
2,2,5-TMH	181,95	181,99	180,87	180,87	180,87	180,87	180,87	180,87
2,3-DMH	140,56	140,59	139,84	139,84	139,84	139,84	139,84	139,84
2,2,4-TMP	1320,70	1320,80	1316,00	1316,00	1316,00	1316,00	1316,00	1316,00
2,3-DMP	3844,70	3845,10	3833,80	3833,80	3833,80	3833,80	3833,80	3833,80
Total=	9309,34	9300,26	9272,40	9272,40	9272,40	9272,40	9272,40	9272,40

Tabla N° 42: Ocho RMC en serie, $D_g = 10 \mu\text{m}$ y variando ε

(BD)	Kabadi	S-SRK	C-Null	NRTL ex	Margules	UNIQUAC	Van Laar	WILSON
2,3,4-TMP	1451,70	1451,60	1451,40	1453,50	1453,50	1453,50	1453,50	1453,50
2,4-DMH	1319,60	1321,70	1317,70	1317,90	1317,90	1317,90	1317,90	1317,90
2,3,3-TMP	1544,90	1544,80	1544,50	1545,00	1545,00	1545,00	1545,00	1545,00
2,4-DMP	506,77	506,82	506,77	507,00	507,00	507,00	507,00	507,00
2,2,5-TMH	513,27	515,57	511,52	511,59	511,59	511,59	511,59	511,59
2,3-DMH	294,38	294,90	293,98	294,07	294,07	294,07	294,07	294,07
2,2,4-TMP	1947,30	1949,00	1945,70	1946,80	1946,80	1946,80	1946,80	1946,80
2,3-DMP	4732,70	4731,80	4733,80	4733,90	4733,90	4733,90	4733,90	4733,90
Total=	12310,62	12316,19	12305,37	12309,76	12309,76	12309,76	12309,76	12309,76

Tabla N° 43: Dos trenes en paralelo con ocho RMC en serie cada uno, $D_g=10$
 μm y variando ϵ

(BD)	Kabadi	S-SRK	C-Null	NRTL ex	Margules	UNIQAC	Van Laar	WILSON
2,3,4-TMP	1452,20	1450,70	1450,50	1452,60	1452,60	1452,60	1452,60	1452,60
2,4-DMH	1357,20	1357,50	1356,80	1356,90	1356,90	1356,90	1356,90	1356,90
2,3,3-TMP	1545,30	1543,60	1543,50	1543,70	1543,70	1543,70	1543,70	1543,70
2,4-DMP	505,10	505,09	505,16	505,20	505,20	505,20	505,20	505,20
2,2,5-TMH	559,80	560,35	559,15	559,29	559,29	559,29	559,29	559,29
2,3-DMH	302,76	302,83	302,71	302,67	302,67	302,67	302,67	302,67
2,2,4-TMP	1962,80	1966,30	1967,40	1963,60	1963,60	1963,60	1963,60	1963,60
2,3-DMP	4649,80	4648,60	4651,60	4651,80	4651,80	4651,80	4651,80	4651,80
Total=	12334,96	12334,97	12336,82	12335,76	12335,76	12335,76	12335,76	12335,76

Posteriormente, se presentan las tablas de resultados complementarias de la sección de fraccionamiento de la Unidad de Alquiler. Es decir, las corrientes de interés en las torres dedutanizadora, depropanizadora y despojador de ácido respectivamente.

Tabla N° 44: Validación de las características del tope de la torre D-6810

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano	10616,88 40182,17 2105,14	16672,00	57,03	13180,66	24,15
	Isobutano		36017,00	10,37	36968,89	8,00
	n-Butano		2126,10	<1,00	1419,85	32,55
UNIQUAC	Propano		16256,00	53,20	*	*
	Isobutano		34721,00	13,59		
	n-Butano		3609,10	71,44		
NRTL extensivo	Propano		16672,00	57,03	**	**
	Isobutano		36017,00	10,37		
	n-Butano		2126,30	<1,00		
SRKM	Propano		**	**	10796,78	1,69
	Isobutano				39130,80	2,62
	n-Butano				2080,63	1,16
KABADI	Propano		12204,00	14,95	**	**
	Isobutano	40329,00	<1,00			
	n-Butano	2204,00	4,70			
PRSV	Propano	12241,00	15,29	**	**	
	Isobutano	39847,00	<1,00			
	n-Butano	2140,40	1,67			
SSRK	Propano	12235,00	15,24	**	**	
	Isobutano	40302,00	<1,00			
	n-Butano	2201,10	4,56			
PRH	Propano	**	**	10966,82	3,30	
	Isobutano			39048,14	2,82	
	n-Butano			2062,29	3,04	
PRM	Propano	**	**	10771,42	1,46	
	Isobutano			39152,20	2,56	
	n-Butano			2089,63	0,74	
MARGULES	Propano	16627,00	56,61	13234,9	24,66	
	Isobutano	36045,00	10,29	36734,98	8,58	
	n-Butano	2149,20	2,09	1593,31	24,31	
VAN LAAR	Propano	16653,00	56,85	13223,41	24,55	
	Isobutano	36021,00	10,36	36742,49	8,56	
	n-Butano	2146,00	1,94	1596,90	24,14	
CHIEN NULL	Propano	16521,00	55,61	**	**	
	Isobutano	36160,00	10,00			
	n-Butano	2134,00	1,37			

* No se logra la convergencia.

