

Universidad de Matanzas
Facultad de Ciencias Técnicas
Departamento de Química e Ingeniería Química



***Trabajo de diploma en opción al Título Académico de
Ingeniero Químico***

***Obtención del modelo de simulación del esquema
propuesto para la isomerización de las naftas ligeras en la
Refinería Camilo Cienfuegos.***

Autora: Laurie Ruíz González

Tutora: MSc. Leiby Montes de Oca Rodríguez

Matanzas, 2016

"En este mundo no se logra nada útil ni grande sin esfuerzo ni sacrificio. "

Adolfo Kolping

Notas de aceptación:

Presidente del tribunal

Firma

Miembro del tribunal

Firma

Miembro del tribunal

Firma

Miembro del tribunal

Firma

Declaración de autoridad:

Yo, Laurie Ruíz González, declaro ser la única autora de esta investigación realizada en la Universidad de Matanzas “Camilo Cienfuegos”, como requisito parcial para optar por el título de Ingeniero Químico y autorizo que la misma sea utilizada por la mencionada Institución como material de consulta. Para que así conste, firma:

Laurie Ruíz González

Agradecimientos:

- *Agradezco enormemente a mis padres por darme la vida y todo lo que soy hoy.*
- *A la persona que me acompaña en el camino de la vida por darme su amor y comprensión.*
- *Mis más sinceros e infinitos agradecimientos a la persona que le debo la realización de este trabajo, que a pesar de su limitado tiempo me dedicó largas horas tanto en la escuela, en su casa, como por teléfono: mi tutora Leiby Montes de Oca Rodríguez.*
- *A toda mi familia por apoyarme en los momentos más duros y darme aliento cuando más lo necesité.*
- *A mi grupo el Q-51 por estar siempre ahí: para reír cuando la vida afuera no era de risa, para aconsejarme como actuar en la vida, para estudiar, para festejar, en fin ser un grupo.*
- *En especial a mis compañeros por aguantarme: Eduardo, Heydi, Leysis, Karina, Laura (las dos), Yaisys, Gustavo, Onel, Addiel, Leonel, Lisy, Anita, Marlon, Dayamí y Basulto.*
- *Agradezco también el apoyo de los profesores: Roberto Lugo y Agustín Benítez.*
- *Doy las gracias a todas las personas que me han ayudado de una forma u otra.*

Resumen:

En el presente trabajo se desarrolla un modelo de simulación para el esquema propuesto (DIP+DP) de isomerización de nafta ligera para la refinería "Camilo Cienfuegos", a partir de los pasos de la estrategia general de la simulación. Las variables que se seleccionan para la validación del modelo, muestran errores relativos inferiores al 5 % con respecto a las condiciones de diseño. A partir del estudio de la operación del proceso se identifica que el enfriador por aire (A-501) puede presentar problemas cuando se trabaje en el ciclo final del reactor. Bajo estas condiciones será necesario modificar su configuración a 3 ventiladores para mantener la temperatura requerida en la corriente de salida del mismo, o aumentar la temperatura de la corriente de salida a 105 °C. Se realiza el análisis de sensibilidad del modelo para verificar su respuesta ante cambios en la alimentación a la sección tanto de nafta ligera como de la corriente hidrogenada. Donde se obtiene que al aumentar el flujo de la fracción HK-70 aumenta el flujo de la corriente de isomerizado estable. Mientras que al incrementar la alimentación de hidrógeno, el flujo obtenido por el fondo de la torre estabilizadora disminuye.

Abstract:

In the present work is developed a simulation model for the diagram proposed (DIP+DP) of the light naphtha isomerization in Camilo Cienfuegos refinery, departing from the datums of the general strategy of simulation. The variables that are selected to the validation model, achieve relative errors inferior to 5 % in the design conditions. By means of the study of the process operation its identify that the air cooler when its working in the reactor final cycle could present problems. Taking into account these conditions it's necessary to modificate its configuration with 3 fans to keep the required temperature in the exit stream, or increase the temperature of the exit stream to 105 °C. Its carry out an analysis of the model sensibility to verify the response facing the changes in the feed section of the light naphtha, or hydrogenated stream. Resulting to the increasing of the stream fraction HK-70, increase the stream of stable isomerizato. As long as the increasing of the hydrogen, the stream obtained to the bottoms of the stabilizer column, decrease.

Tabla de contenidos:

Introducción:	1
Capítulo 1: Análisis Bibliográfico	4
1.1 Proceso de refinación:	4
1.1.2 Subproductos del crudo:	5
1.1.3 Componentes químicos del petróleo crudo	6
1.1.4 Clasificación de las refinerías según su configuración y complejidad	8
1.1.5 Métodos de mejoramiento de octanaje.	9
1.2 Características del proceso de isomerización	10
1.3 Características de las reacciones de isomerización	12
1.4 Secciones de la unidad de isomerización.	13
1.6 Catalizadores de isomerización	18
1.7 Simulación de procesos	20
1.8 Conclusiones parciales	24
Capítulo 2: Metodología de la investigación	25
2.1 Descripción del proceso de isomerización propuesto:	25
2.1.1. Características generales de la sección 500.	25
2.1.2 Descripción del esquema propuesto de isomerización.	26
2.3 Obtención del modelo de simulación:	28
2.3.1 Bases para la simulación	30
2.3.2 Validación del modelo de simulación	44
2.4 Conclusiones parciales de la metodología de la investigación	45
Capítulo 3: Análisis de los resultados	46
3.1. Implementación y validación del modelo de simulación.	46
3.1.1 Implementación de las columnas del proceso.	46

3.1.2Implementación de los módulos del DFI	49
3.1.3Validación del modelo de simulación	50
3.1.4Análisis de sensibilidad del modelo.....	51
3.2Análisis de la operación al inicio y final del ciclo del catalizador.	53
3.3Conclusiones parciales del análisis de los resultados:	55
Conclusiones.....	56
Recomendaciones	57
Bibliografías:	58
Anexos:.....	62

Introducción

Las plantas industriales para refinación de crudo incluyen unidades donde ocurren procesos de separación física (destilación atmosférica y de vacío) y unidades de conversión (que pueden ser térmicas o catalíticas) cuya principal función es valorizar las corrientes ahí tratadas. Los procesos de conversión modifican la estructura molecular de los hidrocarburos que constituyen una determinada alimentación, provocando un cambio sustancial en su composición, lo cual influye en las características y propiedades de los productos finales, como: peso molecular, puntos de ebullición, número de octano, entre otras. La modelación de las distintas unidades de una planta de refinación es desafiante y en extremo complicada, por la naturaleza misma del petróleo y sus derivados (mezclas de cientos de compuestos químicos), el sinnúmero de fenómenos tanto físicos como químicos que experimentan y el gran número de variables operativas que imperan en las distintas fases de refinación.

En muchos procesos, moléculas grandes son craqueadas hacia moléculas de menor tamaño o sufren un reacomodo o reestructuración, a través de múltiples reacciones químicas que se dan bajo complejos mecanismos de reacción, lo cual permite obtener una composición en los productos, de modo que cumplan con especificaciones impuestas por el mercado, normativas gubernamentales y también las de carácter medio ambiental.

En los últimos años, la demanda de combustibles ha tenido un ascenso considerable, y a su vez con la mejor calidad posible, con menor carga contaminante y menor riesgo para el medio ambiente (por las regulaciones asociadas al contenido de benceno, el cual es perjudicial para la salud, y en general de aromáticos en las gasolinas de uso comercial). Estas nuevas exigencias han influido en las refinerías y estas han decidido mejorar las etapas que proporcionen esta calidad al producto, un ejemplo lo constituye la isomerización de naftas ligeras.

La fracción de nafta virgen ligera formada básicamente por los hidrocarburos de cinco y seis átomos de carbono posee un bajo octanaje (en el orden de las 70 unidades) debido a la poca proporción de hidrocarburos ramificados. La

isomerización de este corte hace posible su transformación en un producto valioso con octanaje que va desde 84 hasta 92 RON (Número de Octano Investigativo), siendo un componente perfecto para la mezcla de gasolina. La inclusión de un isomerizador en el esquema de una refinería permite elevar el octanaje en la gasolina entre 1 % y 3 %, además de hacer posible el ajuste del corte de alimentación al reformador para reducir el contenido de benceno, incorporándolos a la materia prima del isomerizador.

En la actualidad se estima que internacionalmente la proporción de isomerizado en el *pool* de gasolina es 1:1 respecto a la nafta reformada reduciendo así el contenido de aromáticos totales en la gasolina cuya presencia está regulada en el orden del 35 %. Son numerosas las referencias acerca de la conversión de reformadores semiregenerativos tradicionales en isomerizadores por la similitud de muchos de sus componentes.

En estos tiempos el *pool* de gasolina terminada que se prepara asume como componente la corriente de nafta ligera procedente de la planta de finales ligeros y en muchas ocasiones excedentes de nafta pesada, creados por situaciones operacionales o por altos rendimientos de la misma en la materia prima que no pueden o no resultan ser asumidos por la planta de reformación catalítica, teniendo ambos bajos valores en el parámetro RON (número de octano investigativo), marcador de calidad que incide directamente en su valor comercial. Al no tener otro destino para ambos componentes ni contar con una logística que permita comercializarlo y teniendo en cuenta que contamos con una planta de isomerización montada sin operar se considera que se pueda subir este indicador en la corriente de la nafta ligera y con ello el valor comercial del producto y a su vez el margen de refino de la Empresa.

Por estas razones se hace de vital importancia la puesta en marcha de la unidad isomerizadora de pentanos y hexanos.

En estudios realizados en la refinería (Molina, 2014) se propuso cuál sería el esquema más apropiado de isomerización para la planta (sección 500) que se encuentra ubicada en la refinería Camilo Cienfuegos de la provincia de Cienfuegos.

En dicha investigación se recomienda el desarrollo de un modelo de simulación que permita evaluar las operaciones que incluye el proceso en su totalidad.

Problema:

No se cuenta con una herramienta que permita la evaluación del proceso de isomerización de la nafta ligera que pueda ser utilizada para el control operacional y la toma de decisiones en la sección 500 de la Refinería Camilo Cienfuegos.

Hipótesis:

Si se desarrolla un modelo simulado del esquema propuesto para la isomerización de las naftas ligeras en la sección 500, se podrá realizar una evaluación de la operación, así como su control operacional.

Objetivo General:

Obtener un modelo de simulación de esquema propuesto para la isomerización de las naftas ligeras en la sección 500.

Para cumplir con el objetivo anterior se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. Seleccionar una herramienta informática adecuada para desarrollar el modelo de simulación.
2. Seleccionar la termodinámica que represente adecuadamente el sistema estudiado.
3. Desarrollar el modelo de simulación utilizando la herramienta informática, termodinámica y parámetros de evaluación seleccionados.
4. Validar el modelo de simulación usando como base un caso de estudio y parámetros de diseño.
5. Estudiar elementos de la operación del proceso a través del modelo de simulación.

Capítulo 1: Análisis Bibliográfico

1.1 Proceso de refinación

El petróleo crudo o no refinado tiene poco uso o valor de uso en la industria actual por lo que es necesario transformarlo en productos de mayor valor agregado. El valor del petróleo se relaciona directamente con el rendimiento de los productos que de él se obtienen y está sujeto al valor que se le da en el mercado a estos productos. El principal objetivo económico de la refinación consiste en maximizar el valor agregado en la conversión del petróleo crudo en productos terminados. (Sauvanaud, 2004)

Una refinería moderna debe contar con infraestructura suficiente para mantener la continuidad de su operación, es decir, tener flexibilidad para realizar mantenimientos, sin la interrupción total de la producción.

PEMEX (2013) y FING (2013) reconocen las plantas principales con las que debe contar una refinería, además definen sus funciones siendo:

-Destilación combinada primaria y a vacío. La función de estos procesos es descomponer o separar el petróleo crudo en sus diferentes componentes por medio de destilación atmosférica y al vacío.

-Coquización retardada. La función de esta planta es procesar el residuo de vacío para obtener productos de mayor valor agregado como gas, gasolina y gasóleos.

-Hidrodesulfuración de gasolina. La función de este proceso es eliminar de la gasolina el contenido de productos indeseables como azufre y nitrógeno.

-Hidrodesulfuración de nafta catalítica. La función de este proceso es disminuir el contenido de azufre por debajo de 15 partes por millón de la gasolina catalítica producto.

-Hidrodesulfuración de gasóleos de coquización y de vacío. La función principal de este proceso es disminuir el contenido de azufre en el diesel y en el gasóleo producto.

-Desintegración catalítica. La función principal de este proceso es la obtención de gasolina catalítica de alto octano mediante el craqueo catalítico.

-Reformación de naftas. La función principal de este proceso es la obtención de gasolina reformada de alto octano.

-Isomerización de pentanos y hexanos. La función principal de este proceso es incrementar el índice de octano de la gasolina de carga.

-Isomerización de butanos. La función principal de este proceso es la obtención de isobutano.

-Alquilación. La función principal de este proceso es la obtención de gasolina (alquilado) de alto octano.

-Hidrógeno. La función de este proceso es la obtención de hidrógeno de alta pureza.

-Azufre. La función principal de este proceso es la recuperación del azufre de los gases ácidos.

-*Hydrocracking*. La función principal de este proceso es convertir el diesel a gasolina.

1.1.2 Subproductos del crudo

Las refinerías son grandes plantas de producción de gran densidad de capital, con sistemas de procesamiento extremadamente complejos. En ellas se convierte el petróleo crudo y otros flujos de entrada en docenas de (sub)productos refinados.

El grupo Alfonso Gallardo (2007) reconoce que los principales subproductos son:

-Gas licuado de petróleo (GLP)

- Gasolina
- Combustible pesado
- Queroseno (para iluminación y calefacción)
- Combustible diesel
- Materias primas de petroquímicos
- Aceites lubricantes y ceras
- Gasóleo de calefacción
- Aceite combustible (para generación de energía eléctrica, combustible marino, calefacción industrial y urbana)
- Asfalto (para pavimentación y techado)

Romero, 2011 refiere en su artículo que entre los subproductos derivados del crudo, los combustibles para transporte son los de mayor valor, mientras que los aceites combustibles y el asfalto son los de menor valor.

Muchos productos refinados, como la gasolina, se producen en diferentes grados, para cumplir con diferentes especificaciones y estándares (por ejemplo, índices de octano o contenido de azufre).

1.1.3 Componentes químicos del petróleo crudo

En las refinerías del mundo, se procesan, en mayor o menor volumen, cientos de tipos diferentes de crudos (identificados generalmente por su origen geográfico). (Santo y Vilar, 2012)

Cada tipo de crudo es único y es una mezcla compleja de miles de componentes. La mayoría de los componentes presentes en el petróleo crudo son hidrocarburos, componentes orgánicos compuestos por átomos de hidrógeno y carbono. Asimismo, se pueden encontrar no sólo carbono e hidrógeno, sino también pequeñas (pero importantes) cantidades de otros elementos, en particular azufre, nitrógeno y ciertos metales (por ejemplo, níquel y vanadio). (AIP, 2010)

Las propiedades físicas y químicas de cualquier tipo de hidrocarburo o molécula dependen no sólo de la cantidad de átomos de carbono en la molécula, sino también de la naturaleza de los enlaces químicos entre ellos. Los átomos de carbono se unen fácilmente entre sí (y con hidrógeno y

heteroátomos) en diferentes formas (enlaces simples, dobles y triples) para formar diferentes clases de hidrocarburos. Las parafinas, los aromáticos y los naftenos son componentes naturales del petróleo crudo, y también se producen mediante varias operaciones de refinación. Normalmente las olefinas no están presentes en el petróleo crudo. Se producen en determinadas operaciones de refinación destinadas principalmente a la producción de gasolina. Los componentes aromáticos tienen mayor proporción de carbono-hidrógeno (C/H) que los naftenos, los cuales, a su vez, tienen mayor proporción de C/H que las parafinas. (Ronald y Colwell, 2009)

Cuanto más pesado (más denso) es el crudo, más alta es su proporción de C/H por lo que se hacen más intenso y costoso los procesos químicos de su refinación para producir determinados volúmenes de gasolina y combustibles destilados. (MathPro, 2011)

La composición química del petróleo crudo y su división en fracciones de distintos puntos de ebullición se incluyen en los requisitos de inversión de la refinería y la energía que estos utilizan, son los dos aspectos más importantes del costo total de la refinación. (OSHA, 2012)

Las proporciones de los diferentes tipos de hidrocarburos, su distribución de la cantidad de carbono y la concentración de los distintos elementos en un tipo de crudo, determinan el rendimiento y la calidad de los productos refinados que se pueden producir en la refinería a partir de dicho crudo. Los diferentes tipos de crudo requieren distintas refinerías y operaciones para maximizar el valor de la gama de productos que producen. (Lozowy, 2014)

Las refinerías producen docenas de productos refinados (que varían desde los muy livianos, como el gas licuado (GLP), a los muy pesados, como el aceite combustible residual. Esto sucede no sólo por la demanda comercial de los diferentes productos, sino también por el hecho de que las propiedades del petróleo crudo y las capacidades de las refinerías imponen restricciones a los volúmenes de cualquier producto que se pueda elaborar en una refinería. Las refinerías pueden cambiar sus operaciones de refinación para responder a los constantes cambios en el petróleo crudo y los mercados de productos. Pero sólo dentro de los límites físicos que se determinan por las características de funcionamiento de sus refinerías y las propiedades de los petróleos crudos que procesan. (Wiley, 2007)

1.1.4 Clasificación de las refinerías según su configuración y complejidad

Las características de configuración y operación de cada refinería son únicas. Están determinadas principalmente por la ubicación de la refinería, su diseño, el tipo de crudo preferido para refinación, los requisitos del mercado para los productos refinados y las especificaciones de calidad (por ejemplo, contenido de azufre) para los productos refinados.

