ANALISIS DE SECUENCIAS DE REACCIÓN-DESTILACIÓN PARA LA PRODUCCIÓN DE TERT-AMYL METHYL ETHER

PROYECTO DE RESIDENCIA PROFESIONAL

PRESENTA:

Sergio Damián Vázquez

Asesor Interno: Dr. Arnulfo Rosales Quintero
Revisores: MC. Samuel Enciso Sáenz
MC. Juan José Solís Zavala

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas **Diciembre 2011**

INDICE

1. Introducción *2*

2. Justificación *3*

3. Objetivos. *4*

4. Caracterización del área en que participó *5*

5. Problemática a resolver *7*

6. Alcance del proyecto *8*

7. Actividades a realizadas *9*

8. Fundamento teórico *10*

9. Métodos y propuestas de solución *23*

10. Resultados *30*

11. Conclusiones y recomendaciones *86*

12. Referencias bibliográficas *87*

13. Glosario *89*

14. Cronograma. *90*

15. Anexos *91*

16. Algoritmo ASPEN *92*

1. Introducción

La destilación reactiva es un proceso en el cual se integra la reacción y separación de componentes en el mismo equipo. Tiene la ventaja que se reducen costos, mejor conversión en los reactivos y en la selectividad de productos. Una de las aplicaciones es producir Ter Amil Metil Éter (TAME), que es un aditivo oxigenado que ayuda aumentar el octanaje en la gasolina, lo que disminuye las detonaciones indeseables en la combustión.

La simulación de proceso ha sido usada en la ingeniería química por más de medio siglo, y hasta el día de hoy no es la excepción. Es por ello, que en este trabajo se hace uso de esta herramienta para hacer el diseño de un reactor acoplado lateralmente a la columna de destilación, y así, obtener TAME, que es el producto terminado.

Además, para ver más fácilmente las ventajas de este nuevo diseño, se manejaran las mismas variables como presión en el sistema, flujo y fracciones de los reactivos a utilizar.

También se agrega diagramas ternarios y residuales a diferentes presiones que nos ayudará a encontrar los azeótropos correspondientes y así manipular de mejor manera, en que plato o etapa de la columna se hará la separación del producto o una recirculación de reactivos que se puedan volver a utilizar y en qué etapa o plato volverlo a incorporar.

Por último, se muestran en tablas y gráficas los diferentes resultados con sus perfiles termodinámicos en cada etapa de la columna del proceso de Destilación- Reactiva y del Proceso del Reactor Acoplado a la Columna.

2. Justificación

Durante la combustión de combustibles fósiles se pueden presentar detonaciones indeseables, lo que provoca un mal funcionamiento y bajo rendimiento, por esto se han desarrollado aditivos oxigenados en sustitución del tetraetilo de plomo (que es altamente contaminante) como el Metil-Ter-Butil-Éter (MTBE), el Ter-Amil-Metil-Éter (TAME) y el Etil-Ter-Butil-Éter (ETBE).

Estos aditivos oxigenados, se adicionan a las gasolinas para elevar su número de octano, proporcionando a la vez una mayor oxigenación, lo que incide directamente en una combustión más completa y en un mejor funcionamiento de los motores. De estos aditivos oxigenados, los que han tenido un mayor uso a nivel mundial (incluso en nuestro país), han sido el MTBE y el TAME, debido a su alto valor de octano en la mezcla con gasolina, a su baja presión de vapor y sobre todo a su alta disponibilidad, al producirse en plantas integradas a las refinerías, donde son aprovechadas las materias primas de refinación requeridas para su elaboración (metanol, butanos, butilenos, isobutanos e isoamileno), con las ventajas económicas que ello representa.

Pemex Refinación tiene en operación varias plantas para producir aditivos oxigenados MTBE y TAME y otras están en etapa de construcción, con lo que se continúa fortaleciendo la estructura productiva de gasolinas de alta calidad para el mercado nacional.

Actualmente, se han propuesto procesos que involucran la separación de destilación reactiva, una alternativa es el uso de reactores laterales mediante los cuales se puede obtener la misma conversión pero con un mejor control de las variables de operación y una reducción en la carga térmica en la columna de destilación llevando a una reducción en los costos de operación.