** El modelo no está presente en el simulador.

Tabla N° 45: Validación de las características del reflujo de la torre D-6810 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano	5060,52 19152,83 1003,41	7960,60	57,30	6281,97	24,14
	Isobutano		17154,54	10,43	17619,38	8,01
	n-Butano		1012,80	<1,00	676,70	32,56
UNIQUAC	Propano		7749,30	53,13	*	*
	Isobutano		16652,00	13,05		
	n-Butano		1721,30	7,51		
NRTL extensivo	Propano		7960,60	57,31	**	**
	Isobutano		17154,00	10,43		
	n-Butano		1012,80	<1,00		
SRKM	Propano		**	**	5145,74	1,68
	Isobutano		**	**	18649,74	2,63
	n-Butano		**	**	991,73	1,17
KABADI	Propano		5797,70	14,56	**	**
	Isobutano		19235,00	<1,00		
	n-Butano		1049,70	4,61		
PRSV	Propano	5813,50	14,88	**	**	
	Isobutano	19008,00	<1,00			
	n-Butano	1020,80	1,73			
SSRK	Propano	5831,00	15,22	**	**	
	Isobutano	19212,00	<1,00			
	n-Butano	1047,60	4,40			
PRH	Propano	**	**	5226,79	3,28	
	Isobutano	**	**	16810,34	2,83	
	n-Butano	**	**	982,89	2,04	
PRM	Propano	**	**	5133,66	1,45	
	Isobutano	**	**	18659,94	2,57	
	n-Butano	**	**	995,92	<1,00	
MARGULES	Propano	7941,10	57,00	6307,75	24,65	
	Isobutano	17165,00	10,38	17507,89	8,59	
	n-Butano	1020,80	1,73	759,37	24,32	
VAN LAAR	Propano	7960,60	57,31	6302,28	24,54	
	Isobutano	17154,00	10,43	17511,47	8,57	
	n-Butano	1012,80	<1,00	761,08	24,15	
CHIEN NULL	Propano	7888,40	55,88	**	**	
	Isobutano	17222,00	10,10			
	n-Butano	1016,5	1,30			

* No se logra la convergencia.

** El modelo no está presente en el simulador.

Tabla N° 46: Validación de las características del fondo de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano Isobutano n-Butano	1920,73 17515,32 947,18	3414,60	77,77	1585,05	17,48
			16851,00	3,79	16478,31	5,92
			1033,60	9,12	668,07	29,47
UNIQUAC	Propano Isobutano n-Butano		3358,00	74,83	*	*
			16161,00	7,73		
			1676,80	77,03		
NRTL extensivo	Propano Isobutano n-Butano		3414,90	77,79	**	**
			16850,00	3,80		
			1033,80	9,15		
SRKM	Propano Isobutano n-Butano		**	**	2281,00	18,76
					17277,22	1,36
					948,86	<1,00
KABADI	Propano Isobutano n-Butano		2424,80	26,24	**	**
		17824,00	1,76			
		1015,40	7,20			
PRSV	Propano Isobutano n-Butano	2406,10	25,27	**	**	
		17604,00	<1,00			
		986,97	4,20			
SSRK	Propano Isobutano n-Butano	2419,30	25,96	**	**	
		17831,00	1,80			
		1014,00	7,05			
PRH	Propano Isobutano n-Butano	**	**	2181,00	13,55	
				17221,00	1,68	
				940,77	<1,00	
PRM	Propano Isobutano n-Butano	**	**	2329,68	21,29	
				17302,92	1,21	
				953,59	<1,00	
MARGULES	Propano Isobutano n-Butano	3402,50	77,14	1622,53	15,53	
		16856,00	3,76	16351,62	6,64	
		1044,80	10,31	746,00	21,24	
VAN LAAR	Propano Isobutano n-Butano	3407,50	77,41	1623,53	15,47	
		16851,00	3,79	16355,69	6,62	
		1043,30	10,14	747,66	21,06	
CHIEN NULL	Propano Isobutano n-Butano	3530,80	83,83	**	**	
		16764,00	4,29			
		1031,90	8,24			