El término configuración denota el conjunto específico de unidades de procesos de refinación de una refinería determinada, la capacidad de producción, sus características técnicas destacadas y los patrones de flujo que conectan estas unidades. Si bien no existen dos refinerías con configuraciones idénticas, éstas se pueden clasificar en grupos con características similares, que se definen según su complejidad. (Castro y Grossman, 2014)

Passos (2011) plantea que a mayor complejidad de una refinería, mayor es la intensidad de las inversiones de capital de la refinería y su capacidad de agregar valor al petróleo crudo mediante:

- La conversión de más fracciones de crudo pesado en productos livianos y de alto valor.
- La elaboración de productos livianos conforme las especificaciones de calidad más estrictas (por ejemplo, combustibles con contenido ultra bajo de azufre).

Según MathPro (2011) las refinerías pueden clasificarse:

a) Con unidades de destilación atmosférica:

Realizan la destilación del crudo y ciertas operaciones de apoyo esenciales. No tienen capacidad de modificar el patrón de rendimiento natural de los petróleos crudos que procesan. Sólo realizan el fraccionamiento del crudo en gas liviano y combustible de refinería, nafta (punto de ebullición de la gasolina), destilados (queroseno, combustible pesado, diesel y combustible de calefacción) y el aceite combustible residual o pesado.

b) Con esquema de *hydroskimming*:

No sólo incluyen la destilación del crudo y los servicios de apoyo, sino también el reformado catalítico, diferentes unidades de hidrotratamiento y mezcla de productos. Estos procesos permiten convertir la nafta en gasolina y controlar el contenido de azufre de los productos refinados.

c) De conversión (o craqueo):

Incluyen no sólo todos los procesos presentes en el esquema de *hydroskimming*, sino también, el craqueo catalítico. Estos dos procesos de conversión transforman las fracciones de petróleo crudo pesado (principalmente gasóleo), las cuales tienen altos rendimientos naturales en la mayoría de los petróleos crudos, en flujos de refinación liviana que se añaden a la gasolina, combustible pesado, diésel y materias primas de petroquímicos.

d) De conversión profunda (o coquización):

Son, según lo indica su nombre, una clase especial de refinerías de conversión. Éstas incluyen no sólo el craqueo catalítico para convertir las fracciones de gasóleo, sino también la coquización.

1.1.5 Métodos de mejoramiento de octanaje

Los “combustibles” derivados del petróleo tienen propiedades que les son características. Una de éstas es el octanaje: porcentaje de isooctano en la mezcla de hidrocarburos que constituyen la gasolina y es una referencia de la fuerza con la que arde la gasolina y cuántas detonaciones produce en el motor. La escala de octanaje le confiere el valor de 100 al isooctano puro y el valor de cero al heptano, debido a que los hidrocarburos ramificados producen mejor detonación que los de cadena lineal. Los principales métodos para mejorar este patrón según lo plantea Urpí (2000) son:

Reformación catalítica

La reformación catalítica es un proceso químico utilizado en la refinación del petróleo. Es fundamental en la producción de gasolina. Su objetivo es aumentar el número de octano de la nafta pesada obtenida de la destilación atmosférica del crudo. Se consigue mediante la transformación de hidrocarburos parafínicos y nafténicos en iso-parafínicos y aromáticos. Estas

reacciones producen también hidrógeno, un subproducto valioso que se aprovecha en otros procesos de refinación. Para ello, se utilizan altas temperaturas, presiones moderadas y catalizadores sólidos de platino y otros metales nobles soportados sobre alúmina. (Montes de Oca, 2013)

Alquilación

La alquilación es un proceso que permite obtener componentes de gasolina a partir de hidrocarburos insaturados en propano y butano. Consiste, en la adición de iso-butano a compuestos: olefínicos, butenos (especialmente n-buteno), propileno y también amilenos (Urpí, 2000).

Isomerización

La isomerización pertenece a los procesos catalíticos selectivos, ya que reorganiza las moléculas de hidrocarburo, pero sólo convierte las cadenas rectas de los hidrocarburos parafínicos normales en una cadena ramificada (iso-parafinas). Por destilación se separa la corriente de nafta en dos cortes, ligero y pesado; el ligero que corresponde a moléculas de cinco y seis átomos de carbono se alimenta al proceso de isomerización, mientras que el pesado, con moléculas de siete a once átomos de carbono, es la carga al proceso de reformación antes descrito. (Mesa, 2001)

1.2 Características del proceso de isomerización

Se entiende por isomerización a la transformación de la estructura molecular en otra (isómero) cuyos átomos componentes son los mismos pero dispuestos en una estructura geométrica distinta. Como los isómeros pueden tener diferentes propiedades tanto físicas como químicas, la transformación ofrece la posibilidad de una mejora en las características del producto. (AIP, 2010)

Este proceso convierte el n-butano, n-pentano y n-hexano en sus respectivos isómeros ramificados. Los dos procesos de isomerización claramente diferenciados son: isomerización de butano que produce materia prima para la alquilación y la isomerización del pentano-hexano que incrementa el valor agregado a las corrientes de naftas livianas de *toppingy* obteniendo una nafta isomerizada de mayor octanaje que se utiliza para elevar el índice de octano. (Rice y Lynn, 2010)

Algunos de los componentes parafínicos normales de cadena recta de la nafta ligera de destilación directa, tienen un bajo índice de octano, tales componentes se convierten en isómeros de cadena ramificada y alto octanaje reorganizando los enlaces entre átomos, sin cambiar el número o la clase de átomos. (Kraus,2011).

Las reacciones de isomerización del n-pentano y n-hexano están limitadas termodinámicamente y en consecuencia, la conversión es mayor a temperaturas bajas. Estas tienen la característica de ser muy rápidas, tanto que, las concentraciones reales son cercanas a las del equilibrio (Urpí, 2000). Actualmente se focaliza la isomerización de fracciones de pentano y hexano como componentes de naftas, a fin de evitar el uso de aditivos en base a plomo. (Montesde Oca, 2013).

La nafta ligera de destilación directa tiene un índice de octano entre 65-70, dependiendo del tipo de crudo y corte de destilación. Los valores de octano de los componentes normal parafínicos son inferiores que los de los productos ramificados.(OSHA, 1991)

La isomerización puede ser simple: configuración de un paso (*once-through*) o con reciclo de la fracción no transformada después de hacer una separación de los componentes deseados, bien por destilación o por adsorción en tamices moleculares.(Chica,1999)

Los procesos de isomerización presentan gran flexibilidad en la composición de la carga, es decir, se puede variar la configuración de la carga una vez construida la unidad. No se precisan en general tratamientos específicos para la carga a la isomerización salvo desulfuración y secado, dependiendo del tipo de catalizadora emplear, ni se requiere un pre-fraccionamiento estricto para la eliminación de componentes de 6 átomos de carbono cíclicos o 7 átomos de carbono, salvo en presencia de cantidades grandes de benceno, ciclohexanos e hidrocarburos con más de 7 átomos de carbono. (Amanqui y Aguilar, 2011)

Como un beneficio adicional del proceso, la isomerización elabora un producto que prácticamente no contiene azufre ni benceno. Por ende, algunas refinerías han agregado recientemente la capacidad de isomerización, como un medio para cumplir los estrictos estándares de benceno en su producción de gasolina. (Montes de Oca, 2013)

1.3 Características de las reacciones de isomerización

Las reacciones de isomerización son tan rápidas que las concentraciones reales son cercanas a las del equilibrio; por lo que la de las n-parafinas ocurren con pequeños efectos caloríficos. Altas relaciones hidrógeno/hidrocarburo reducen la presión parcial de los hidrocarburos, por lo que favorecen así la formación de isómeros. Este proceso para las n-parafinas no consume o produce hidrógeno. (Montes de Oca, 2013; Benítez, 2004).

Las reacciones de isomerización únicamente cambian la disposición de los átomos en la molécula, por tanto se mantiene, su peso molecular. La alimentación típica a las plantas de isomerización son corrientes ricas en naftas ligeras. Estas reacciones ocurren en presencia de catalizador y en atmósfera de hidrógeno, aunque el consumo neto de este componente es muy bajo (Grupo Alfonso-Gallardo, 2007)

La isomerización de las olefinas por saturación y aromatización es responsable del alto número de octano. La mayor velocidad de las reacciones de transferencia de hidrógeno en las olefinas de cadena ramificada, da lugar a que las razones iso-parafinas a parafinas normales sean mayores que las razones de equilibrio de las olefinas originales. Además, los naftenos actúan como dadores de hidrógeno en las reacciones de transferencia con olefinas para dar lugar a isoparafinas y aromáticos. (Mackler, 2012)

Kraus (2011) plantea que en un proceso normal de isomerización de pentano/hexano, la carga seca y desulfurada se mezcla con una pequeña cantidad de cloruro orgánico e hidrógeno reciclado, y se calienta a la temperatura del reactor. A continuación se hace pasar sobre un catalizador metálico soportado (de contacto) en el primer reactor, donde se hidrogenan el benceno y las olefinas. Seguidamente, el material pasa al reactor de isomerización, donde las parafinas se isomerizan catalíticamente en isoparafinas, se enfrían y pasan a un separador. El gas y el hidrógeno del separador, con hidrógeno de reposición, se reciclan. El líquido se neutraliza

con materiales alcalinos y se envía a una columna rectificadora, donde el cloruro de hidrógeno se recupera y recicla.

1.4 Secciones de la unidad de isomerización

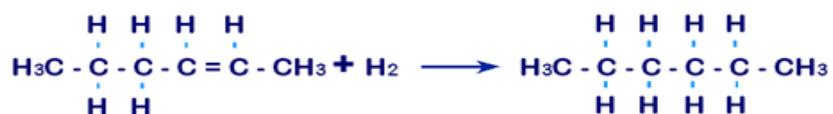
Según Hernández (2011), la unidad de isomerización debe contar con dos secciones: la de hidrotratamiento de naftas (Anexo1), y la de reacción de isomerización (Anexo 2). Rice y Lynn (2010) coinciden con este criterio.

- Hidrotratamiento de naftas (HTN):

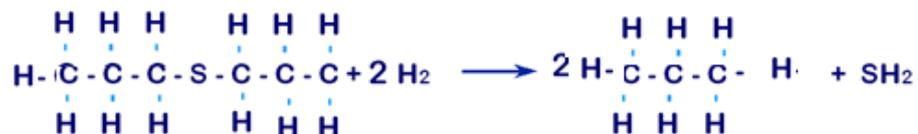
Tiene como objetivo la separación del corte de pentanos y hexanos de la carga, y su posterior tratamiento con hidrógeno para eliminar los contaminantes del catalizador de la sección de reacción de isomerización (Penex). La sección separa en un *splitter* el corte isomerizable de pentanos y hexanos de la nafta liviana por la parte superior, y el corte de heptanos y superiores, no isomerizables por la parte inferior. La corriente de pentanos y hexanos se pone en contacto con hidrógeno y es llevada a la temperatura necesaria para que se produzcan las reacciones, a través de un horno de proceso, antes de ingresar al reactor. En el reactor se producen las reacciones de hidrotratamiento sobre un catalizador para eliminar los contaminantes: metales, olefinas y compuestos de azufre y nitrógeno. (Hernández, 2011; Rice y Lynn 2010)

Reacciones que ocurren en esta sección:

Saturación de olefinas: saturación de los compuestos olefínicos a parafinas. El calor liberado por la reacción de olefinas en el catalizador de Penex afecta la termodinámica de la reacción de isomerización: (Hernández, 2011)



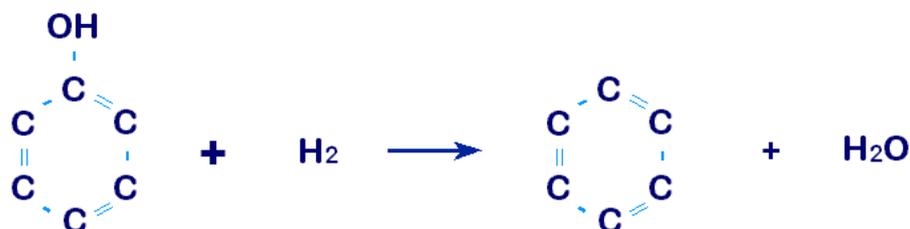
Desulfurización: eliminación de los compuestos de azufre que desactivan en forma temporaria los sitios activos del catalizador de la sección de reacción. (Hernández, 2011)



Denitrificación: eliminación de los compuestos de nitrógeno que desactivan en forma permanente los sitios activos del catalizador de Penex. (Hernández, 2011)



Eliminación de oxigenados: eliminación de los compuestos metálicos que reaccionan con el sitio ácido del catalizador de Penex desactivándolo en forma permanente. (Hernández, 2011)



Demetalización: eliminación de los compuestos metálicos que se depositan sobre los sitios activos del catalizador de Penex desactivándolo en forma permanente, reaccionando un compuesto metálico con el catalizador (co-metal). (Hernández, 2011)

Variables que influyen en la reacción según ofrece Hernández (2011):

Temperatura: Una temperatura de operación por encima de los 350°C comienza a producir reacciones de craqueo sobre el catalizador y de formación de carbón.

Presión: Una elevada presión en el reactor alarga la vida del catalizador debido a que evita la formación de carbón y favorece la eliminación de los contaminantes.

Relación hidrógeno a hidrocarburo: El hidrógeno mantiene el contacto físico entre el hidrocarburo y el catalizador y asegura que las reacciones químicas se produzcan en los sitios activos del catalizador.

Velocidad espacial: Una velocidad espacial superior a la de diseño, menor tiempo de contacto, puede ocasionar que las reacciones no se produzcan totalmente; mientras que una velocidad espacial inferior a la de diseño, mayor tiempo de contacto, favorece las reacciones de craqueo y deposición de carbón.

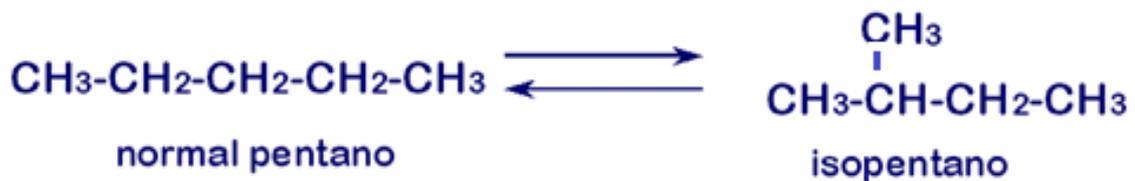
- Reacción de Isomerización (PENEX):

Según los autores Hernández 2011; Rice y Lynn 2010 esta sección tiene como objetivo la isomerización de las parafinas lineales de pentanos y hexanos. La carga de pentanos y hexanos, ya tratada en HTN, pasa a través de unos secadores cuya función es la de adsorber el agua disuelta, ya que ésta se comporta como un oxigenado frente al catalizador de Penex. Luego de pasar por los secadores la corriente se lleva a temperatura de reacción mediante un sistema de intercambio con el efluente del mismo. Mientras que en el primer reactor se favorece la cinética de las reacciones operando a mayor temperatura, en el segundo se favorece el equilibrio termodinámico de las mismas mediante su operación a menor temperatura. Durante este período, el segundo reactor puede mantenerse en operación continua, disminuyendo moderadamente la conversión. Las reacciones de isomerización son exotérmicas, lo cual incrementa la temperatura a través del reactor. El equilibrio requiere que la temperatura de salida permita la adecuada actividad del catalizador, por medio de un enfriamiento intermedio entre los dos reactores. Esto resulta que la mayor parte de la isomerización se lleve a cabo a alta velocidad en el primer reactor y la parte final a temperatura más baja para aprovechar el equilibrio más favorable.

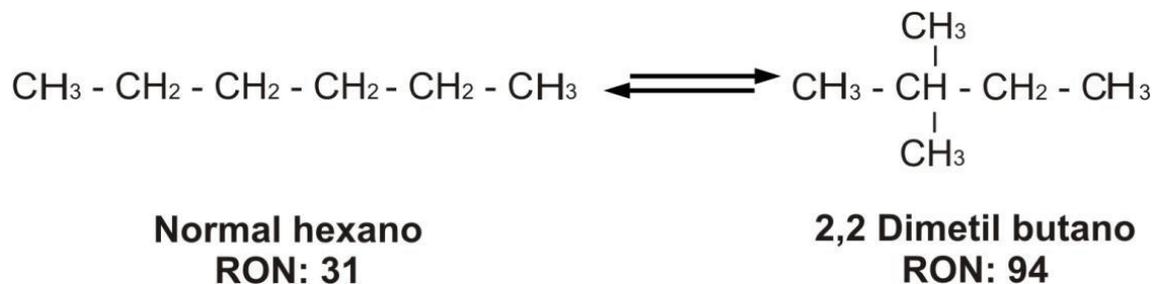
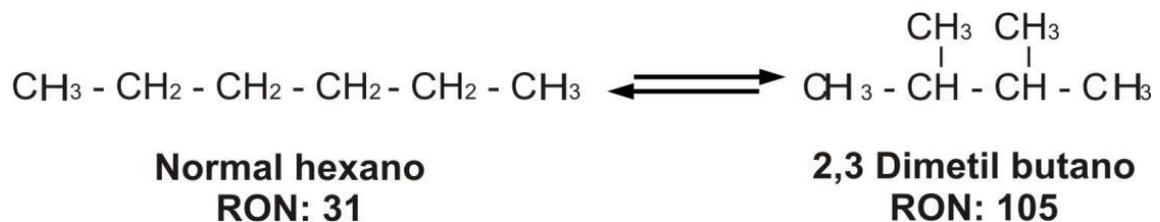
El catalizador de los reactores de Penex está compuesto por platino sobre alúmina clorada. El efluente del segundo reactor es enviado a una torre estabilizadora para despojar los compuestos livianos de la nafta isomerizada. (PEMEX, 2005)

Según Hernández (2011) las reacciones principales de esta sección son:

Isomerización de n-C₅



Isomerización de n-C₆



PEMEX (2005) coincide con lo planteado anteriormente pero propone que junto con las dos secciones de hidrotratamiento y reacción de isomerización se le añada la etapa de estabilización:

El propósito de la torre estabilizadora es la separación de hidrógeno disuelto, cloruro de hidrógeno (HCl) y gases de craqueo que contiene el isómero.