3. Objetivos.

Objetivo General.

1. Comparar los beneficios del uso de reactores acoplados a columnas de destilación con el proceso de destilación-reactiva para la producción de Ter Amil Metil Éter (TAME).

Objetivos Específicos

1. Investigar cuáles son los métodos termodinámicos que describen el equilibrio de fases (NRTL, UNIQUAC, UNIFAC), y hacer uso de ellos para la obtención de diagramas ternarios y residuales interpretando los puntos de separación en la columna.

2. Aplicar simulador de procesos químicos ASPEN para implementar el diagrama de flujo de procesos con todas las unidades y recirculaciones.

3. Analizar los principios de la destilación reactiva para implementar la producción de TAME.

4. Implementar un proceso de diferentes configuraciones utilizando varios reactores laterales acoplados a una columna y comparar los flujos de producción de TAME con el modelo destilación reactiva.

4. Caracterización del área en que participó

El lugar donde se realizó el presente trabajo fue en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez, que se encuentra ubicada en Carretera Panamericana Km 1080 de Tuxtla Gutiérrez, Chiapas.

Figura 5.1 Ubicación del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez (Google Earth, 2010)

Visión del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez

"Formar de manera integral profesionales de excelencia en el campo de la ciencia y la tecnología con actitud emprendedora, respecto al medio ambiente y apego a los valores éticos".

Misión del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez:

"Ser una Institución de excelencia en la educación superior tecnológica del Sureste, comprometida con el desarrollo socioeconómico sustentable de la región".

Valores

- El ser humano
- El espíritu de servicio
- El liderazgo
- El trabajo en equipo
- La calidad
- El alto desempeño

5. Problemática a resolver

En este proyecto se proponen nuevos modelos de reacción-destilación para la producción de Ter Amil Metil Éter (TAME), con una secuencia de reactores acoplados a una columna de destilación con el objetivo de obtener la misma o mayor cantidad de producto terminado TAME

Para lo anterior, se emplea la ayuda de un simulador, facilitándole variables que se podrán manipular. Las variables a manipular para la reacción-destilación son el reflujo y el destilado, y no variables como la masa del catalizador, que darían multiestados en el proceso del reactor.

Uno de los problemas más grandes en este proyecto es programar la cinética de reacción en el ASPEN, así que se buscará diferentes programadores como FORTRAN que puedan crear una subrutina y sea utilizada en el simulador ASPEN.

6. Alcance del Proyecto

En este proyecto una de las limitaciones para realizar las pruebas y obtención de resultados es que hizo con ayuda del simulador ASPEN, donde se determinaron todas las variables de operación en el diagrama del flujo de proceso que se diseñó.

Solo se propondrá la secuencia de reactores laterales acoplados a columnas de destilación, con un catalizador específico, y se hará la comparación con el modelo de destilación-reactiva específicamente en cantidad de flujo del producto terminado Ter Amil Metil Éter (TAME).

7. Actividades a realizadas

1. **Revisión bibliográfica:** El alumno se documentó constantemente en el tema desarrollado en la residencia.

2. **Correlación de equilibrio de fase en varios modelos:** Se revisó y utilizó varios modelos para correlacionar datos con UNIQUAC, UNIFAC, NRTL con la interacción de compuestos que involucran el proceso de Ter-Amil-Metil-Éter: Metanol, TAME, 2-metil-1-Butano, 2-metil-2-Butano, Isopentanos.

3. **Elaboración de diagramas Ternarios y Residuales:** Por medio del ASPEN se obtuvieron los diagramas ternarios y residuales a los condiciones especificadas en el proceso.

4. **Programación de la cinética de reacción del mecanismo de TAME:** Se realizó un programa en FORTRAN para el mecanismo de reacción, con la cinética química del TAME y simuló en ASPEN como una subrutina.

5. **Elaboración y simulación proceso de destilación-reactiva y del diagrama de proceso de destilación acoplado con reactores laterales:** Se realizó un diagrama para cada proceso con el fin de organizar los flujos de entrada y salida, así como las condiciones en la que operará al principio el simulador ASPEN

6. **Modificación de variables en el simulador y obtención de los resultados:** Se cambiaron constantemente las variables que se podían modificar para obtener el óptimo por medio del simulador ASPEN.