Tabla N° 47: Validación de las características del corte lateral de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano	791,20 3629,74 154,27	2491,20	>100,00	1101,78	39,13
	Isobutano		2004,30	44,78	2900,65	20,09
	n-Butano		79,03	48,77	73,43	52,40
UNIQUAC	Propano		2379,60	>100,00	*	*
	Isobutano		1971,40	45,68		
	n-Butano		212,02	37,43		
NRTL extensivo	Propano		2421,30	>100,00	**	**
	Isobutano		2004,20	44,78		
	n-Butano		79,04	48,76		
SRKM	Propano		**	**	784,88	<1,00
	Isobutano				3145,97	13,33
	n-Butano				139,75	9,41
KABADI	Propano		1206,40	52,48	**	**
	Isobutano		3224,80	11,16		
	n-Butano		137,82	10,66		
PRSV	Propano	1223,00	55,64	**	**	
	Isobutano	3213,40	4,59			
	n-Butano	133,01	10,88			
SSRK	Propano	1204,20	52,20	**	**	
	Isobutano	3227,20	11,09			
	n-Butano	137,66	10,77			
PRH	Propano	**	**	777,76	1,79	
	Isobutano			3158,32	12,99	
	n-Butano			138,35	10,32	
PRM	Propano	**	**	796,76	<1,00	
	Isobutano			3130,00	13,68	
	n-Butano			139,69	9,45	
MARGULES	Propano	2487,10	>100,00	1107,19	39,81	
	Isobutano	2007,50	44,69	2878,25	20,70	
	n-Butano	79,97	48,16	87,94	42,99	
VAN LAAR	Propano	2488,80	>100,00	1106,16	39,68	
	Isobutano	2005,90	44,74	2878,19	20,71	
	n-Butano	78,82	48,99	88,15	42,86	
CHIEN NULL	Propano	2323,50	>100,00	**	**	
	Isobutano	2165,80	40,33			
	n-Butano	84,97	44,92			

Tabla N° 48: Validación de las características del reflujo de la torre D-6815 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano Isobutano	19496,44 303,69	19938,00 10,38	2,26 96,58	26952,69 6,23	38,24 97,95
UNIQUAC	Propano Isobutano		19855,00 92,64	1,84 69,49	*	*
NRTL extensivo	Propano Isobutano		19938,00 10,38	1,68 100,00	**	**
SRKM	Propano Isobutano		**	**	18509,97 358,35	5,06 18,00
KABADI	Propano Isobutano		19674,00 272,88	<1,00 10,15	**	**
PRSV	Propano Isobutano		19566,00 381,23	<1,00 25,53	**	**
SSRK	Propano Isobutano		19592,00 355,48	<1,00 17,05	**	**
PRH	Propano Isobutano		**	**	19688,78 365,12	<1,00 20,25
PRM	Propano Isobutano		**	**	18375,33 347,00	5,75 14,31
MARGULES	Propano Isobutano		19949,00 0,35	2,32 99,88	27645,01 5,73	41,80 98,11
VAN LAAR	Propano Isobutano		19938,00 10,38	2,26 96,58	27294,37 5,88	40,00 98,06
CHIEN NULL	Propano Isobutano		19938,00 10,38	2,26 96,58	**	**

Tabla N° 49: Validación de las características del fondo de la torre D-6817 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano Isobutano	2748,60 46,42	2789,80 0,63	1,68 98,64	3805,87 102,00	38,72 97,99
UNIQUAC	Propano Isobutano		2773,80 16,58	1,10 64,28	*	*
NRTL extensivo	Propano Isobutano		2789,80 0,00	1,68 100,00	**	**
SRKM	Propano Isobutano		**	**	2613,71 58,87	4,73 26,82
KABADI	Propano Isobutano		2747,70 42,52	<1,00 8,40	**	**
PRSV	Propano Isobutano		2736,50 53,69	<1,00 15,66	**	**
SSRK	Propano Isobutano		2740,10 50,10	<1,00 7,90	**	**
PRH	Propano Isobutano		**	**	2780,17 60,00	1,33 29,24
PRM	Propano Isobutano		**	**	2594,70 57,00	5,43 22,86
MARGULES	Propano Isobutano		2790,30 0,00	1,70 100,00	3903,63 0,94	90,16 96,05
VAN LAAR	Propano Isobutano		2789,80 0,64	1,68 98,62	3854,12 0,97	40,48 97,92
CHIEN NULL	Propano Isobutano		2789,80 0,64	1,68 98,62	**	**

* No se logra la convergencia.

** El modelo no está presente en el simulador.

Tabla N° 50: Validación de las características del tope de la torre D-6817 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Propano	472,16	354,98	24,82	654,83	38,69
UNIQUAC	Propano		353,4	25,15	*	*
NRTL extensivo	Propano		354,98	24,82	**	**
SRKM	Propano		**	**	449,71	4,75
KABADI	Propano		352,18	25,41	**	**
PRSV	Propano		351,39	25,58	**	**
SSRK	Propano		351,75	25,50	**	**
PRH	Propano		**	**	478,35	1,31
PRM	Propano		**	**	446,44	5,45
MARGULES	Propano		355,12	24,79	671,65	42,25
VAN LAAR	Propano		354,98	24,82	663,13	40,45
CHIEN NULL	Propano		354,94	24,83	**	**

* No se logra la convergencia.