Tabla 1.1. Valor octánico de los compuestos de pentanos/hexanos (Hernández, 2011)

Componente	RON	MON
n-pentano (carga)	62	61
isopentano (isómero obtenido)	93	90
ciclopentano	101	85
n-hexano (carga)	30	25
2,2-dimetil butano (isómero obtenido)	93	93
2,3-dimetil butano (isómero obtenido)	104	94
2-metil pentano	73	73
3-metil pentano	74	74
metilciclopentano	95	80
ciclohexano	83	77

En esta tabla se evidencia como la nafta ligera proveniente de la planta de productos ligeros contiene un bajo valor octánico, y al pasar por el proceso de isomerización aumenta su valor.

Molina (2014) plantea que la isomerización de la carga de nafta liviana puede realizarse mediante la utilización de diferentes esquemas, dependiendo de la composición de hidrocarburos y el contenido de contaminantes de la alimentación. Sin embargo en cada refinería, pueden existir diferencias en las secciones para realizar la isomerización de esta carga.

En la actualidad existen diferentes diseños de operación, pueden ser clasificados dentro de dos categorías:

-La isomerización en un paso: Procesa alimentación fresca exclusivamente. Pueden alcanzarse valores de RON entre 77-80 cuando se utilizan catalizadores de base zeolita y 82-85 con catalizadores promovidos por cloruros.

-La isomerización con reciclo: Contempla la recirculación de la fracción no transformada después de hacer una separación de los componentes deseados, bien por destilación o por adsorción en tamices moleculares. El número de octano obtenible puede alcanzar 92 RON, en función de la

composición de la alimentación, configuración y catalizadores usados. El rendimiento en isomerizado es de 95-98 % según el número de octano exigido a la corriente final. Además se plantea que pueden existir esquemas de isomerización con una torre deisohexanizadora, con eliminación del i-hexano y reciclo, isomerización con reciclo de n-pentano, n-hexano y metil pentanos e isomerización con una torre deisopentanizadora con eliminación del i-pentano del inyector y deisohexanizadora eliminación del i-hexano del isomerizado.

Según Amador y Chavarro (2012) numerosos procesos de la industria química básica y secundaria, y de tratamiento de fracciones de petróleo emplean reactores con lecho de catalizador, la isomerización también forma parte del uso de los reactores con lecho de catalizador específicamente de lecho fijo. (Iborra, 2013)

1.6 Catalizadores de isomerización

El proceso de isomerización tradicionalmente se lleva a cabo en reactores con lecho catalítico fijo.

En los últimos años una parte importante del estudio sobre catalizadores se ha enfocado en la catálisis heterogénea, reacciones en fase sólido-gas. La razón de esto se debe a que los catalizadores en sistemas homogéneos son difíciles de manejar, son corrosivos, algunos son tóxicos, separarlos de la corriente de los productos implica un elevado costo y normalmente se requiere de una etapa de proceso adicional. El proceso de isomerización requiere de catalizadores con una acidez adecuada que permitan catalizar selectivamente la reacción hacia productos isomerizados. Pese a que actualmente se utiliza un catalizador sólido ácido en base clorada ($\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Cl}$) para la isomerización de parafinas ligeras (butano - hexano), se presentan problemas de desactivación del catalizador por pérdida de sitios ácidos. Lo que conlleva a la necesidad de suministrar continuamente compuestos clorados para mantener su actividad. Esto implica problemas severos de corrosión en las instalaciones de las refinerías. El Pt/H-Mordenita es otro catalizador de isomerización, este no presenta el problema de desactivación

por pérdida de sitios ácidos, sin embargo, produce una gasolina con menor número de octano comparado con el catalizador de alúmina clorada. Todo esto lleva a que diversos grupos de investigación tanto a nivel industrial como académico estén interesados en el desarrollo de catalizadores sólidos ácidos que representen una solución a los problemas de desactivación. (Hernández, 2013)

Los catalizadores para la isomerización de parafinas ligeras que se emplean a nivel comercial en la actualidad son el Pt/Alúmina clorada y Pt/H-mordenita, sin embargo la desactivación causada por azufre y agua y los problemas de corrosión ligados a la presencia del cloro que ocurren con el catalizador Pt/Alúmina hacen más atractivo el uso de Pt//H-mordenita a pesar de requerir mayor temperatura de reacción. (García y col., 2005)

El mecanismo de reacción que más se acepta para la isomerización requiere de catalizadores bifuncionales. En el caso de la isomerización de n-butano con catalizadores del tipo Pt/H-mordenita, éste se deshidrogena en una primera etapa sobre la función metálica del catalizador, la olefina que se produce se isomeriza sobre los sitios ácidos. Finalmente se hidrogena sobre el sitio metálico para producir la isoparafina. Un mecanismo de reacción similar se espera que ocurra en la isomerización de n-pentano. (García y col., 2005)

En la sección de isomerización (PENEX) se recomienda usar catalizadores clorados, se adiciona tetracloruro de carbono como promotor de cloruros a la alimentación y se convierte a cloruro de hidrógeno en el reactor, el cual se elimina por medio del gas estabilizador. La cantidad de gas estabilizador es pequeña, ya que la naturaleza selectiva del catalizador produce poco hidrocraqueo del pentano-hexano. El gas estabilizador se somete a un lavado cáustico para la eliminación de cloruro de hidrógeno antes de que se envíe al sistema de gas de la refinería. El catalizador no es corrosivo, la presencia de cloruro de hidrógeno se elimina durante la operación y se evita la presencia de humedad al sistema, lo cual permite el uso de equipos de acero al carbón. (PEMEX, 2005)

Los catalizadores de óxido de zirconia sulfatada (Pt/SO₄²⁻/ZrO₂) dado a sus propiedades súper ácidas tienen una alta actividad. Presentan una larga vida entre 8 y 10 años. Reúne las ventajas de los catalizadores para media y bajas

temperaturas entre 180-210 °C, logran una mayor selectividad a isómeros. Al igual que las zeolitas posee mayor robustez en lo que respecta a la sensibilidad a impurezas y además son regenerables utilizando un procedimiento de oxidación sencillo (Amanqui y Aguilar, 2011).

1.7 Simulación de procesos

La simulación de procesos es una potente herramienta de la que disponen los ingenieros de procesos para realizar con relativa rapidez y precisión el análisis de un sistema o proceso. Se utiliza en la ingeniería química industrial para representar un proceso mediante otro que lo hace mucho más simple y entendible. (Brenner, 2000) (García y col., 2008)

La simulación se relaciona con un modelo que representa un sistema o sus partes el cual puede ser estudiado a través de la manipulación y evaluación numérica de los parámetros de dicho modelo. No es necesario que los resultados de la simulación se correspondan exactamente con el sistema real pero deben de permitir establecer las tendencias principales y predecir con suficiente certeza el comportamiento del sistema. (Brenner, 2000)

Generalmente la aplicación de la simulación está relacionada con el análisis y diseño de sistemas complejos dada la dificultad de experimentar con éstos en condiciones reales.

El autor Godoy (2008) plantea que entre las aplicaciones de la simulación de procesos se encuentran:

- Diseño de estrategias de control
- Optimización de parámetros del proceso (mejores procesos)
- Tiempo de evolución del proceso (arrancada y parada) (análisis de riesgos)
- Entrenamiento de operadores
- Definición de procedimientos para reducir las operaciones en estado no estacionario
- Diseño y síntesis de procesos
- Optimización del mantenimiento
- Adquisición de información del proceso.

Actualmente existen diferentes simuladores comerciales entre los que se encuentran: *CHEMCAD*, *Aspen Plus*, *HYSYS*, *PetroSIM*, *PRO/II* y otros. Cada

uno tiene características de simulación específicas que los hacen más adecuados para unas aplicaciones que para otras.

- *HYSYS* es un *software* que se desarrolla por la firma canadiense *Hyprotech* en el año 2003 y que se adquiere posteriormente por *Aspentech*, muy utilizado en la industria petroquímica, que permite simular procesos en estado estacionario y dinámico. Este simulador es soportado por *Windows*, cuenta con una interfaz amigable con el usuario y una amplia base de datos. (Godoy, 2008). *Hysys* es un programa interactivo enfocado a la ingeniería de procesos y la simulación, que se puede utilizar para solucionar toda clase de problemas relacionados con procesos químicos. Este simulador cuenta con una interfaz muy amigable para el usuario, además de permitir el empleo de operadores lógicos y herramientas que facilitan la simulación de diversos procesos. Es un simulador bidireccional, ya que el flujo de información va en dos direcciones (hacia delante y hacia atrás). De esta forma, puede calcular las condiciones de una corriente de entrada a una operación a partir de las correspondientes a la corriente de salida sin necesidad de cálculos iterativos. Posee un entorno de simulación modular tanto para estado estacionario como para régimen dinámico. Es un *software* que permite la simulación de plantas petroquímicas y afines. (Henaó y Vélez, 2002)
- *PRO/II* es el programa de insignia *SimSci-Esscor's Process Engineering Suite (PES)*. Este simulador realiza balances rigurosos de masa y energía para una amplia gama de procesos en estado estable. *PRO/II* combina los recursos de los datos de una biblioteca química y métodos de predicción de propiedad termodinámicos con las técnicas de funcionamientos de unidad más avanzada y flexible. El beneficio de los ingenieros con los medios computacionales es la realización de balances masa y energía que se necesitan para modelar la mayoría de los procesos químicos en estado estacionario como son: los procesos del petróleo, del gas natural, de sólidos procesados y las industrias de polímeros. (*PRO/II*, 2007)
- *AspenPlus*: El sistema avanzado para ingeniería de procesos *Advanced System for Process Engineering (ASPEN)* es, en el mercado, el líder en herramientas de modelación de proceso, de diseño conceptual, optimización y monitoreo del desempeño, para la industria química, polímeros, especialidades químicas, metales y minerales. Se desarrolla en la década de

1970 por investigadores del Instituto de Tecnologías de *Massachusetts* (*Massachusetts Institute of Technology* MIT) y se comercializa desde 1980 por una compañía denominada *AspenTech*. *Aspen Plus* es un simulador estacionario, secuencial modular (en las últimas versiones permite la estrategia orientada a ecuaciones). Actualmente es posible que sea el más extendido en la industria. Se ha utilizado para modelar procesos en industrias: química y petroquímica, refinado de petróleo, procesamientos de gas y aceites, generación de energía, metales y minerales, industrias del papel y la pulpa y otros. *Aspen Plus* tiene la base de datos más amplia entre los simuladores de procesos comerciales, e incluye comportamiento de iones y de electrolitos. Además modela y simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra. Posee herramientas para cálculos de costos y optimizaciones del proceso, generación de resultados en forma gráfica y en tablas. (*Aspen Technology*, 2015)

- *Chemcad*: Nace en 1984 cuando un profesor universitario formó un equipo para desarrollar un simulador de procesos para computadoras personales. El simulador fue vendido a la sección de *software* de *McGraw Hill* y luego se siguió desarrollando y fue distribuido por *Chemcad* con una nueva interface de usuario y otras propiedades adicionales. Este sistema es muy usado en todo el mundo para el diseño, operación y mantenimiento de procesos químicos en una gran variedad de industrias incluyendo la exploración de petróleo y gas; y naturalmente en procesos químicos, farmacéuticos, biocombustibles y procesos de fábricas industriales. Según Pacheco (2006), de forma general este *software*, como una herramienta de productividad, tiene muchas ventajas entre las que cabe mencionar las siguientes:

-Incremento en la productividad por el uso de información obtenida a partir de la simulación diaria de cálculos relacionados con las condiciones de operación.

-Maximizar la rentabilidad de las operaciones por el diseño más eficiente de nuevos procesos y equipos.

-Reducción de costos e inversiones de capital por la optimización y solución de los cuellos de botella existentes en los procesos y en los equipos.

- *Petro-SIM* v6.0: Es un simulador de procesos gráfico que combina la destacada tecnología *Profimatics* (R) de KBC y modelos de procesos comprobados para efectuar simulaciones rigurosas de refinerías y plantas petroquímicas. *Petro-SIM* permite que los ingenieros de procesos optimicen, analicen y evalúen las complejas interacciones que se producen en una refinería. Mientras realizan simulaciones de múltiples unidades, determinan el impacto de diferentes materias primas y objetivos operativos, controlan el rendimiento de los procesos, efectúan análisis de inversión o actualizan un modelo de programa lineal. (Manual de *Petro-SIM*, 2015)

Petro-SIM, una interfaz basada en *HYSYS Refinery* (R), es una herramienta fácil de usar que ayuda a los usuarios a prever cómo el cambio en una variable puede afectar a miles de otras. Su arquitectura totalmente adaptable permite que los ingenieros optimicen una unidad de proceso determinada con el fin de mejorar el funcionamiento diario, o bien simulen una refinería entera para estimar con precisión el impacto de los cambios en los procesos. (KBC, 2015) *Petro-SIM* será capaz de hacer proyecciones realistas sobre los rendimientos y determinar el potencial económico, lo que ayudará a los clientes a tomar mejores decisiones y más informadas.

Petro-SIM permite construir su propia base de datos de ensayos con datos de laboratorio o acceder a la más completa y actualizada base de datos de ensayos de crudos comerciales que incluye más de 400 clases de crudo que se comercializan internacionalmente. La innovadora arquitectura de componentes de KBC y el modelo ajustable de columna de destilación hacen de *Petro-SIM* el conjunto de soluciones de simulación de refinería más completo del mercado.

1.8 Conclusiones parciales

- Se considera que el octanaje es el principal patrón para evaluar la calidad de las gasolinas.
- El proceso de isomerización de la nafta ligera presente en la mezcla de gasolina aumenta el número de octano.
- Las principales secciones que se contemplan en el proceso de isomerización son: hidrotratamiento de naftas (HTN) y reacciones de isomerización (PENEX).
- Se selecciona el simulador de procesos *Petro-SIM* para el estudio del esquema de isomerización, pues se considera adecuado para procesos de refinación.

Capítulo 2: Metodología de la investigación

En este capítulo se realiza una caracterización general del esquema de isomerización (Sección 500) propuesto para la refinería “Camilo Cienfuegos”. Además se explica la metodología que se sigue para la obtención y validación del modelo de simulación del esquema de isomerización.

2.1 Descripción del proceso de isomerización propuesto

En el trabajo presentado por Molina (2014), se define el esquema más adecuado para la isomerización de la fracción de nafta ligera (HK-70) de la refinería “Camilo Cienfuegos”. Dicho esquema propone una torre deisopentanizadora, más una torre de pentanizadora, esquema atípico DIP+DP. De igual forma propone el catalizador más propicio para las reacciones que ocurren según la materia prima que será procesada, siendo el mismo $\text{Pt/ZrO}_2\text{-SO}_4$.

2.1.1. Características generales de la sección 500

La sección 500 de la refinería “Camilo Cienfuegos” estaba destinada inicialmente, según el esquema ruso, a la destilación de la fracción estable de pentano-hexano HK-70 del crudo Romaskino y la isomerización de la fracción de n-pentano. Esto tenía como objetivo obtener un componente iso-parafínico de alto octanaje a ser utilizado como componente de gasolina, pues la fracción hexánica se separaba y se destinaba a otros fines. En el esquema la fracción de i-pentano se separa de la alimentación con el objetivo de no sobrediseñar el reactor y evitar el craqueo de las iso-parafinas a las elevadas temperaturas de reacción (380-400°C). La fracción hexánica y superiores, también se separaban de la alimentación debido a que las reacciones de isomerización del n-hexano no son favorecidas por las altas temperaturas de reacción. El esquema contempla una recirculación a la alimentación de la unidad de la corriente isomerizado estable, con el objetivo de reincorporar al reactor los n-pentanos no convertidos y aumentar el número de octano del

producto final. Este esquema responde a un DIP+DP (Esquema de isomerización con eliminación de isopentanos) atípico. La capacidad de la unidad es de 139 000 t/a, para la primera etapa de construcción de la refinería. (Anexo 3)

2.1.2 Descripción del esquema propuesto de isomerización

Se envían los n-pentanos junto con pequeñas cantidades de parafinas e isoparafinas superiores a carbonos de 5 átomos, olefinas y naftenos hacia el reactor. La mezcla de isomerizado estable con fracción HK-70 se calienta en el intercambiador de calor E-512 hasta 120°C, para luego continuar su enfriamiento en el enfriador por agua E-506. Después de mezclarse con la corriente de gas hidrogenado, pasa por el intercambiador E-509 para incrementar su temperatura hasta 100 °Ca partir de la energía cedida por la corriente de salida del reactor R-501. Para alcanzar las condiciones de reacción la mezcla se calienta en el horno y de ahí pasa al reactor, donde ocurren las reacciones de isomerización. El isomerizado inestable que se obtiene es despojado del contenido de gases hidrogenados en el tambor separador (B-501). El gas hidrogenado sigue el circuito hacia la torre de zeolita (T-504), donde se elimina el contenido de humedad. Luego pasa por el intercambiador E-509, y por el enfriador E-511, el cual enfría el gas con el objetivo de separar el contenido de hidrocarburos más pesados en el separador B-503, reincorporándolos a la entrada del tambor separador B-501. El isomerizado inestable despojado en el separador alimenta la torre estabilizadora después de ser calentado en el E-501. Obteniéndose 600 barriles por día de isomerizado estable, una fracción recirculada a la alimentación. El gas licuado del petróleo (GLP) separado en la torre estabilizadora se envía a la unidad de fraccionamiento de gases. Este esquema tiene la ventaja que permite convertir todas las parafinas de 5 átomos de carbono en i-pentano y el metilpentano, n-hexano y ciclohexano (CH) a sus respectivos isómeros. Sin embargo tiene el pequeño inconveniente que no permite separar el poco contenido de isómeros procedentes de las parafinas de 6 átomos de carbono, convirtiéndose en GLP y gases producto

del craqueo del 2,2 dimetilbutano y 2,3 dimetilbutano. Además el contenido de ciclopentano al no ser extraído, termina convirtiéndose en n-pentano.