** El modelo no está presente en el simulador.

Tabla N° 51: Validación de las características del tope de la torre D-6809 para ambos simuladores variando los modelos termodinámicos

MODELOS	Compuestos	PLANTA (BD)	HYSYS (BD)	%D _{HYSYS}	PROII (BD)	%D _{PROII}
NRTL	Isobutano	5375,80	2004,30	62,72	2900,65	46,04
	n-Butano		79,03	87,10	73,43	88,02
	HF		438,49	10,20	398	<1,00
NRTL extensivo	Isobutano		2004,20	62,71	**	**
	n-Butano		79,04	87,10		
	HF		438,50	10,18		
SRKM	Isobutano		**	**	3145,97	41,48
	n-Butano				139,75	77,20
	HF				403,00	1,23
KABADI	Isobutano		3224,80	40,01	**	**
	n-Butano		137,82	77,51		
	HF		436,90	9,78		
PRSV	Isobutano	3213,40	40,22	**	**	
	n-Butano	133,01	78,30			
	HF	438,99	10,30			
SSRK	Isobutano	3227,20	39,96	**	**	
	n-Butano	137,66	77,54			
	HF	436,37	9,65			
PRH	Isobutano	**	**	3158,32	41,25	
	n-Butano			138,35	77,43	
	HF			398,82	<1,00	
PRM	Isobutano	**	**	3133,24	41,72	
	n-Butano			139,69	77,21	
	HF			403,00	1,27	
MARGULES	Isobutano	2007,50	62,65	2878,25	46,46	
	n-Butano	79,97	86,95	87,94	85,65	
	HF	434,84	9,26	397,76	<1,00	
VAN LAAR	Isobutano	2005,90	62,68	2878,19	46,46	
	n-Butano	79,82	86,97	88,15	85,62	
	HF	438,48	10,17	397,76	<1,00	
CHIEN NULL	Isobutano	2165,80	59,71	**	**	
	n-Butano	84,97	86,13			
	HF	438,49	10,17			

* No se logra la convergencia.

** El modelo no está presente en el simulador.

ANEXO D. REPORTES EN PROII

En esta sección se presenta el reporte .INP obtenido del simulador PROII referidos a la sección de reacción y fraccionamiento del proceso simulado. Los reportes del simulador HYSYS no se muestran debido a que son de gran extensión y contienen mucha información innecesaria, la cual no es posible eliminar manualmente.

```

$ Generated by PRO/II Keyword Generation System <version 3.37 - 09-16-97>
$ Generated on: Thu May 09 20:18:43 2002
TITLE DATE=04/07/02
PRINT PWRATE, STREAM=ALL, RATE=LV, FRACTION=LV, PERCENT=LV
DIMENSION ENGLISH, TIME=DAY, LIQVOL=BBL, SPVOL=BBL/LB-MOL
OUTDIMENSION ADD, ENGLISH, TIME=DAY, LIQVOL=BBL,
SPVOL=BBL/LB-M
SEQUENCE SIMSCI
COMPONENT DATA
LIBID
1,PROPANE/2,PROPENE/3,IBUTANE/4,BUTANE/5,1BUTENE/6,IBUTENE/ &
7,T2BUTENE/8,IPENTANE/9,C2BUTENE/10,PENTANE/11,1PENTENE/ &
12,T2PENTEN/13,C2PENTEN/14,3M1BUTEN/15,2M1BUTEN/16,2M2BUTEN/
17,H2O/18,HF/19,224P/20,234MP/21,23DMHX/22,24DMHX/23,233MPN/ &
24,23MP/25,225H/26,C10H22/27,C11H24/28,HEXANE/29,24DMP
THERMODYNAMIC DATA
METHOD SYSTEM=PRH, SET=PRH01, DEFAULT
STREAM DATA
PROPERTY STREAM=C2, TEMPERATURE=101, PRESSURE=244.7, PHASE=M,&
COMPOSITION(LV,BBL/D)=1,1907.8/2,4149.5/3,3216.2/4,1299/ &
5,980.77/6,170.89/7,1402/8,1641.47/9,1083.36/10,221.822/ &
11,81.726/12,319.17/13,71.295/14,79.931/15,88.695/16,104.27
PROPERTY STREAM=C3, TEMPERATURE=101, PRESSURE=244.7, PHASE=M,&
COMPOSITION(LV,BBL/D)=1,7735.1/3,83010/4,5974.9/8,1141.53/ &
28,751.97
PROPERTY STREAM=C1, TEMPERATURE=101, PRESSURE=244.7, PHASE=M,&
COMPOSITION(LV,BBL/D)=1,118.96/3,8221.8/4,344.38/8,6.83946
PROPERTY STREAM=C8REF, TEMPERATURE=101, PRESSURE=244.7,
PHASE=M, &
COMPOSITION(LV,BBL/D)=17,1121.26/18,220450
PROPERTY STREAM=S60, TEMPERATURE=155,PRESSURE=159.7, PHASE=M,&
COMPOSITION(LV,BBL/D)=1,155/3,5375.79/4,612.86/10,11.24/17,2/ &
28,398
PROPERTY STREAM=S73, TEMPERATURE=131,PRESSURE=311.7, PHASE=M,&

```

COMPOSITION(LV,BBL/D)=1,472.16/3,3.68/18,23.9
RXDATA
RXSET ID=UNO
REACTION ID=PRIMERA
STOICHIOMETRY 3,-1/6,-1/19,1
KINETICS PEXP=17543, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=SEGUNDA
STOICHIOMETRY 3,-1/7,-0.5/9,-0.5/19,1
KINETICS PEXP=7151, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=TERCERA
STOICHIOMETRY 3,-1/7,-0.5/9,-0.5/20,1
KINETICS PEXP=11650.4, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=CUARTA
STOICHIOMETRY 3,-1/5,-1/21,1
KINETICS PEXP=1661.04, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=QUINTA
STOICHIOMETRY 3,-1/5,-1/22,1
KINETICS PEXP=7324.74, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=SEXTA
STOICHIOMETRY 3,-1/7,-0.5/9,-0.5/23,1
KINETICS PEXP=12515, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=SEPTIMA
STOICHIOMETRY 2,-1/3,-1/24,1
KINETICS PEXP=15168.6, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=OCTAVA
STOICHIOMETRY 2,-1/3,-1/29,1
KINETICS PEXP=1326.53, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=NOVENA
STOICHIOMETRY 1,1/2,-1/3,-1/6,1
KINETICS PEXP=1845.6, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=DECIMA
STOICHIOMETRY 3,-1/16,-1/25,1
KINETICS PEXP=5438.77, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=DECIMA1
STOICHIOMETRY 3,-2/10,1/12,-1/19,1
KINETICS PEXP=6690.3, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=DECIMA2
STOICHIOMETRY 2,-1/24,-1/26,1
KINETICS PEXP=11016, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
REACTION ID=DECIMA3
STOICHIOMETRY 6,-1/24,-1/27,1
KINETICS PEXP=9804.77, ACTIVATION=0, TEXPONENT=0
UNIT OPERATIONS
COLUMN UID=D-6810
PARAMETER TRAY=70,IO=50
FEED S55,7/S60,8/S69,1,SEPARATE

PRODUCT OVHD(M)=S57, VDRAW(LV)=S59,49,1914, VDRAW(LV)=S61,10, &
 80116.7, BTMS(LV)=S58,16976.1, SUPERSEDE=ON
 DUTY 1,70,4000
 PSPEC PTOP=157.7, DPCOLUMN=8
 PRINT PROPTABLE=PART
 ESTIMATE MODEL=SIMPLE, RRATIO=3
 TEFICIENCY(MURPHREE) 1,0.8/2,0.8/3,0.8/4,0.8/5,0.8/6,0.8/7,0.8/ &
 8,0.8/9,0.8/10,0.8/11,0.8/12,0.8/13,0.8/14,0.8/15,0.8/ &
 16,0.8/17,0.8/18,0.8/19,0.8/20,0.8/21,0.8/22,0.8/ &
 23,0.8/24,0.8/25,0.8/26,0.8/27,0.8/28,0.8/29,0.8/ &
 30,0.8/31,0.8/32,0.8/33,0.8/34,0.8/35,0.8/36,0.8/ &
 37,0.8/38,0.8/39,0.8/40,0.8/41,0.8/42,0.8/43,0.8/ &
 44,0.8/45,0.8/46,0.8/47,0.8/48,0.8/49,0.8/50,0.8/ &
 51,0.8/52,0.8/53,0.8/54,0.8/55,0.8/56,0.8/57,0.8/ &
 58,0.8/59,0.8/60,0.8/61,0.8/62,0.8/63,0.8/64,0.8/ &
 65,0.8
 EFACTOR 1
 REBOILER TYPE=THERMOSIPHON, BAFFLE=NO, TEMPERATURE=392
 COLUMN UID=D-6815
 PARAMETER TRAY=32,IO=50
 FEED S79,18/S87,1,SEPARATE
 PRODUCT OVHD(M)=S75, BTMS(LV)=S76,20407, VDRAW(LV)=S78,30, &
 4076.9
 DUTY 1,32,770
 PSPEC PTOP=309.7, DPCOLUMN=5
 PRINT PROPTABLE=PART
 TEFICIENCY(MURPHREE) 1,0.8/2,0.8/3,0.8/4,0.8/5,0.8/6,0.8/7,0.8/ &
 8,0.8/9,0.8/10,0.8/11,0.8/12,0.8/13,0.8/14,0.8/15,0.8/ &
 16,0.8/17,0.8/18,0.8/19,0.8/20,0.8/21,0.8/22,0.8/ &
 23,0.8/24,0.8/25,0.8/26,0.8/27,0.8/28,0.8/29,0.8/ &
 30,0.8/31,0.8
 EFACTOR 1
 REBOILER TYPE=THERMOSIPHON, BAFFLE=NO, TEMPERATURE=210
 FLASH UID=D-6814
 FEED S62
 PRODUCT V=S63, L=S64, W=S65
 ISO TEMPERATURE=100, PRESSURE=147.7
 FLASH UID=D-6816
 FEED S80
 PRODUCT V=S81, W=S83, L=S82
 ISO TEMPERATURE=100, PRESSURE=304.7
 HX UID=E1
 HOT FEED=C42, M=S55, DP=5
 COLD FEED=S61, M=S74, DP=7
 CONFIGURE COUNTER
 OPER HTEMP=160