Bloques tecnológicos de la sección:

- ✓ Bloque de rectificación: Tiene la función de separar las fracciones iso-parafínicas de la mezcla de fracción HK-70 con isomerizado estable, con el objetivo de disminuir la carga del reactor.
- ✓ Bloque de isomerización: Se utiliza para obtener iso-componentes por isomerización de la fracción de n-pentano sobre el catalizador. Está compuesto de un bloque de reacción y un bloque de estabilización.

Tipo de catalizador que se propone:

El catalizador por diseño es de origen ruso del tipo alúmina y platino ($\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$) fluorado, denominado IP-62. Se propone para este esquema el catalizador $\text{Pt}/\text{ZrO}_2\text{-SO}_4$, el mismo tiene como función la isomerización de la nafta ligera con una conversión en el producto catalizado de isopentano del 48%. La velocidad espacial en el reactor es de $16 \text{ m}^3/\text{h}$ de materia prima por 16 m^3 de catalizador. Tiene una relación hidrógeno/hidrocarburo de 4:1 y su selectividad hacia componentes de un átomo de carbono a 4 átomos es del 2%. El reactor opera al inicio del ciclo a temperaturas entre $360\text{-}380^\circ\text{C}$ y al final del ciclo entre $420\text{-}450^\circ\text{C}$, y a una presión de $35 \text{ kgf}/\text{cm}^2$.

El esquema propuesto para la isomerización en las condiciones actuales de operación se muestra en la figura 2.1.

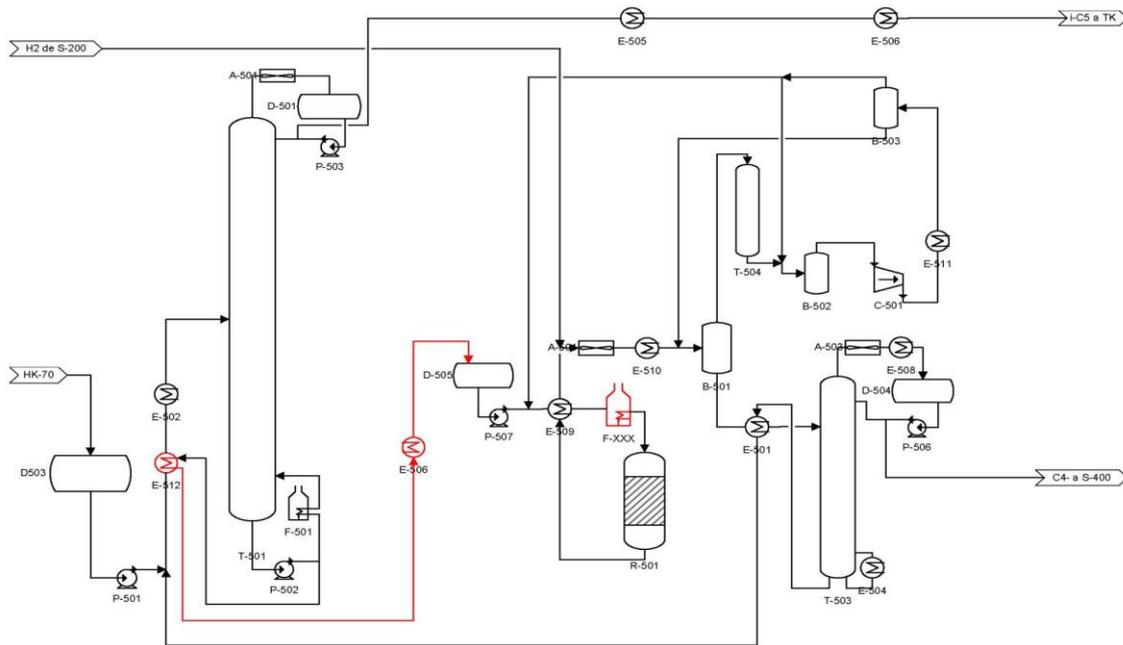


Figura 2.1 Esquema del proceso de isomerización.

2.3 Obtención del modelo de simulación

La simulación de sistemas es el proceso a través del cual se determinan las características del comportamiento de un sistema bajo diferentes condiciones de operación. Para ello se presupone el conocimiento de las características de cada componente del sistema y de las propiedades de las sustancias.

En el ambiente de simulación hay que tener en cuenta varios pasos a realizar como son:

- Descripción del caso de estudio.
- Metodología para la obtención del modelo de simulación.
- Validación del modelo de simulación.

La simulación del proceso en estudio se hace en el *software Petro-SIM v. 6.0*. Esta herramienta se utiliza para supervisar los rendimientos de un proceso productivo de petróleo o gas, para comparar el diseño de una planta de proceso con el comportamiento que debía llevar. Así como para conocer las propiedades que deben tener las entradas y salidas de un proceso productivo. Este simulador de procesos es el primero en ser capaz de modelar

todos los aspectos del procesamiento de hidrocarburos. Contempla la modelación de plantas de gas que incluyen su producción y aspectos de la generación de potencia. Procesos de facilidades que involucran petróleo y gas, así como la modelación rigurosa de refinerías que incluye todos los sistemas principales de reacciones. (KBC, 2015)

Este *software* tiene como opciones para crear un caso de estudio:

- *Petro-SIM Production*: Se adapta a un modelo para simular las corrientes o facilidades de producción, incluidas las plantas de gas, plantas de gas licuado natural (*liquefied natural gas*, LNG) y plataformas de separación básicas de gas y petróleo. Provee tecnologías de separación, para soportar la experimentación, evaluación y justificar el mejoramiento de los beneficios. Los operadores de plantas de gas obtienen una ventaja competitiva y mejoran la rentabilidad al reducir errores, además mejoran la toma de decisiones.
- *Petro-SIM Refining*: Es recomendable para modelar refinerías y procesos petroquímicos, generando un amplio rango de operaciones de reacción específicas. Se implementan métodos de caracterización de hidrocarburos y un rango de propiedades inspeccionadas en refinación, para guiar al usuario en la adecuada construcción de modelos rigurosos y sus facilidades.

Para el caso de estudio se escogió la opción de producción ya que se tienen definidas las corrientes de entrada al proceso y no fue necesario implementar el método para caracterizarlas.

2.3.1 Bases para la simulación

La base fundamental en la simulación la constituye el diagrama de flujo del proceso, el cual se muestra en la figura 2.1.

Por otro lado los parámetros de diseño de los equipos y los parámetros operacionales del proceso constituyen el complemento en la conformación del modelo. Para realizar este trabajo se aplica la estrategia general para la simulación digital, la que se divide en varios pasos (Viera *et. al.*, 1988).

1. Construir el diagrama de flujo de información (DFI).

El primer paso para efectuar la simulación es la elaboración de un diagrama de flujo de información, que no es más que un diagrama donde los flujos de masa o energía del proceso son equivalentes a flujos de información (valores numéricos de las variables de las corrientes y parámetros necesarios), y los equipos del proceso equivalentes a modificaciones de la información que fluye entre ellos.

Para la construcción del DFI, se transforma el diagrama de flujo del proceso:

- Primeramente se descomponen las operaciones complejas en otras más simples.
- Se incluyen todas las operaciones de mezcla y de división de corrientes.
- Finalmente se enumeran consecutivamente las operaciones y las corrientes del proceso. Los módulos que representan una misma operación deben tener igual nombre, sólo cambia la numeración.

Se utilizan símbolos que identifican la operación unitaria que se realiza, así como la información que se requiere en el DFI.

En la figura 2.2 se muestra el diagrama de flujo de información del esquema de isomerización.

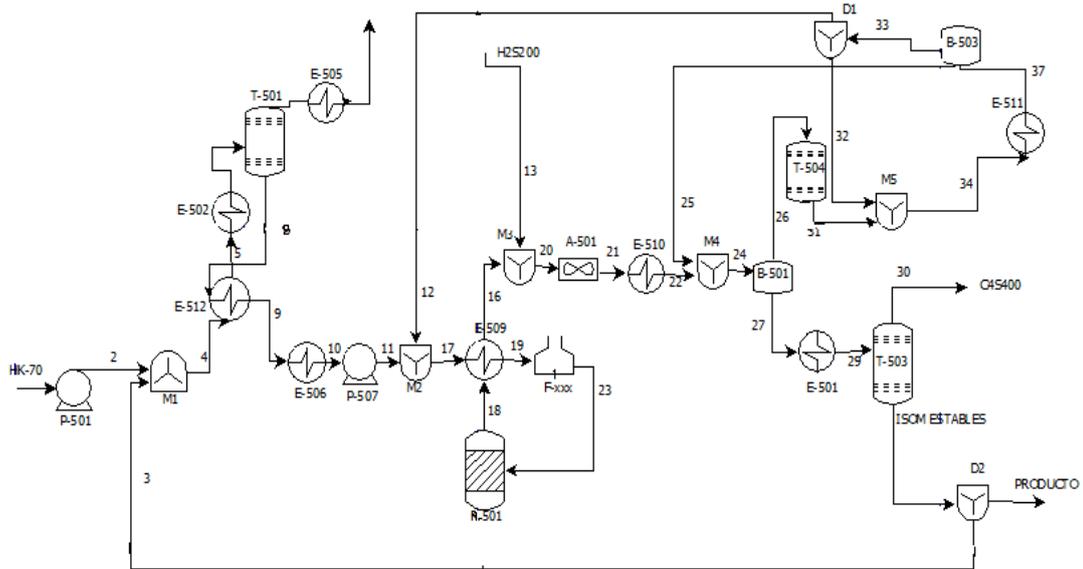


Figura 2.2 Diagrama de flujo de información del esquema de isomerización.

Módulos que se utilizan en el DFI:

- T: columnas F: horno D: divisor
- P: bombas B: separador *flash* M: mezcladores
- R: reactor A: enfriador por aire C: compresor
- E: enfriadores, calentadores, e intercambiadores de calor

2. Determinar el orden de cálculo de los módulos en el DFI.

En este paso se define en qué orden o secuencia se irán calculando los módulos representados en el diagrama de flujo de información según la precedencia y en función de las corrientes definidas ya que el DFI siempre avanza en una dirección.

Desde el punto de vista computacional, la presencia de corrientes de recirculación es uno de los impedimentos para la resolución secuencial de un problema de simulación.

Para determinar el orden en que deben ser calculados los diferentes módulos del sistema, con enfoque secuencial, se utiliza el método de *Steward*. En este paso se selecciona el módulo por el cual se comenzará la simulación. Se

debe empezar por la unidad que tenga las corrientes de entradas definidas y que permita el cálculo de los restantes módulos de forma consecutiva.

El esquema que se estudia contempla la recirculación de isomerizado estable al proceso por lo que para determinar el orden de cálculo se deben seguir algunos pasos.

Paso 1: Construcción del diagrama o árbol de *Steward*.

Se comienza por una operación cualquiera del DFI, preferentemente de las últimas o de las que forman parte de algún ciclo. La siguiente operación que se coloca es la que envía información a través de corrientes a la anterior y proviene de algún otro módulo. Las ramas del árbol se extienden hasta que se repita una operación, correspondiendo con un ciclo del DFI. El árbol correspondiente al DFI (Figura 2.2) se muestra en la figura 2.3.

Los ciclos que quedan identificados en el árbol de *Steward* son:

Ciclo I: M₁-E₅₀₁-B₅₀₁-M₄-E₅₁₀-A₅₀₁-M₃-E₅₀₁-M₂-P₅₀₇-E₅₀₆-E₅₁₂.

Ciclo II: B₅₀₁-M₄-E₅₁₀-A₅₀₁-M₃-E₅₀₁-M₂-D₁-B₅₀₃-E₅₁₁-M₅-T₅₀₄.

Ciclo III: D₁-B₅₀₃-E₅₁₁- M₅.

Ciclo IV: E₅₀₁-R₅₀₁-F_{xxx}.

Ciclo V: B₅₀₁-M₄-B₅₀₃-E₅₁₁-M₅-T₅₀₄.

Ciclo VI: E₅₀₁-T₅₀₃.

Ciclo VII: E₅₁₂-T₅₀₁-E₅₀₂.

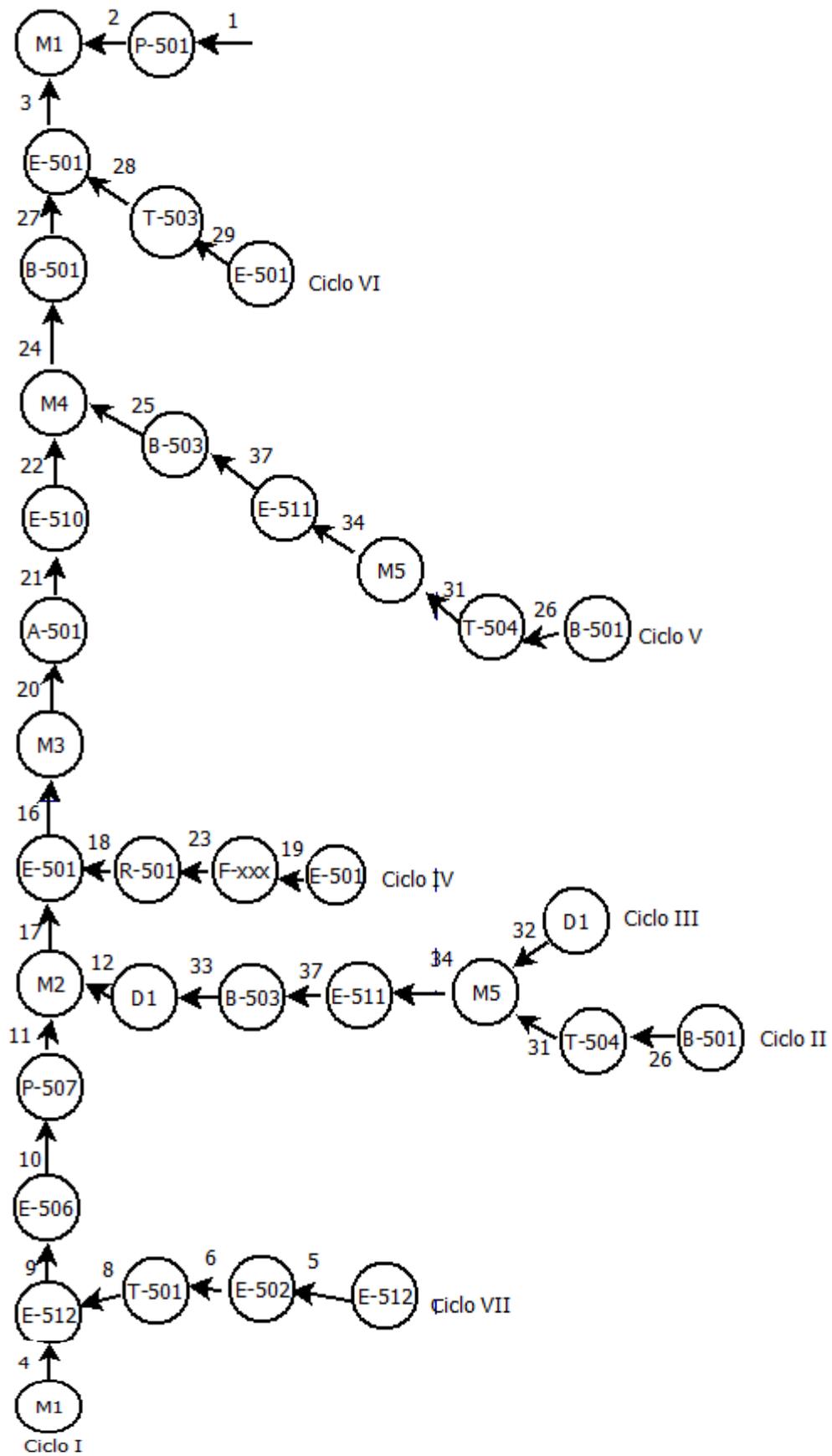


Figura 2.3. Árbol de Steward para el DFI del esquema de isomerización.

Paso 2: Selección de la o las corrientes de corte.

Las corrientes de corte son aquellas que deben ser asumidas para que se resuelvan o rompan los ciclos. Son asumidas inicialmente y calculadas por la simulación, para luego ser chequeadas por la propia simulación hasta lograr un error permisible determinado.