HX UID=E12A
COLD FEED=S80A, M=S80, DP=120
OPER CTEMP=100

HX UID=E2
COLD FEED=S57, M=S62, DP=10
OPER CTEMP=100

HX UID=E3
COLD FEED=S58, M=S56, DP=10
OPER CTEMP=260

HX UID=E4
HOT FEED=S71, M=S72, DP=10
COLD FEED=S56, M=S70, DP=10
CONFIGURE COUNTER
OPER CTEMP=123

HX UID=E5
HOT FEED=S78, M=S1, DP=5
OPER HTEMP=450

HX UID=E6
HOT FEED=S72, M=S79, DP=15
OPER HTEMP=190

HX UID=E7
COLD FEED=S74, M=S98
OPER CTEMP=130

HX UID=E8
COLD FEED=S76, M=S99, DP=6
OPER CTEMP=100

HX UID=E9
HOT FEED=S101, M=S102
OPER HTEMP=118

MIXER UID=M1
FEED C2,C3,C1
PRODUCT M=C4

MIXER UID=M10
FEED C8B,C7A
PRODUCT M=C25

MIXER UID=M11
FEED C7B,C26
PRODUCT M=C27

MIXER UID=M12
FEED C7C,C28
PRODUCT M=C29

MIXER UID=M13
FEED C7D,C30
PRODUCT M=C31

MIXER UID=M14
FEED C7E,C32

PRODUCT M=C33
MIXER UID=M15
FEED C7F,C34
PRODUCT M=C35
MIXER UID=M16
FEED C7G,C36
PRODUCT M=C37
MIXER UID=M17
FEED C7H,C38
PRODUCT M=C39
MIXER UID=M18
FEED C24,C40
PRODUCT M=C41
MIXER UID=M19
FEED S75,S73
PRODUCT M=S80A
MIXER UID=M2
FEED C6A,C8A
PRODUCT M=C9
MIXER UID=M20
FEED S92,S65,S83
PRODUCT M=S93
MIXER UID=M21
FEED S98,S99
PRODUCT M=S100
MIXER UID=M3
FEED C10,C6B
PRODUCT M=C11
MIXER UID=M4
FEED C6C,C12
PRODUCT M=C13
MIXER UID=M5
FEED C6D,C14
PRODUCT M=C15
MIXER UID=M6
FEED C16,C6E
PRODUCT M=C17
MIXER UID=M7
FEED C18,C6F
PRODUCT M=C19
MIXER UID=M8
FEED C6G,C20
PRODUCT M=C21
MIXER UID=M9
FEED C6H,C22
PRODUCT M=C23

PLUG UID=R1
FEED C9
PRODUCT M=C10
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=13770.3
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=7155.48
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=11690
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=1664.06
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=7342.68
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=12563.7
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=15205.4
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=1331.25
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=1851.27
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=5489.81
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=6677.06
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=11024.4
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=9838.78
PLUG UID=R10
FEED C27
PRODUCT M=C28
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=29835.3
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=15503.5
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=25328.4
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=3605.5

REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=15909.2
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=27221.3
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=32945
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=2884.4
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=4011.1
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=11807.9
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=14467
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=23886.3
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=21317.4
PLUG UID=R11
FEED C29
PRODUCT M=C30
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=390015
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=20273.9
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=33121.8
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=4714.85
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=20804.3
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=35597.1
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=43081.9
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=3771.9
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=5245.3
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=15441.1
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=18918.3

REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=31235.9
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=27876.5
PLUG UID=R12
FEED C31
PRODUCT M=C32
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=4815.5
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=25044.2
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=40915.2
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=5824.2
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=25699.4
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=43872.9
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=53218.9
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=4659.4
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=6479.5
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=19074.3
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=23369.7
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=38585.5
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=34435.7
PLUG UID=R13
FEED C33
PRODUCT M=C34
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=59670.6
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=31007.1

REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=50656.9
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=7210.9
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=31818.3
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=54442.6
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=65890
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=5768.8
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=8022.2
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=23615.8
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=28933.9
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=47772.5
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=42634.7
PLUG UID=R14
FEED C35
PRODUCT M=C36
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=66555.6
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=34584.8
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=56501.9
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=8043
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=35489.6
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=67724.5
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=73492.7
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=6434.4
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=8947.8

REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=26340.8
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=32272.4
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=53284.7
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=47554.1
PLUG UID=R15
FEED C37
PRODUCT M=C38
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=73440.7
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=38162.5
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=62346.9
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=8875
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=39161
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=67006.3
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=81095.4
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=7100
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=9873.5
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=29065.7
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=35611
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=58796.9
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=52473.5
PLUG UID=R16
FEED C39
PRODUCT M=C40
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO

REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=82620.8
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=42932.9
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=70140.3
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=9984.4
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=44056.1
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=75382.1
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=91232.3
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=7987.5
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=11107.6
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=32698.9
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=40062.3
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=66146.5
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=59032.7
PLUG UID=R2
FEED C11
PRODUCT M=C12
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=29835.3
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=15503.5
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=25328.4
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=3605.47
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=15909.2
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=27221.3
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=32945

REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=2884.4
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=4011.09
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=11807.9
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=14467
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=23886.3
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=21317.3
PLUG UID=R3
FEED C13
PRODUCT M=C14
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=39015.4
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=20273.8
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=33121.8
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=4714.85
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=20804.3
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=35597.1
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=43081.9
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=3771.9
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=5245.3
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=15441.1
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=18918.3
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=31235.9
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=27876.5
PLUG UID=R4
FEED C15

PRODUCT M=C16
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=48195.4
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=25044.2
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=40915.2
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=5824.2
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=25699.4
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=43972.9
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=53218.9
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=4659.4
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=6479.45
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=19074.3
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=23369.7
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=38585.5
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=34435.7
PLUG UID=R5
FEED C17
PRODUCT M=C18
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=59670.6
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=31007.1
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=50656.9
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=7210.9
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=31818.3

REACTION SEXTA
 KINETIC COMPONENT=9, PEXP=54442.6
 REACTION SEPTIMA
 KINETIC PEXP=65890
 REACTION OCTAVA
 KINETIC PEXP=5768.7
 REACTION NOVENA
 KINETIC PEXP=8022.2
 REACTION DECIMA
 KINETIC COMPONENT=16, PEXP=23615.8
 REACTION DECIMA1
 KINETIC COMPONENT=12, PEXP=28933.9
 REACTION DECIMA2
 KINETIC PEXP=47772.5
 REACTION DECIMA3
 KINETIC PEXP=42634.7
 PLUG UID=R6
 FEED C19
 PRODUCT M=C20
 OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
 RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
 RXSTOIC RXSET=UNO
 REACTION PRIMERA
 KINETIC COMPONENT=6, PEXP=66555.6
 REACTION SEGUNDA
 KINETIC COMPONENT=9, PEXP=34584.8
 REACTION TERCERA
 KINETIC COMPONENT=9, PEXP=56501.9
 REACTION CUARTA
 KINETIC COMPONENT=5, PEXP=8043
 REACTION QUINTA
 KINETIC COMPONENT=5, PEXP=35489.6
 REACTION SEXTA
 KINETIC COMPONENT=9, PEXP=67724.5
 REACTION SEPTIMA
 KINETIC PEXP=73492.7
 REACTION OCTAVA
 KINETIC PEXP=6434.4
 REACTION NOVENA
 KINETIC PEXP=8947.8
 REACTION DECIMA
 KINETIC COMPONENT=16, PEXP=26340.9
 REACTION DECIMA1
 KINETIC COMPONENT=12, PEXP=32272.4
 REACTION DECIMA2
 KINETIC PEXP=53284.7

REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=47554.1
PLUG UID=R7
FEED C21
PRODUCT M=C22
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=73440.7
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=38162.6
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=62346.9
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=8875
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=39161
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=67006.3
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=81095.4
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=7100
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=9873.5
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=29065.7
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=35610.9
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=58796.9
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=52473.5
PLUG UID=R8
FEED C23
PRODUCT M=C24
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=82620.8
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=42932.9
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=70140.3

REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=9984.4
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=44056.1
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=75382.1
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=91232.3
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=7987.5
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=11107.6
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=32698.9
REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=40062.3
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=66146.5
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=59032.7
PLUG UID=R9
FEED C25
PRODUCT M=C26
OPERATION LENGTH=3.5, DIAMETER=58.728, POINTS=10, THERMAL
RXCALCULATION CONCENTRATION, RUNGEKUTTA, NSTEPS=20
RXSTOIC RXSET=UNO
REACTION PRIMERA
KINETIC COMPONENT=6, PEXP=13770.1
REACTION SEGUNDA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=7155.5
REACTION TERCERA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=11690.1
REACTION CUARTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=1664.1
REACTION QUINTA
KINETIC COMPONENT=5, PEXP=7342.7
REACTION SEXTA
KINETIC COMPONENT=9, PEXP=12563.7
REACTION SEPTIMA
KINETIC PEXP=15205.4
REACTION OCTAVA
KINETIC PEXP=1331.3
REACTION NOVENA
KINETIC PEXP=1851.3
REACTION DECIMA
KINETIC COMPONENT=16, PEXP=5449.8