Para la selección de cuáles y cuántas corrientes de corte se necesitan para solucionar todos los ciclos del DFI se construye la matriz de corrientes/ciclos. Ésta permite además definir qué ciclo se debe romper inicialmente para comenzar la simulación.

- Se coloca un ciclo por cada fila de la matriz y una corriente para cada columna de la matriz.
- Para cada ciclo se indica con 1 las corrientes que aparecen en el mismo.
- Para escoger la o las corrientes se siguen algunos criterios.

Si existe frecuencia máxima en la matriz, se tendrá sólo una corriente de corte, porque implica que aparece en todos los ciclos, sino se escoge la corriente que tenga mayor frecuencia y se analiza el rango. Si se tienen más de una corriente que puede ser escogida se analiza que cumpla con la condición de ser salida de un mezclador esencial; además de tener en cuenta la disponibilidad de información del proceso para poder definir dicha corriente.

Tabla 2.1 Matriz de corrientes/ciclos

Ciclos	3	4	5	6	7	9	10	11	12	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	31	32	33	34	35	36	37	
I	1	1				1	1	1		1	1			1	1	1		1			1										
II									1	1	1			1	1	1		1		1				1		1	1	1	1	1	1
III																									1	1	1	1	1	1	1
IV												1	1				1														
V																		1	1	1				1			1	1	1	1	1
VI																							1	1							
VII			1	1	1																										
Frecuencia	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	1	1	2	2	2	1	3	1	2	1	1	1	2	1	2	3	3	3	3	3

Según la tabla 2.1 la matriz refleja frecuencia mayor para las corrientes 34, 35, 36, 37; se toma la corriente 34 porque es la salida de un mezclador. En dicha matriz se observa además que existen 3 ciclos independientes (IV, VI y VII) que para ser calculados se debe asumir una corriente para cada uno. Se definen los intercambiadores de calor como módulos que actúan como mezcladores esenciales y sus salidas pueden ser definidas como corrientes de corte.

Finalmente se seleccionan como corrientes de corte para llevar a cabo la simulación a las corrientes: 34, 4, 5 y 19.

Paso 3. Definir las corrientes de entrada y asumir las corrientes de corte.

La definición de una corriente para la simulación contempla los datos mínimos necesarios para que el simulador pueda determinar las propiedades de una corriente, se tiene que:

Elementos que definen el balance de masa.

- Flujo de la corriente (másico, molar o volumétrico).
- Composición.
- Flujo por componente (másico, molar o volumétrico).

Elementos que definen el balance de energía.

- Temperatura de la corriente.
- Presión de la corriente.
- Condición termodinámica de saturación.

La alimentación al proceso de isomerización es la fracción de nafta ligera proveniente de la destilación atmosférica (HK-70), la misma es de 17516 kg/h, con una composición de 43,92% de isoparafinas(IP), 3,74% de naftenos(N), 0,24% de aromáticos (A), 0,18% de olefinas (O) y 51,92% de parafinas (P) con un aproximado de 80 – 100°C proveniente de la sección 100.

Las fracciones de componentes de la nafta ligera que contiene la alimentación se reportan en la tabla 2.2.

Tabla 2.2: Composición de la alimentación (HK-70)

	Componentes	Fracción volumétrica
	Agua	0,02
	nitrógeno	0,00022
	Azufre	0,00265
Parafinas	propano	0,0003
	n-butano	0,0165
	n-pentano	0,4971
	n-hexano	0,0049
	n-heptano	0,0005
isoparafinas	i-butano	0,0004
	2,2dimetilpropano	0,0014
	i-pentano	0,4096
	2,2dimetilbutano	0,0042
	2,3dimetilbutano	0,002
	2metilpentano	0,0154
	3metilpentano	0,0052
	2,4dimetilpentano	0,0001
	2metilhexano	0,0004
	2,3dimetilpentano	0,0002
	3metilhexano	0,0004
naftenos	Ciclopentano	0,0335
	metilciclopentano	0,0021
	Ciclohexano	0,0007
	cis1,3dimetilciclopentano	0,0002
	tr1,3dimetilciclopentano	0,0002
	tr1,2dimetilciclopentano	0,0003
	Metilciclohexano	0,0004
aromáticos	Benceno	0,0019
	Tolueno	0,0004
olefinas	1-penteno	0,0019
	2Metil1buteno	0,0004
	tr2 penteno	0,0001
	cis2 penteno	0,0002
	2Metil2buteno	0,0003

Tabla 2.3 Composición de la alimentación (H₂Sección 200)

propano	0,0348
n-butano	0,0068
n-pentano	0,0110
n-hexano	0,0128
i-butano	0,0066
metano	0,0936
Etano	0,0630
Hidrógeno	0,7714

Paso 4. Definir los módulos matemáticos.

En este paso queda definida la operación unitaria que realiza cada módulo del DFI, para hacerla corresponder con un módulo apropiado del simulador.

Implementación del diagrama de flujo de información en el *softwarePetro-SIM v.6.0*

1. Selección del modelo termodinámico.

Para comenzar a trabajar con el simulador es necesario seleccionar el modelo termodinámico por el cual será calculado el paquete de propiedades de cada corriente.

Se seleccionan las ecuaciones de estado de *Peng Robinson* modificado (PRSV) como base para estimar las propiedades físicas de cada una de las corrientes del modelo. Este modelo termodinámico se recomienda generalmente en aplicaciones para la industria del petróleo, petroquímica y gas y ha sido modificado por los propietarios del simulador para mejorar sus resultados en la industria petrolera.

2. Introducir los componentes al paquete de fluido:

Se escogen simultáneamente de la biblioteca del simulador todos los componentes reportados en las tablas 2.2 y 2.3.

3. Definir el paquete de reacciones:

Se crean las reacciones (*AddRxn*) que tienen lugar en el proceso de isomerización. Es necesario definir inicialmente el tipo de reacción de acuerdo a la información de la que se disponga o al objetivo de la investigación. Para el caso que se estudia se selecciona *conversion*, pues se pretende estudiar el comportamiento del reactor y se cuenta además con la información de la conversión de las reacciones. (Molina, 2014).

La información que se requiere en este tipo de reacciones es: estequiometría de la reacción (con signo negativo los reactantes y con signo positivo los productos), el reactivo limitante, la fase en la que ocurre la reacción y el valor de la conversión (48%).

Este paso se repite para todas las reacciones que se crean dentro de un paquete de reacción (*Reaction Set*).

Las reacciones químicas que tienen lugar en el reactor de isomerización se muestran en la tabla 2.4:

Tabla 2.4: Reacciones de isomerización

1	n-pentano ↔ i-pentano	10	n-hexano + H ₂ ↔ etano + n-butano
2	n-hexano ↔ 2 metilpentano	11	n-heptano+ H ₂ ↔ i-butano+ propano
3	n-hexano ↔ 3 metilpentano	12	benceno + 3 H ₂ ↔ ciclohexano
4	2metilpentano ↔ 2,3 dimetilbutano	13	n-butano ↔ i-butano
5	2,3 dimetilbutano ↔ 2,2 dimetilbutano	14	i-pentano + H ₂ ↔ etano+ propano
6	ciclohexano ↔ metilciclopentano	15	1-penteno + H ₂ ↔ n-pentano
7	metilciclopentano+ H ₂ ↔ n-hexano	16	trans-2-penteno+H ₂ ↔ n-pentano
8	ciclopentano + H ₂ ↔ n-pentano	17	cis-2-penteno+H ₂ ↔ n-pentano
9	i-pentano + H ₂ ↔ i-butano+ n-butano		

- Definir los módulos del simulador que corresponden a cada módulo del DFI.

Los módulos en el simulador se encuentran distribuidos por categorías según la operación que representan, a continuación se describen los módulos que se emplean:

Categoría Heat Transfer Equipment.

En esta categoría se consideran todos los módulos que realizan balance de energía térmica.

1. Intercambiadores de calor (*heat exchanger*). Este módulo requiere los parámetros siguientes:
 - Modelo de cálculo del intercambiador de calor.

Se tienen 4 modelos disponibles para realizar los cálculos y todos permiten especificar si el flujo por los tubos es en paralelo o a contracorriente.

Para el caso que se analiza se utiliza el modelo de diseño *Weighted*. Este modelo de diseño es excelente para modelar problemas con curvas de flujo de calor no lineales, tales como el cambio de fase de componentes puros por uno o ambos lados del intercambiador de calor. Con el modelo *Weighted*, las curvas de flujo de calor son divididas en intervalos y se desarrollan balances de energía para cada uno, sumando el producto UA de cada intervalo para determinar el global del intercambiador. Este modelo está disponible solo para intercambiadores con flujo en contracorriente

- Caída de presión por ambos lados (se considera nula).
- Temperatura de una de las corrientes de salida o multiplicación del área por el coeficiente global de transferencia de calor ($U \cdot A$).

$$E-512: T_9 = 110^{\circ}\text{C}.$$

$$E-509: T_{19} = 315^{\circ}\text{C}$$

2. Enfriadores (*Cooler*): En este módulo sólo se tiene en cuenta el enfriamiento o cambio de fase de una corriente de materia a través de un sumidero de energía. Los parámetros necesarios para su simulación son:

- Caída de presión en el equipo.
- Temperatura de la corriente de salida o calor cedido en el equipo.

E-506: Su objetivo es condensar la corriente de salida de la torre T-501 para incorporarse a la etapa de reacción. Se define fracción de vapor en la corriente 10 igual a cero.

$$E-505: T_{14} = 40^{\circ}\text{C}.$$

$$E-510: T_{22} = 40^{\circ}\text{C}.$$

$$E-511: T_{34} = 40^{\circ}\text{C}$$

3. Hornos o calentadores (*Heater*): En este módulo sólo se tiene en cuenta el calentamiento o cambio de fase de una corriente de materia a través de una fuente de energía. Los parámetros necesarios para su simulación son:

- Caída de presión del equipo ($\Delta P=0$).
- Temperatura de la corriente de salida.

E-502: $T_6 = 100^\circ\text{C}$. E-501: $T_{29} = 110^\circ\text{C}$. F-xxx: $T_{23} = 360^\circ\text{C}$

4. Enfriadores por aire (*Air cooler*): Este módulo representa el enfriamiento por aire de una corriente de materia, los parámetros para su simulación son:

- Caída de presión del equipo ($\Delta P=0$).
- Temperatura ambiente del aire ($T = 28^\circ\text{C}$).
- Configuración del ventilador (*onetuberow, one pass*).
- Temperatura de la corriente de salida.

A-501: $T_{21} = 100^\circ\text{C}$.

Categoría Reactor:

En esta categoría se agrupan todos los modelos que representan a los módulos de reacción química, de acuerdo al paquete de reacción química que se crea debe ser seleccionado el modelo adecuado.

1. Reactor de conversión (*Conversion reactor*). Este módulo simula un recipiente donde reacciones de conversión son evaluadas. Cada reacción ocurre hasta que la conversión especificada se alcanza o hasta que un reactante es consumido.

Los parámetros necesarios para su cálculo son:

- Paquete de reacciones químicas por conversión creadas anteriormente.
- Caída de presión en el equipo.
- Temperatura de la reacción (se define por la corriente de alimentación).

Categoría Short CutColumns.

1. Columna (*Shortcutcolumn*). Este módulo utiliza el método corto *Fenske-Underwood* para los cálculos de una columna de reflujo simple. A partir del método de *Fenske* se determina el número mínimo de etapas teóricas y por el de *Underwood* la razón de reflujo mínimo.

Si se especifica una razón de reflujo pueden ser calculados los flujos de vapor y líquido en las secciones de enriquecimiento y agotamiento, los flujos de calor en el condensador y en el rehervidor y el número de etapas teóricas, así como el plato de alimentación óptimo.

2. Separador de componentes (*Componentsplitter*). Con este módulo una corriente de alimentación se separa en dos o más corrientes basado en los parámetros y las fracciones de división que se especifiquen.

T-501: Representa la torre T-501 cuyo objetivo es eliminar las fracciones de iso-parafinas de la corriente de nafta ligera para evitar sobrecargar el reactor de isomerización.

T-504: Representa la torre de zeolita T-504 cuya función es deshumidificar los gases hidrogenados que se reincorporan al reactor.

Categoría Vessels

1. Separador instantáneo o *flash(separator)*: Este módulo es básicamente un tanque *flash* donde la separación de las fases ocurre a la menor presión de alimentación menos una caída de presión a través del equipo, que debe ser definida. Estos equipos permiten múltiples alimentaciones, y constan de una corriente producto en fase vapor y otra en fase líquida. Con la corriente de entrada definida quedan calculadas las dos corrientes de salida.

B-501: Corriente 24

B-503: Corriente 37

Categoría Rotating equipment.

1. Bomba (*Pump*). Aumenta la energía mecánica (presión) de una corriente líquida utilizando una fuente de trabajo mecánico. Se utiliza para simular cualquier operación que impulse el fluido. Se basa en la

ecuación estándar que utiliza la elevación de la presión, el flujo de líquido y su densidad para estimar la potencia ideal requerida.

Requiere como parámetros:

- Presión en la corriente de salida o incremento de presión de la corriente.
- Energía que se suministra para elevar la energía mecánica (*duty*).

P-501: $P_2 = 980$ kPa

P-507: $P_{11} = 3334$ kPa.

2. Compresor (*Compressor*). Incrementa la energía mecánica (presión) de una corriente gaseosa utilizando una fuente de trabajo mecánico. En función de la información que se especifique, el compresor calcula las propiedades de la corriente de salida (presión y temperatura) o la eficiencia de compresión.

C-1: $P_{13} = 3334$ kPa.

Categoría Piping equipment.

1. Divisor (*Tee*): Esta operación de división separa una corriente de alimentación en múltiples corrientes de producto con las mismas condiciones y composición que la corriente de entrada, y es usada para simular T en tuberías y tubos múltiples. El único parámetro que se requiere para su simulación es la fracción de separación (*Splits*) o los flujos de cada corriente de salida.

D-1: Se recircula al reactor el 90 % en la corriente 12.

D-2: Se recircula al proceso el 30 % de la corriente de isomerizado estable.

2. Mezcladores (*Mixers*). Este módulo realiza un balance completo de materia y energía en el punto mezcla. Si se conocen las propiedades de las corrientes de entrada (temperatura, presión, flujo y composición), las propiedades de la corriente de salida serán calculadas automáticamente de forma rigurosa.

Se cuentan con 6 módulos de mezcla en el proceso (M₁₋₆).

Categoría Logicals.

1. Módulo de convergencia (*Recycle*). Este módulo computacional instala un bloque teórico en la corriente del proceso. Las condiciones de la corriente pueden ser transferidas hacia delante o hacia atrás, en términos de solución hay valores asumidos y valores calculados para cada variable en la corriente de entrada y salida de este módulo. Se emplea un método de aproximaciones sucesivas para alcanzar la convergencia del sistema con la tolerancia especificada.

RCY-1: Convergencia de la corriente de corte 5

RCY-2: Convergencia de la corriente de corte 19

RCY-3: Convergencia de la corriente de corte 34

RCY-4: Convergencia de la corriente de corte 4

2.3.2 Validación del modelo de simulación

Para validar el modelo que se simula se comparan los resultados del modelo con los parámetros de diseño que se reflejan en la descripción del proceso, estimándose el error que se comete al estudiar el sistema con el modelo obtenido. Errores menores que un 10% indican que es posible utilizar el modelo obtenido del esquema de isomerización para la predicción del funcionamiento real del mismo.

Las variables que se escogen para analizar el ajuste del modelo al caso de estudio son:

- Temperatura en la corriente 9 a la salida del intercambiador E-512.
- Temperatura en la corriente 16 a la salida del intercambiador E-509.
- Flujo de isomerizado estable que se obtiene a la salida de la torre estabilizadora.

Además se realiza un análisis de sensibilidad con el objetivo de conocer la respuesta del modelo a los cambios de los parámetros que lo conforman. Para ello, los parámetros son variados dentro del intervalo de interés, observándose la respuesta del modelo y a partir de esto se obtiene información acerca de la representación que realiza el mismo del fenómeno real y/o sobre la interacción de los factores en el sistema.

Para el análisis se estudiaron los parámetros siguientes:

- Relación entre la nafta ligera alimentada a la sección y el isomerizado estable que se produce en la torre estabilizadora.
- Relación entre el hidrógeno que se alimenta desde la sección 200 y el isomerizado estable.
- Relación entre el hidrógeno que se alimenta desde la sección 200 y la corriente de gases que se envía a la sección 400.

2.4 Conclusiones parciales de la metodología de investigación

1. Se indica el desarrollo del modelo de simulación, a partir de la estrategia general de simulación modular.
2. Para la validación del modelo se definen: temperatura en la corriente 9 y 16, así como el flujo del isomerizado estable que se obtiene en la torre estabilizadora.
3. En el análisis de sensibilidad del modelo se considera: relación entre los flujos de alimentación a la sección y el isomerizado estable.
4. El *software* a emplear en la simulación es *Petro-Sim v 6.0* con el caso de estudio *Petro-SIM Production*.

Capítulo 3: Análisis de los resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de la simulación del modelo de la planta de isomerización usando el *software Petro-SIM v6.0*, así como el análisis correspondiente de los mismos.

3.1 Implementación y validación del modelo de simulación

3.1.1 Implementación de las columnas del proceso

- Torre deisopentanizadora (T-501): Su principal objetivo es eliminar las isoparafinas de la corriente de alimentación y no sobrecargar el reactor de isomerización. Como no era necesario el estudio riguroso del proceso se decide realizar su simulación a través del separador de componentes. Fue necesario incorporar una corriente energética al mismo para especificar las condiciones termodinámicas de tope y fondo.