REACTION DECIMA1
KINETIC COMPONENT=12, PEXP=6677.1
REACTION DECIMA2
KINETIC PEXP=11024.4
REACTION DECIMA3
KINETIC PEXP=9838.8
PUMP UID=P1
FEED S64
PRODUCT M=S66
OPERATION PRESSURE=364.7
PUMP UID=P2
FEED S82
PRODUCT M=S84
OPERATION PRESSURE=379.7
PUMP UID=P3
FEED C43
PRODUCT M=S92
OPERATION PRESSURE=284.7
SPLITTER UID=SP2
FEED C5
PRODUCT M=C6G, M=C6C, M=C6H, M=C6F, M=C6E, M=C6D, M=C6B,
M=C6A
OPERATION OPTION=NORM
SPEC STREAM=C6G, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6C, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6H, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6F, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6E, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6D, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6B, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C6A, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPLITTER UID=SP3
FEED C8REF
PRODUCT M=C8A, M=C8B
OPERATION OPTION=NORM
SPEC STREAM=C8A, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=110790
SPEC STREAM=C8B, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=110790
SPLITTER UID=SP4
FEED C5A
PRODUCT M=C7F, M=C7E, M=C7A, M=C7G, M=C7H, M=C7D, M=C7C,
M=C7B
OPERATION OPTION=NORM
SPEC STREAM=C7F, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C7E, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C7A, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
SPEC STREAM=C7G, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8

SPEC STREAM=C7H, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
 SPEC STREAM=C7D, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757.8
 SPEC STREAM=C7C, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757
 SPEC STREAM=C7B, RATE(LV,BBL/D),TOTAL,WET, VALUE=7757
 STCALCULATOR UID=D-6807
 FEED C41,1
 OVHD M=C42, PRESSURE=233.7, TEST=110
 BTMS M=C43, PRESSURE=233.7, TEST=110
 FOVHD(WT) 1,1,1
 FOVHD(M) 2,2,0
 FOVHD(WT) 3,4,1
 FOVHD(WT) 28,28,1
 FOVHD(WT) 19,25,1
 FOVHD(WT) 29,29,1
 FBTMS(WT) 18,18,0.9983
 FBTMS(WT) 26,27,1
 FBTMS(WT) 5,16,1
 FBTMS(WT) 17,17,1
 STCALCULATOR UID=D-6809
 FEED S102/S1
 OVHD M=S103, PRESSURE=159.7, TEMPERATURE=155
 BTMS M=S104, PRESSURE=162.7, TEMPERATURE=350
 FOVHD(M) 18,18,1
 FOVHD(M) 2,2,0
 FOVHD(M) 17,17,0
 FOVHD(M) 19,21,1
 FOVHD(M) 22,27,1
 FOVHD(M) 28,28,0
 FOVHD(M) 29,29,1
 FBTMS(M) 1,1,0
 FBTMS(M) 3,4,0
 FBTMS(M) 5,16,0
 STCALCULATOR UID=SC1
 FEED S66
 OVHD M=S67
 BTMS M=S68
 FOVHD(LV) 1,29,0.4766
 STCALCULATOR UID=SC2
 FEED S84
 OVHD M=S85
 BTMS M=S86
 FOVHD(LV) 1,29,0.858
 STCALCULATOR UID=SC3
 FEED S93
 OVHD M=S94
 BTMS M=S95

FOVHD(LV) 1,29,0.0018
STCALCULATOR UID=SC4
FEED C4
OVHD M=C5A
BTMS M=C5
FOVHD(LV) 1,29,0.5
STCALCULATOR UID=SC5
FEED S77
OVHD M=S2
BTMS M=S3
FOVHD(M) 1,1,0.1468
FOVHD(M) 3,3,0.007348
FOVHD(M) 4,4,0.0625
FOVHD(M) 2,2,0
FOVHD(M) 5,16,0
FOVHD(M) 18,18,0.999
FOVHD(M) 17,17,0
FOVHD(M) 19,29,0
VALVE UID=V1
FEED S67
PRODUCT M=S69
OPERATION PRESSURE=217.7
VALVE UID=V2
FEED S68
PRODUCT M=S71
OPERATION PRESSURE=339.7
VALVE UID=V3
FEED S85
PRODUCT M=S87
OPERATION PRESSURE=226.7
VALVE UID=V4
FEED S86
PRODUCT M=S77
OPERATION PRESSURE=315
VALVE UID=V6
FEED S95
PRODUCT M=S96
OPERATION PRESSURE=244.7
VALVE UID=V7
FEED S94
PRODUCT M=S101
OPERATION PRESSURE=163.7
END