Corriente 7 (T = 80°C, P = 294,2 kPa)

Corriente 8 (T = 160°C, P = 607,9 kPa)

Además se introducen las fracciones de división de cada componente. Se le asigna en la corriente de tope el valor de uno a todas las isoparafinas (i-butano, 2,2dimetilpropano, i-pentano, 2,2dimetilbutano, 2,3dimetilbutano, 2metilpentano, 3metilpentano, 2,4dimetilpentano, 2metilhexano, 2,3dimetilpentano, 3metilhexano) y cero al resto de los componentes.

- Torre de zeolita (T-504): Su objetivo principal es separar el contenido de humedad del gas hidrogenado. El separador de componentes es un módulo que por sus características puede asumir una función, introduciendo la fracción de separación. Se indica en la corriente de fondo el valor de uno al agua y cero al resto de los componentes.

Se requiere incorporar la corriente energética para especificar las condiciones termodinámicas de tope y fondo que permitan la separación del agua.

Corriente 31 (T = 105°C, P = 3334 kPa)

- Torre estabilizadora (T-503): La simulación de la torre estabilizadora se lleva a cabo a partir del módulo *Short cut column* pues no se cuenta con la información

necesaria para utilizar el método riguroso, hay que señalar que este proceso nunca se llevó a cabo.

- Se define la corriente de alimentación a la columna (Corriente 29)
- Se indican las corrientes producto de tope y fondo así como los calores en el condensador y rehervidor.
- En *Parameters* se definen los elementos esenciales para la simulación.

Composición del componente clave ligero en el fondo (0,003 de n-butano)

Composición del componente clave pesado en el tope (0,0001 de i-pentano)

Presión en el condensador y en el rehervidor (980,7kPa y 1177kPa).

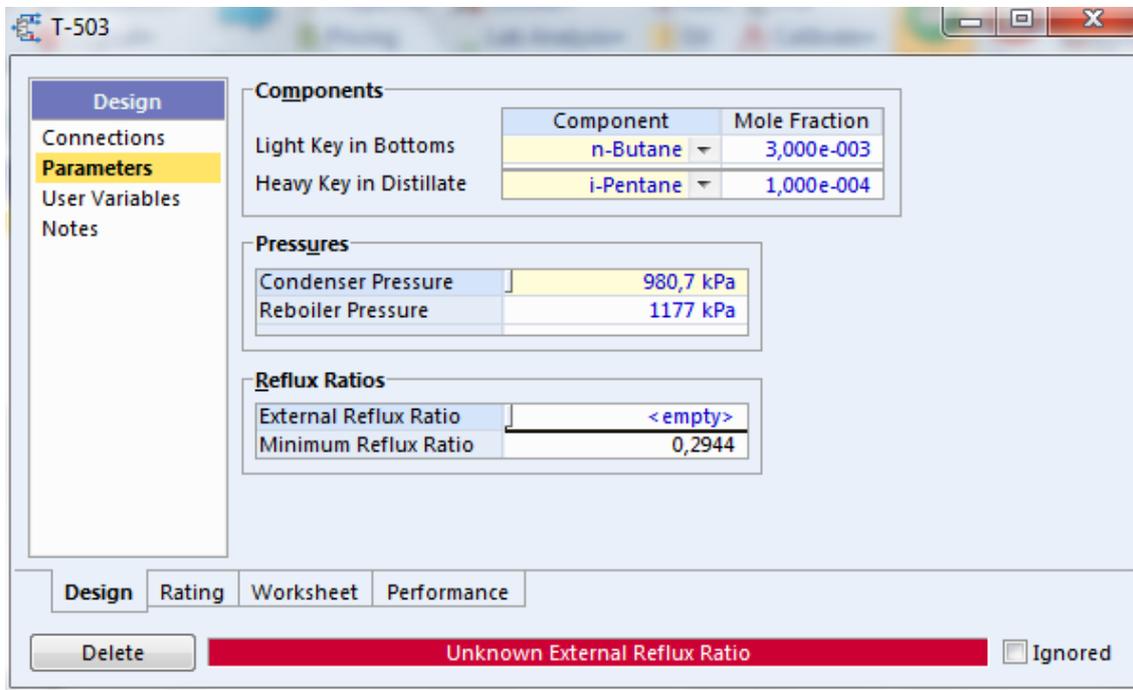


Figura 3.1. Parámetros en el módulo Short cutcolumn.

Con esos valores el módulo calcula la razón de reflujo mínima (0,2944), el número de etapas mínimas (10,13) así como las temperaturas de las corrientes de tope (-37,76°C) y fondo (133,2°C).

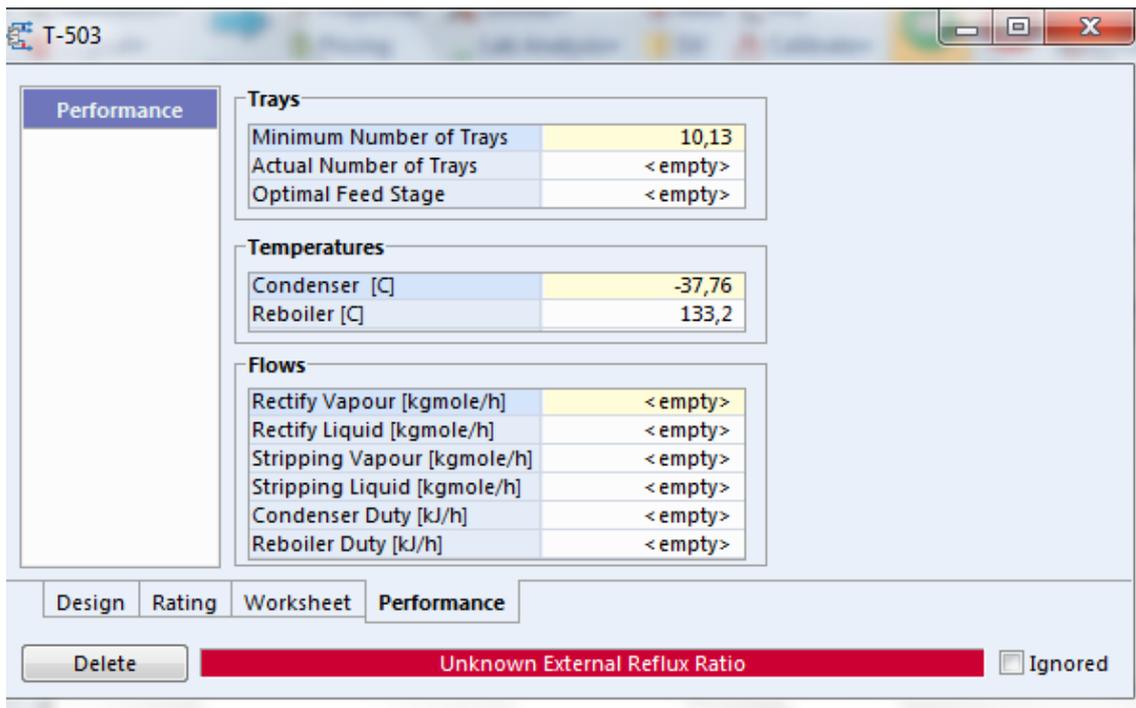


Figura 3.2. Hoja de funcionamiento en el módulo Short cutcolumn.

A partir de la razón de reflujo de la columna (0,47) se pueden determinar entonces el número de etapas (23) que se requieren y el plato de alimentación más adecuado.

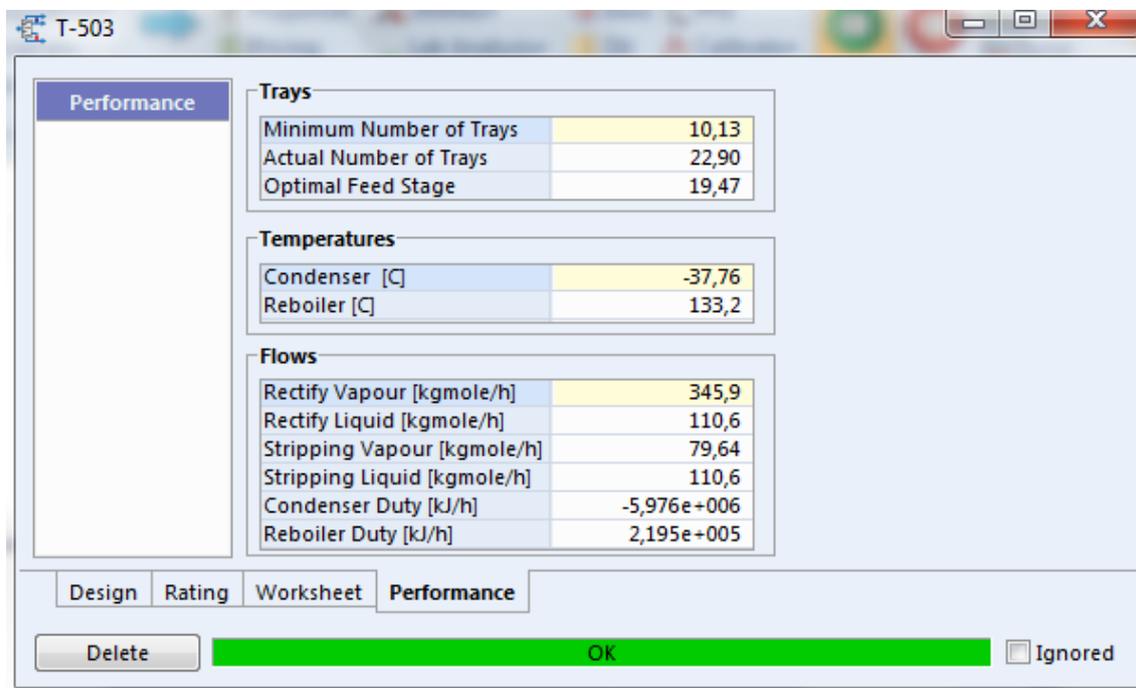


Figura 3.3. Hoja de funcionamiento en el módulo Short cutcolumn calculado.

Se comprueba con el diseño que el plato adecuado para la alimentación es el 20.

Se obtienen los flujos de destilado (C4 a la sección 400) y del residuo (isomerizado estable).

Name	29-a	destilado	residuo
Vapour	1,0000	0,0000	0,0000
Temperature [C]	110,0	-37,76	133,2
Pressure [kPa]	3334	980,7	1177
Molar Flow [kgmole/h]	266,2	235,3	30,94
Mass Flow [kg/h]	1,088e+004	8605	2279
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	23,36	19,84	3,523
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-9,541e+004	-1,133e+005	-1,467e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	166,5	96,47	85,22
Heat Flow [kJ/h]	-2,540e+007	-2,665e+007	-4,540e+006
Name	Properties of attached streams.		
Vapour	< empty >		
Temperature [C]	< empty >		
Pressure [kPa]	< empty >		
Molar Flow [kgmole/h]	< empty >		
Mass Flow [kg/h]	< empty >		

Figura 3.4. Hoja de cálculo de las corrientes en el módulo Short cutcolumn.

3.1.2 Implementación de los módulos del DFI

El desarrollo de los restantes módulos que conforman el modelo de simulación se realiza de acuerdo a la categoría de la operación unitaria que representan según se explica en el capítulo anterior (Epígrafe 2.3).

En la figura 3.5 se muestra el modelo que se obtiene y los resultados de los balances de materia y energía en el proceso se reflejan en el Anexo 6.

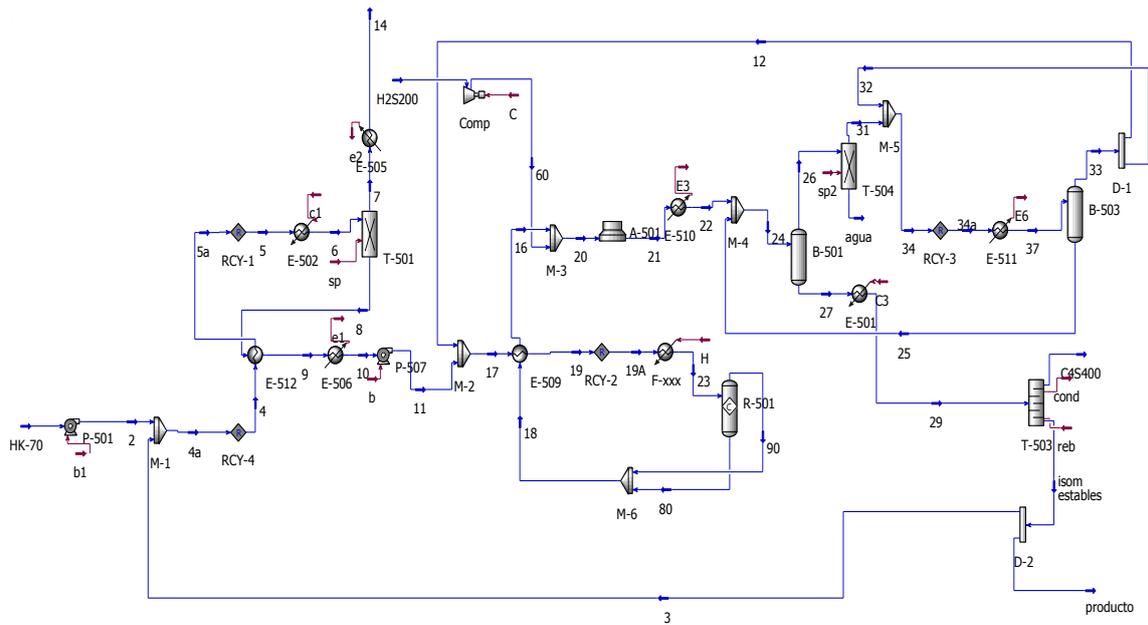


Figura 3.5. Modelo de simulación de la planta de isomerización.

3.1.3. Validación del modelo de simulación

Con la información de los balances de materia y energía se pueden analizar y comparar las condiciones de diseño y las obtenidas en la simulación. Se determina el error que se comete al estudiar el sistema con el modelo diseñado. Lo que permite definir la precisión del modelo para predecir y estudiar la operación del proceso.

En la Tabla 3.1 se muestran los resultados del análisis de tres parámetros que son determinantes en la operación de la planta de isomerización.

Como se puede apreciar en la tabla los errores se encuentran por debajo del 5%, lo que permite afirmar que el modelo desarrollado se ajusta de forma adecuada al proceso que se estudia. Lo que indica que el esquema propuesto es aceptado para lograr la isomerización de la corriente de nafta ligera que se obtiene en la fracción HK-70 en la destilación de la refinería “Camilo Cienfuegos”. Además se puede plantear que los equipos instalados permiten manipular las corrientes del proceso.

Tabla 3.1. Análisis comparativo de parámetros de diseño y parámetros obtenidos por el simulador.

Variables	Diseño	Petro-Sim	Error (%)
Temperatura de la corriente 9 (°C) Intercambiador (E-512)	120	116,2	3,17
Temperatura de la corriente 16 (°C) Intercambiador (E-509)	100	98,64	1,36
Flujo de isomerizado estable (bbl/d) (T-503)	600	586,6	2,23

Después de comprobar el ajuste del modelo al caso base se pasa al estudio de la sensibilidad del mismo ante cambios en las variables operacionales.

3.1.4. Análisis de sensibilidad del modelo

Estudio 1. Relación entre el flujo de nafta ligera alimentada a la sección y el flujo de isomerizado estable que se produce. Los datos para el gráfico quedan tabulados en el Anexo 5.

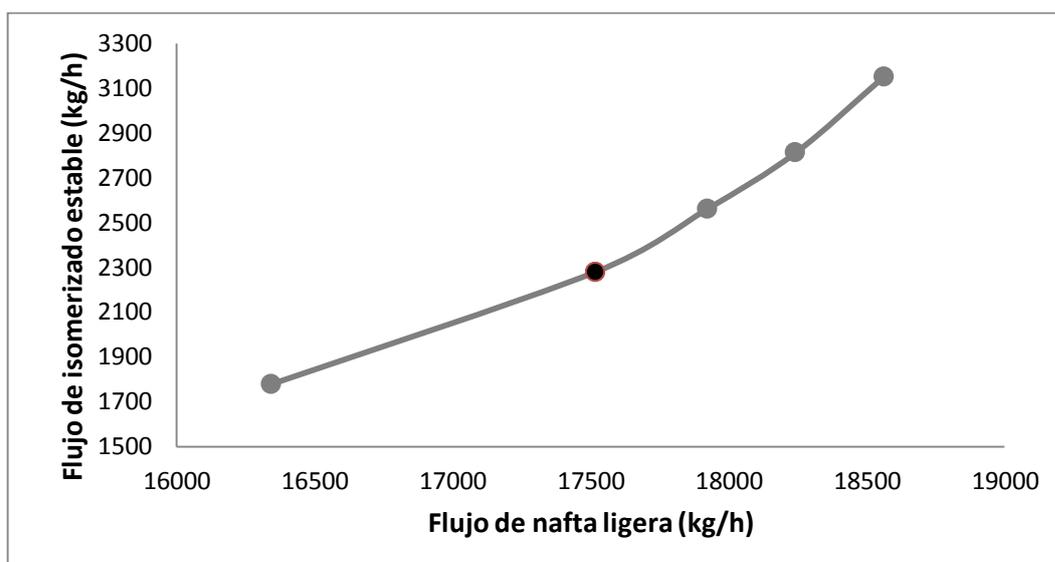


Figura 3.6. Comportamiento del isomerizado estable ante un cambio en la nafta alimentada a la sección.

En la figura 3.6 se puede apreciar que la cantidad de isomerizado estable que se produce en la sección de isomerización tiene una relación directa con la cantidad de nafta ligera (HK-70) que se alimenta a la misma. Este comportamiento es el esperado porque se tiene mayor cantidad de n-pentanos y n-hexanos para convertir a sus respectivos isómeros que luego saldrán de la columna estabilizadora en la corriente de residuo (producto deseado). En el gráfico se representan las condiciones de diseño en el punto negro: 17516 kg/h y 2279 kg/h de nafta ligera eisomerizado estable respectivamente.

Estudio 2. Relación entre el flujo de hidrógeno proveniente de la sección 200 y el flujo de isomerizado estable. Los datos para la confección del gráfico quedan reportados en el Anexo 4.

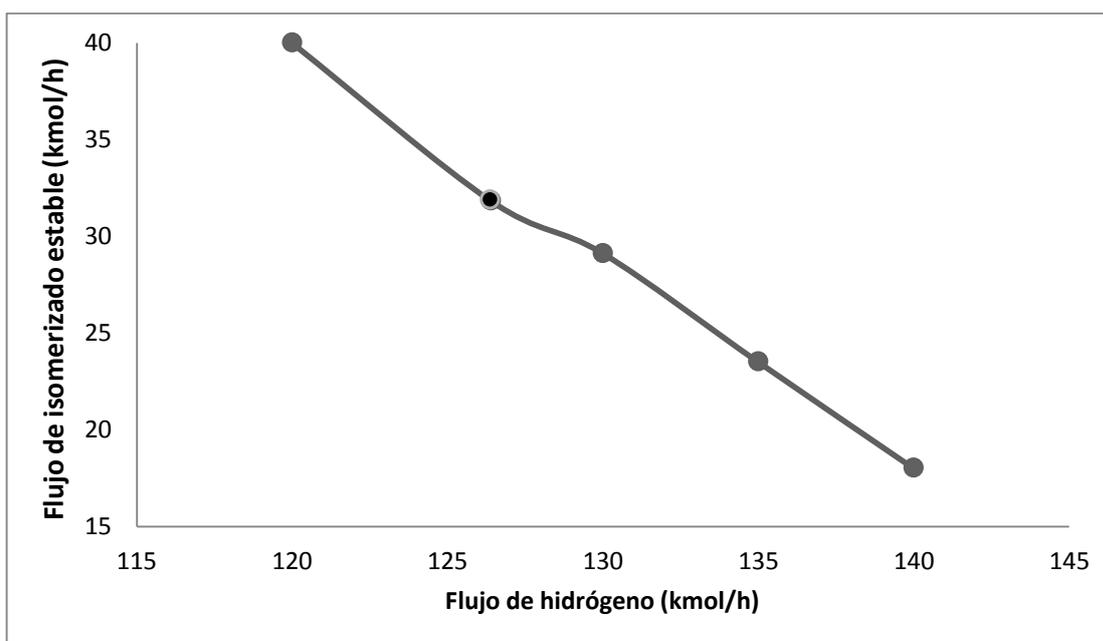


Figura 3.7. Comportamiento del isomerizado estable ante un cambio en el hidrógeno de la sección 200 alimentado.

En la figura 3.7 se observa que el flujo de isomerizado estable disminuye a medida que se alimenta mayor cantidad de hidrógeno a la sección. Esto se debe a que, si se mantiene la conversión en el reactor, las fracciones más ligeras que componen dicha corriente se encontrarán en mayor proporción. Por

lo que se obtendrán en la corriente de gases a la sección 400, disminuyendo la producción de isomerizado estable.

Después de comprobar que el modelo responde de forma adecuada ante cambios en las variables del proceso se puede utilizar el mismo para predecir su comportamiento.

3.2. Análisis de la operación al inicio y final del ciclo del catalizador.

Con el objetivo de analizar el sistema de intercambio de calor cuando el catalizador se encuentra en su fase inicial o final de actividad, se utiliza el modelo que se desarrolla.

Al inicio del ciclo el reactor puede trabajar en un intervalo de 360 – 380°C, para 360°C(corriente 23) se desarrolla el modelo inicialmente, donde la corriente de salida del reactor (18) se enfría en el intercambiador de calor (E-509) hasta 99,73 °C, posteriormente pasa por el enfriador por aire (A-501) que cuenta con dos ventiladores y enfría la corriente hasta 80°C, obteniendo como temperatura de aire a la salida 62,14 °C.

Si se analiza la influencia en el proceso del aumento de la temperatura de entrada al reactor a 380°C(corriente 23) se puede plantear que:

- La corriente 18 se enfría hasta 125,6°C (corriente 16) en el intercambiador E-509.
- En el enfriador por aire no es necesaria la modificación de la configuración pero se obtiene una temperatura del aire a la salida de 113,14 °C.

La operación en el reactor de isomerización al final del ciclo debe realizarse a 420–450°C para lograr la misma conversión (48%) y se considera que el calentamiento previo en el E-509 se realiza hasta 350 °C.

Con el análisis de la operación para el primer intervalo del fin de ciclo (420°C) a la entrada del reactor se tiene que:

- La corriente 16 toma un valor de 136°C.
- El enfriador por aire mantiene la configuración actual y se obtiene entonces una temperatura del aire de salida de 134,72 °C.

Para la operación en el final del ciclo (450 °C) a la entrada del reactor se tiene que:

- La corriente 16 alcanza una temperatura de 177°C.
- El enfriador por aire (A-501) no se define con la configuración actual (2 ventiladores).

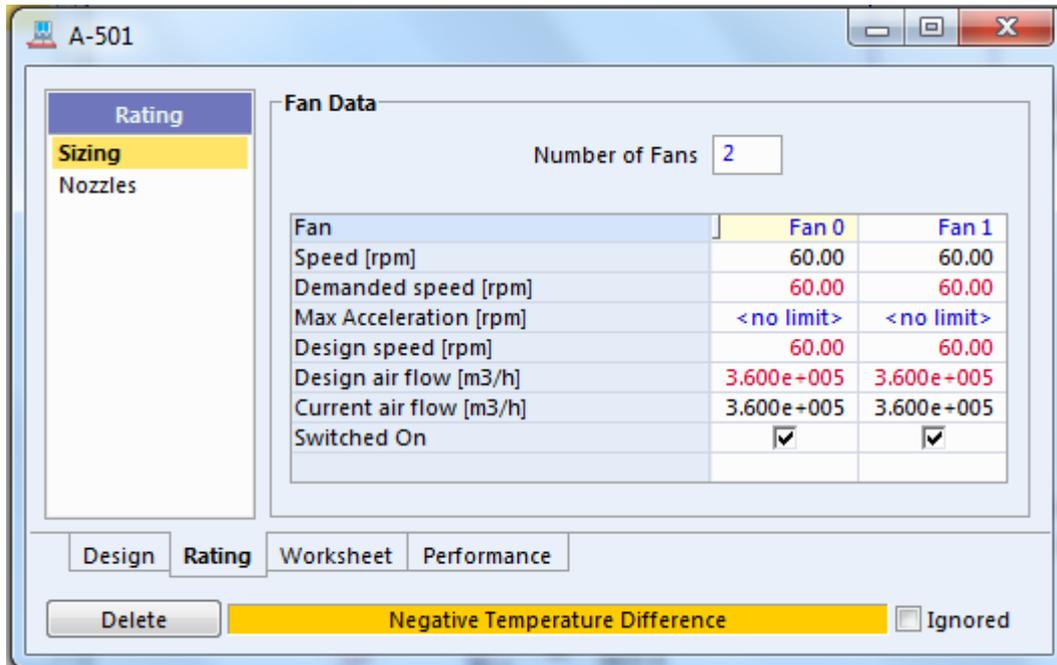


Figura 3.8. Hoja de dimensionamiento en el módulo de enfriador por aire.

Para lograr la operación del módulo y con ello del proceso se proponen dos variantes:

1. Mantener la configuración actual (2 ventiladores) pero se obtendría a la salida una temperatura de 105°C, superior a la de diseño (80 °C).
2. Modificar la configuración del enfriador a 3 ventiladores con lo que se podría mantener la temperatura de la corriente de salida a 80°C.

Esto implica que el calor que necesita el enfriador E-510 para enfriar la corriente aumenta, para enfriar de 80-40°C requiere $5,838 \cdot 10^7$ kJ/h y para enfriar de 105-40°C necesita $9,22 \cdot 10^7$ kJ/h.

3.3 Conclusiones parciales del análisis de los resultados:

1. Se obtiene el modelo de simulación del proceso de isomerización de naftaligera a través del software *Petro-SIM* v 6.0.
2. En la validación del modelo de simulación que se desarrolla, todas las variables de interés presentan un error inferior al 5% con respecto a los datos de diseño, lo que demuestra el ajuste del mismo al caso de estudio.
3. Se realiza el análisis de sensibilidad del modelo para verificar su respuesta ante cambios en la alimentación a la sección tanto de naftaligera como de la corriente hidrogenada; donde se obtiene el comportamiento esperado en todos los casos.
4. Se estudia el proceso al final del ciclo de operación del reactor, donde se obtiene que el enfriador por aire es el equipo que podría interferir en la operación.
5. Para las condiciones finales del ciclo del reactor (450 °C) se hace necesario la modificación de la configuración del enfriador por aire A-501 a 3 ventiladores, o se obtendrá una temperatura a la salida del mismo de 105 °C.

Conclusiones

1. Se desarrolla un modelo de simulación del esquema propuesto para la isomerización de las naftas ligeras que se obtienen en la fracción HK-70 de la refinería "Camilo Cienfuegos".
2. El modelo se valida mediante los valores de diseño de los parámetros operacionales del caso de estudio, con errores relativos inferiores al 5 % para todos y se verifica su comportamiento ante cambios efectuados al mismo.
3. El enfriador por aire A-501 es el equipo que interfiere en la operación de la planta cuando se trabaja en el final del ciclo del reactor, siendo necesaria la modificación de su configuración para mantener las condiciones de diseño.

Recomendaciones

Se recomienda al departamento técnico implementar el modelo de simulación del esquema propuesto para predecir el funcionamiento del proceso de isomerización.

Bibliografías:

- 1- Amador J.A. y Chavarro K.J., (2012). Revisión de Heurísticas y Conceptos para el diseño de equipos utilizados en Procesos de Refinación del Petróleo. Universidad de San Buenaventura Seccional Cartagena. Facultad de Ingeniería, Arquitectura, Artes y Diseño. Programa de Ingeniería Química Cartagena de Indias. Disponible en <http://bibliotecadigital.usbcali.edu.co/jspui/bitstream/10819/1145/1/Revisi%C3%B3n%20de%20heur%C3%ADsticas%20y%20conceptos%20Jorge%20Andr%C3%A9s%20Amador%20Falc%C3%B3n%20USBCT%202012.pdf>. Consultado el 27-1-2016
- 2- Amanqui R M. E. y Aguilar J. L. (2011). Estudio Técnico - Económico de Prefactibilidad de un proceso de Transformación para el Incremento de Octanaje de Gasolinas en Refinerías de la Selva del Perú. Universidad Nacional de Ingeniería de Lima, Perú. Disponible en: http://cybertesis.uni.edu.pe/bitstream/uni/1021/1/amanqui_rm.pdf. Consultado el 27-1-2016.
- 3- Aspen Technology, Inc. (2015). *Aspentech*. Disponible en www.aspentech.com/products/aspenone_engineering/ consultado el 27-1-2016
- 4- Australian Institute of Petroleum, 2010. www.aip.com.au/industry/factrefine.htm. consultado el 23-1-2016
- 5- Benitez, V. M. (2004). Superácidos soportados sobre sílice para isomerización de parafinas cortas. XIX Simposio Iberoamericano de Catálisis.
- 6- Brenner S.J.(2000) "HYSYS. *Process 2.2Documentation*" AEA Technology- Hyprotech Ltd, Canadá.
- 7- Castro P.M. y Grossman I.E. (2014) *Global Optimal Scheduling of crude oil Blending*.
- 8- Chica, A (1999). *Hydroisomerization of pentane, hexane, and heptane for improving the octane number of gasoline. Journal of Catalysis*.
- 9- FING, 2013. Refinación de petróleo y economía del proceso. Disponible en: <https://www.fing.edu.uy/iq/cursos/qica/industria/IntroRefineria.pdf>. consultado el 20-1-2016.

- 10-García R *et al.* (2005). Isomerización de n-pentano sobre Pt/h-mordenita y Pt-Re/h- mordenita-Al₂O₃. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, vol. 4, núm. 3, 2005, pp. 253-260. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa. Distrito Federal, México.
- 11-Garea A. (2012) Refino Petroquímico. Universidad de Cantabria. Procesos de transformación en refinería. Departamento de ingeniería química y biomolecular. Disponible en:
<http://ocw.unican.es/enseñanzas-tecnicas/refino-petroquimico/materiales-de-clase-1/bloque III parte 1.pdf>. Consultado el 27-1-2016.
- 12-Godoy S. (2008) Introducción al diseño de columnas de destilación mediante el uso del simulador HYSYS. Universidad Tecnológica Nacional-Facultad Regional Rosario. Departamento de ingeniería química. Argentina.
- 13-Grupo Alfonso-Gallardo, 2007. Proyecto para la instalación de una Refinería de Petróleo en Extremadura. Refinería Balboa. Disponible en:
www.grupoag.es/refineriabalboa/medioambiente/pdf/larefineria.pdf. Consultado el 27-1-2016
- 14-Henao C. y Vélez J. (2002) Manual del laboratorio. Diseño de procesos químicos. Uso del paquete de simulación HYSYS. *Process*. UPB. Medellín.
- 15-Hernández G.J. (2011). Instituto politécnico nacional. Escuela superior de ingeniería química e industrias extractivas. Isomerización de n-C₅ y n-C₆. Disponible en www.gustato.com. Consultado el 23-1-2016.
- 16-Hernández J.M.(2013) Síntesis Química, Estudios de caracterización y reactividad de un material catalítico a base de ZrO₂-H₃.
- 17-Iborra M.(2013) Reactores multifásicos. Universidad de Barcelona.
- 18-KBC. *Advanced Technologies. Petro- SIM: El nuevo estándar en simulación de refinerías* (2005-2015).
- 19-Kraus, R. S. (2011) Proceso de Refino del Petróleo. En *Enciclopedia de Salud y Seguridad del Trabajo*.
- 20-LluchUrpí, J. (2000). Tecnología y Margen del Refino.
- 21-Lozowy A. (2014) *Picturing Industrial Landscapes. Space and culture*.

- 22-Mackler C. (2012) Universidad tecnológica nacional. Facultad regional Rosario, Argentina. Departamento de ingeniería química. Craqueo catalítico.
- 23-MathPro(2011) Introducción a la refinación del petróleo y producción de gasolina y diésel con contenido ultra bajo de azufre. Disponible en:www.theicct.org/sites/default/files/ICCT_RefiningTutorial_Spanish.pdf. consultado el 20-1-2016.
- 24-McGraw Hill (2009). *Conclutions and recommendations for thermo models*. Disponible en:www.chemstations.net. Consultado el 23-1-2016
- 25-Mesa M.J. (2001) Procesamiento de naftas en el reactor del complejo de desintegración catalítica (ccu) del crp-cardón. Caracas.
- 26-Molina C. D. (2014) Trabajo de diploma en opción al título de ingeniero químico. Propuesta de reconversión de la unidad de isomerización de pentano de la refinería Camilo Cienfuegos de alta a baja temperatura.
- 27- Montes de Oca D.E. (2013) Trabajo fin de máster. Simulación de la unidad de Reformado Catalítico de la Refinería Estatal Esmeraldas. Universidad Politécnica de Madrid. Disponible en: <http://repositorio.educacionsuperior.gob.ec/bitstream/28000/501/1/T-SENESCYT-0312.pdf>. Consultado el 19-1-2016)
- 28-Neves Passos, C. (2011). Curso de Procesos de Refinación.
- 29-OSHA (*Occupational Safety and Health Administration*) *Technical Manual (OTM) Section IV* (2012). Disponible en: www.osha.gov/dts/osta/otm. consultado el 21-1-2016.
- 30-Pacheco H.S. (2006) Evaluación del software para la simulación de procesos químicos.
- 31-PEMEX (2013) Industria petrolera mexicana. Disponible en: <http://www.industriapetroleramexicana.com/tag/isomerizacion/>. Consultado el 23-1-2016.
- 32-PEMEX, (2005) Refinación. Estudio de riesgo ambiental nivel 3. "Planta Isomerizadora de pentanos y hexanos".
- 33-PRO/II (2007). *United States of America. Invensys Systems, Inc.*
- Rice, Lynn H. (2010) Invención de un proceso de Isomerización (patentados), Estados Unidos. Disponible en:

<http://patentados.com/patente/proceso-de-isomerizacion/>. Consultado el 23-1-2016.

- 34-Romero K.(2011) Clasificación de las refinerías. Petróleo América. Disponible en:<http://www.petroleoamerica.com/2011/09/clasificacion-de-las-refinerias.html>. consultado el 23-1-2016.
- 35-Ronald, F., y Colwell, P. E. (2009). *Oil Refinery Processes a Brief Overview*.
- 36-Santo C. E. y Vilar V J. P., 2012 *Chemical Engineering Journal* 183. Disponible en: www.elsevier.com. Consultado el 23-1-2016.
- 37-Sauvanaud L. (2004) Desarrollo de un micro-reactor de lecho transportado y su aplicación al estudio del craqueo catalítico. Tesis de doctorado,Valencia. disponible en: <https://riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/8641/tesisUPV2171.pdf>. consultado el 18-1-2016.
- 38-Viera, R. B *et al.*(1988). Modelación matemática para ingenieros químicos. Editorial Pueblo y Educación. La Habana. Cuba.
- 39-Wiley J., (2007) *Published by John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. Published simultaneously in Canada.*

Anexos:

Anexo 1

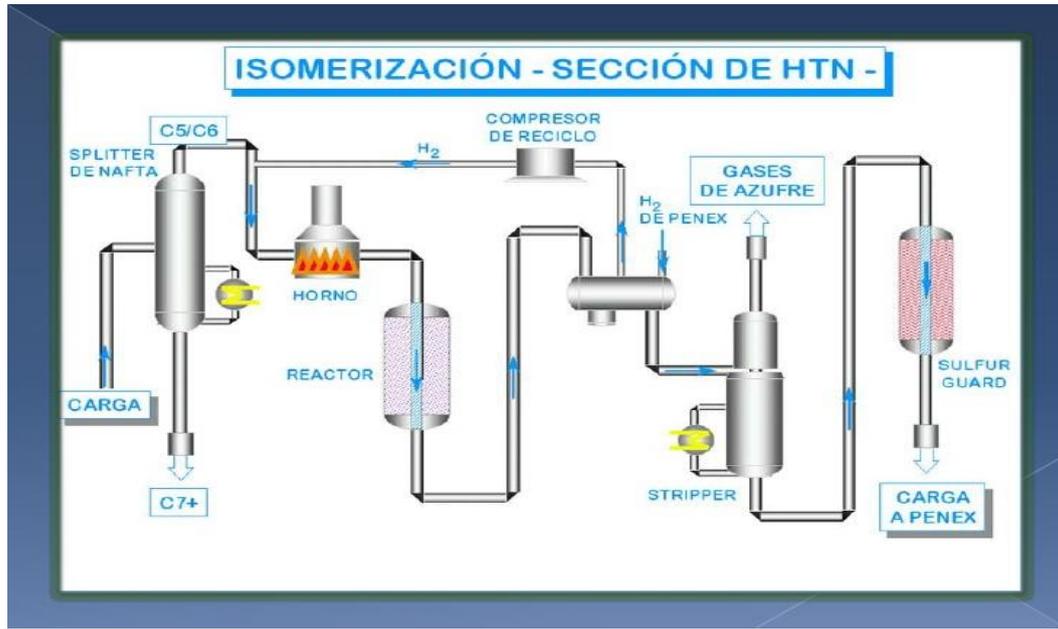


Figura A.1: Esquema de la sección de Hidrotratamiento de Naftas (HTN)

Anexo 2

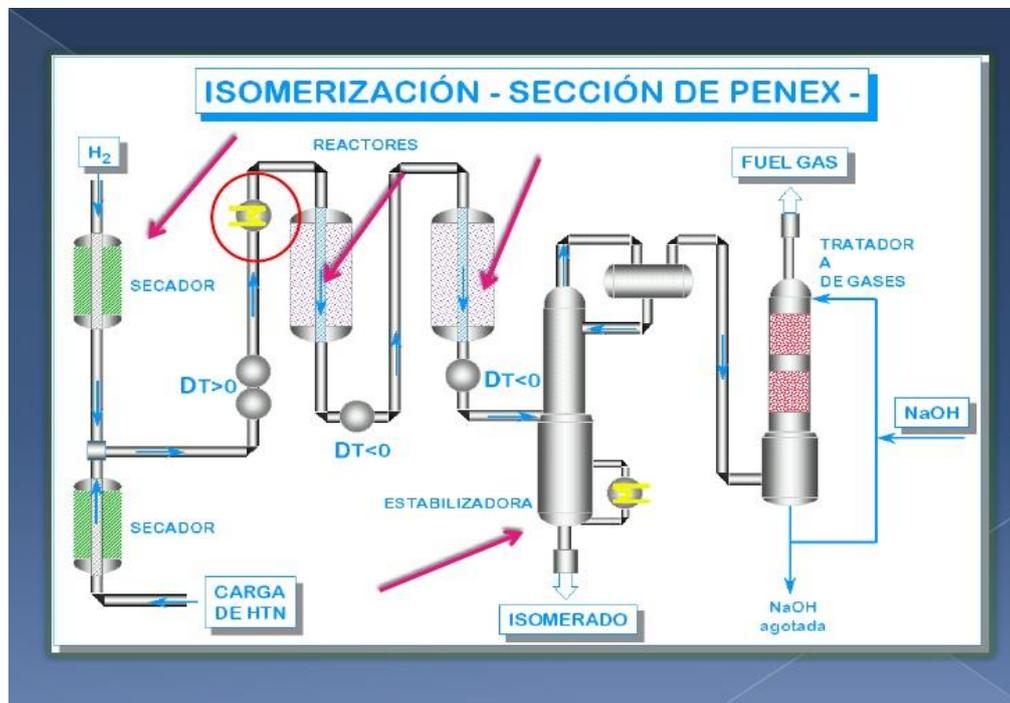


Figura A.2: Esquema de la sección de reacción de isomerización (PENEX)

Anexo 3

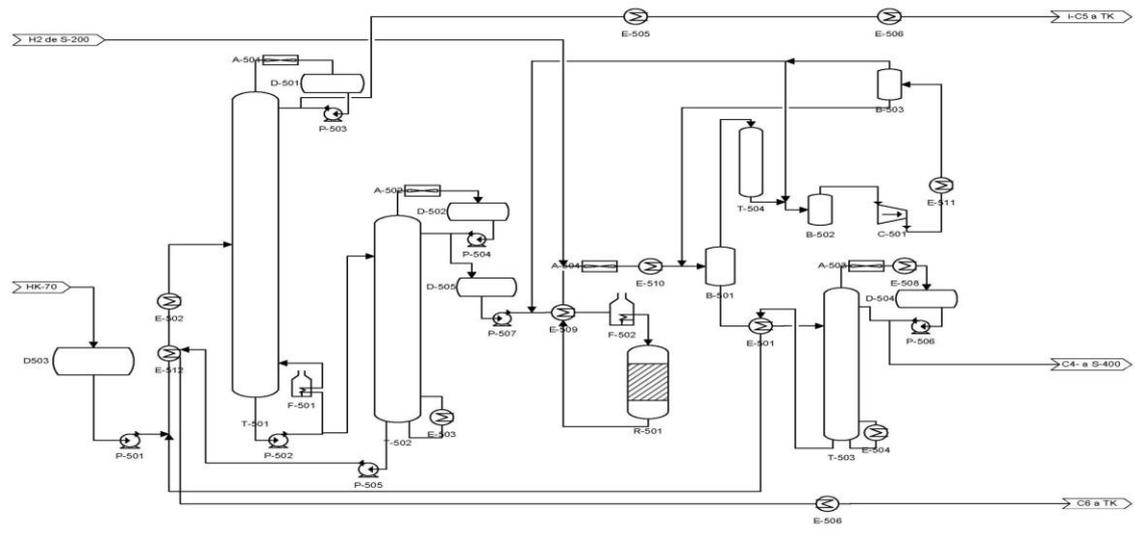


Figura A.3: Esquema previsto para la refinería “Camilo Cienfuegos” según el diseño ruso.

Anexo 4

Flujo de hidrógeno (kmol/h)	Flujo de isomerizado estable (kmol/h)
120	39,9799432
126,4	31,82
130	29,11
135	23,5
140	18,00677125

Tabla A.1: Tabla del comportamiento de flujo de hidrógeno con respecto al producto deseado.

Anexo 5

Flujo de HK-70 (kg/h)	Flujo de isomerizado estable(kg/h)
16340	1777
17516	2279
17920	2559
18240	2810
18560	3149

Tabla A.2: Tabla del comportamiento de flujo de la fracción de HK-70 con respecto al flujo de la corriente de salida de la torre estabilizadora: isomerizado estable.

Anexo 6

6	Material Stream: HK-70				Fluid Package:	Basis-1
7					Property Package:	PRSV
8						
9	CONDITIONS					
10						
11		Overall	Liquid Phase	Aqueous Phase	Vapour Phase	
12	Vapour / Phase Fraction	0.0000 *	0.8933	0.1067	0.0000	
13	Temperature: (C)	85.68	85.68	85.68	85.68	
14	Pressure: (kPa)	607.9 *	607.9	607.9	607.9	
15	Molar Flow (kgmole/h)	265.5	237.2	28.33	0.0000	
16	Mass Flow (kg/h)	1.752e+004 *	1.701e+004	510.4	0.0000	
17	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	27.37	26.86	0.5115	0.0000	
18	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.740e+005	-1.612e+005	-2.811e+005	-1.346e+005	
19	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	84.05	85.85	68.96	155.9	
20	Heat Flow (kJ/h)	-4.619e+007	-3.822e+007	-7.965e+006	0.0000	
21	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	27.04 *	26.75	0.5032	0.0000	
22	Material Stream: isom estables				Fluid Package:	Basis-1
23					Property Package:	PRSV
24						
25	CONDITIONS					
26						
27		Overall	Liquid Phase	Vapour Phase		
28	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000	0.0000		
29	Temperature: (C)	123.6	123.6	123.6		
30	Pressure: (kPa)	980.7	980.7	980.7		
31	Molar Flow (kgmole/h)	30.95	30.95	0.0000		
32	Mass Flow (kg/h)	2279	2279	0.0000		
33	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	3.524	3.524	0.0000		
34	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.488e+005	-1.488e+005	-1.329e+005		
35	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	80.02	80.02	142.8		
36	Heat Flow (kJ/h)	-4.606e+006	-4.606e+006	0.0000		
37	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	3.509 *	3.509	0.0000		
38	Material Stream: C4S400				Fluid Package:	Basis-1
39					Property Package:	PRSV
40						
41	CONDITIONS					
42						
43		Overall	Liquid Phase	Aqueous Phase	Vapour Phase	
44	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.9993	0.0007	0.0000	
45	Temperature: (C)	-28.39	-28.39	-28.39	-28.39	
46	Pressure: (kPa)	1177	1177	1177	1177	
47	Molar Flow (kgmole/h)	235.3	235.1	0.1745	0.0000	
48	Mass Flow (kg/h)	8604	8601	3.143	0.0000	
49	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	19.84	19.84	3.150e-003	0.0000	
50	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.124e+005	-1.123e+005	-2.895e+005	-7.950e+004	
51	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	100.1	100.1	40.93	162.4	
52	Heat Flow (kJ/h)	-2.644e+007	-2.639e+007	-5.051e+004	0.0000	
53	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	19.41 *	19.41	3.099e-003	0.0000	
54	Material Stream: producto				Fluid Package:	Basis-1
55					Property Package:	PRSV
56						
57	CONDITIONS					
58						
59		Overall	Liquid Phase			
60	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000			
61	Temperature: (C)	123.6	123.6			
62	Pressure: (kPa)	980.7	980.7			
63	KBC Advanced Technologies, plc. Petro-SIM v6.0 (Build 1326) Page 1 of 4					

7	Material Stream: producto (continued)				Fluid Package:	Basis-1
8					Property Package:	PRSV
9	CONDITIONS					
10						
11		Overall	Liquid Phase			
12	Molar Flow (kgmole/h)	21.66	21.66			
13	Mass Flow (kg/h)	1595	1595			
14	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	2.467	2.467			
15	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.488e+005	-1.488e+005			
16	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	80.02	80.02			
17	Heat Flow (kJ/h)	-3.225e+006	-3.225e+006			
18	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	2.456 *	2.456			
19	Material Stream: 18				Fluid Package:	Basis-1
20					Property Package:	PRSV
21	CONDITIONS					
22						
23		Overall	Vapour Phase			
24	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
25	Temperature: (C)	363.3	363.3			
26	Pressure: (kPa)	3334	3334			
27	Molar Flow (kgmole/h)	1.830e+004	1.830e+004			
28	Mass Flow (kg/h)	5.879e+005	5.879e+005			
29	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1463	1463			
30	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-6.272e+004	-6.272e+004			
31	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	220.3	220.3			
32	Heat Flow (kJ/h)	-1.148e+009	-1.148e+009			
33	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1572 *	1572			
34	Material Stream: H2S200				Fluid Package:	Basis-1
35					Property Package:	PRSV
36	CONDITIONS					
37						
38		Overall	Vapour Phase			
39	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
40	Temperature: (C)	211.0 *	211.0			
41	Pressure: (kPa)	588.4 *	588.4			
42	Molar Flow (kgmole/h)	126.4 *	126.4			
43	Mass Flow (kg/h)	612.2	612.2			
44	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	4.221	4.221			
45	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3439	-3439			
46	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	134.2	134.2			
47	Heat Flow (kJ/h)	-4.347e+005	-4.347e+005			
48	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---			
49	Material Stream: 21				Fluid Package:	Basis-1
50					Property Package:	PRSV
51	CONDITIONS					
52						
53		Overall	Vapour Phase			
54	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
55	Temperature: (C)	80.00 *	80.00			
56	Pressure: (kPa)	3334	3334			
57	Molar Flow (kgmole/h)	1.842e+004	1.842e+004			
58	Mass Flow (kg/h)	5.885e+005	5.885e+005			
59	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1467	1467			
60	KBC Advanced Technologies, plc. Petro-SIM v6.0 (Build 1326) Page 2 of 4					

6	Material Stream: 21 (continued)				Fluid Package:	Basis-1		
7					Property Package:	PRSV		
8					CONDITIONS			
9		Overall	Vapour Phase					
10								
11	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-8.653e+004	-8.653e+004					
12	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	170.4	170.4					
13	Heat Flow (kJ/h)	-1.594e+009	-1.594e+009					
14	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1599 *	1600					
15					Fluid Package:	Basis-1		
16	Material Stream: 12				Property Package:	PRSV		
17					CONDITIONS			
18						Overall	Vapour Phase	
19								
20	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000					
21	Temperature: (C)	40.00	40.00					
22	Pressure: (kPa)	3334	3334					
23	Molar Flow (kgmole/h)	1.814e+004	1.814e+004					
24	Mass Flow (kg/h)	5.774e+005	5.774e+005					
25	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1444	1444					
26	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-8.918e+004	-8.918e+004					
27	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	161.2	161.2					
28	Heat Flow (kJ/h)	-1.617e+009	-1.617e+009					
29	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1584 *	1585					
30					Fluid Package:	Basis-1		
31	Material Stream: 14				Property Package:	PRSV		
32					CONDITIONS			
33						Overall	Liquid Phase	
34								
35	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000					
36	Temperature: (C)	40.00 *	40.00					
37	Pressure: (kPa)	294.2	294.2					
38	Molar Flow (kgmole/h)	104.6	104.6					
39	Mass Flow (kg/h)	7627	7627					
40	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	12.19	12.19					
41	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.788e+005	-1.788e+005					
42	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	42.56	42.56					
43	Heat Flow (kJ/h)	-1.870e+007	-1.870e+007					
44	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	12.14 *	12.14					
45					Fluid Package:	Basis-1		
46	Material Stream: 29				Property Package:	PRSV		
47					CONDITIONS			
48						Overall	Vapour Phase	
49								
50	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000					
51	Temperature: (C)	110.0 *	110.0					
52	Pressure: (kPa)	3334	3334					
53	Molar Flow (kgmole/h)	266.2	266.2					
54	Mass Flow (kg/h)	1.088e+004	1.088e+004					
55	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	23.36	23.36					
56	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-9.541e+004	-9.541e+004					
57	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	166.5	166.5					
58	Heat Flow (kJ/h)	-2.540e+007	-2.540e+007					
59					Fluid Package:	Basis-1		
60	Material Stream: 29				Property Package:	PRSV		
61					CONDITIONS			
62						Overall	Vapour Phase	
63								
64	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000					
65	Temperature: (C)	110.0 *	110.0					
66	Pressure: (kPa)	3334	3334					
67	Molar Flow (kgmole/h)	266.2	266.2					
68	Mass Flow (kg/h)	1.088e+004	1.088e+004					
69	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	23.36	23.36					
70	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-9.541e+004	-9.541e+004					
71	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	166.5	166.5					
72	Heat Flow (kJ/h)	-2.540e+007	-2.540e+007					

6	Material Stream: 29 (continued)				Fluid Package:	Basis-1
7					Property Package:	PRSV
8						
9	CONDITIONS					
10						
11		Overall	Vapour Phase			
12	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	22.40 *	22.40			
13	Material Stream: 23				Fluid Package:	Basis-1
14					Property Package:	PRSV
15						
16	CONDITIONS					
17						
18		Overall	Vapour Phase			
19	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
20	Temperature: (C)	360.0 *	360.0			
21	Pressure: (kPa)	3334	3334			
22	Molar Flow (kgmole/h)	1.831e+004	1.831e+004			
23	Mass Flow (kg/h)	5.879e+005	5.879e+005			
24	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1460	1460			
25	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-6.269e+004	-6.269e+004			
26	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	219.8	219.8			
27	Heat Flow (kJ/h)	-1.148e+009	-1.148e+009			
28	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1584 *	1585			
29	Material Stream: 6				Fluid Package:	Basis-1
30					Property Package:	PRSV
31						
32	CONDITIONS					
33						
34		Overall	Vapour Phase			
35	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
36	Temperature: (C)	100.0 *	100.0			
37	Pressure: (kPa)	405.3	405.3			
38	Molar Flow (kgmole/h)	274.8	274.8			
39	Mass Flow (kg/h)	1.820e+004	1.820e+004			
40	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	28.43	28.43			
41	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.472e+005	-1.472e+005			
42	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	158.0	158.0			
43	Heat Flow (kJ/h)	-4.046e+007	-4.046e+007			
44	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	28.10 *	28.10			