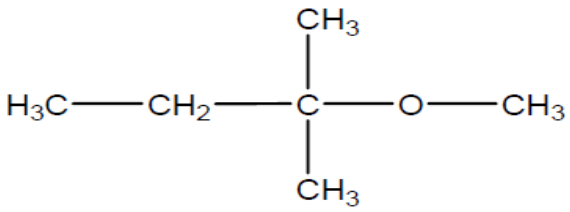
7. **Interpretación de los resultados:** Se concluyó que beneficios y desventajas tiene cada uno de los dos procesos propuestos.

8. Fundamento teórico

El Ter Amil Metil Éter (TAME) se adiciona a la gasolina para elevar su número de octano, proporcionando a la vez una mayor oxigenación, lo que incide directamente en una combustión más completa y en un mejor funcionamiento de los motores.

Los principales problemas de una gasolina con bajo número de octano son la generación de detonaciones o explosiones en el interior de las máquinas de combustión interna, aparejado esto con un mal funcionamiento y bajo rendimiento del combustible, cuando el vehículo está en movimiento, aunado a una elevada emisión de contaminantes.

Identificación del Producto TAME

Nombre Químico	2 methoxy-2-metil- Butano
Otros nombres	Ter Amil Metil Éter Tertiary Amyl Metyl Ether 1,1- Dimethylpropyl methyl ether Methyl Tert-Pentyl Ether
Nombre Comercial	TAME
Fórmula molecular	$C_6H_{14}O$
Estructura molecular	
Peso molecular	102.18 gr/mol

Propiedades Fisicoquímicas

Aspecto	Líquido incoloro
Punto de Ebullición	86.3 ˚C
Gravedad específica	0.7703
Presión de vapor	9.0 kPa a 20 ˚C
Solubilidad	10.71 g/L a 20 ˚C
Contante de Henry	90 en Kpa y g/L
Coeficiente de partición (n-octanol/agua)	Log P_{ow}=1.55
Coeficiente de Adsorción	Log K_{oc} = 1.82
Punto de fusión	-11 ºC
Límite de Flamabilidad	Superior = 7.1 % Inferir = 1.0 %
Temperatura de Autoignición	430 ºC
Propiedades explosivas	La mezcla de vapor-aire puede formar una mezcla explosiva
Reactividad	Reacciona con agentes oxidantes fuertes. Estable bajo condiciones normales.

Modelos de equilibrio de fases

La aplicación de modelos de solución para correlacionar los resultados que se obtienen en los experimentos, resulta de gran importancia para ampliar la visión del comportamiento del sistema y tener un parámetro de comparación sobre la validez de los resultados experimentales obtenidos. Se realizó una revisión bibliográfica sobre los modelos que correlacionan datos experimentales del equilibrio de fases líquido-líquido, y se eligieron modelos de INIQUAC (Universal Quasi-Chemical Activity Coefficients), NRTL (Non Random Two Liquids) y UNIFAC. Estos modelos son adecuados para correlacionar datos de equilibrio líquido-líquido de sistemas ternarios.

Modelo NRTL

El modelo de NRTL fue desarrollado por Renon y Prausnitz (1968) es aplicable a sistemas parcialmente miscibles. El fundamento para la derivación de la ecuación NRTL es una teoría de fluidos, en la cual se asume que un líquido tiene una estructura hecha de celdas de moléculas de dos tipos, en una mezcla binaria cada molécula se considera que está rodeada por moléculas de ambos tipos, en proporciones determinadas por la energía de interacción de Gibbs.

Para el modelo de NRTL la energía de exceso de Gibbs está dada por la ecuación:

$$\frac{g^E}{RT} = x_1 x_2 \left[\frac{G_{21}\tau_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{G_{12}\tau_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right] \tag{1.1}$$

Donde

$$\tau_{12} = \frac{g_{12} - g_{22}}{RT} \tag{1.2}$$

$$\tau_{21} = \frac{g_{21} - g_{21}}{RT} \tag{1.3}$$

$$G_{12} = e^{(-\alpha_{12}\tau_{12})} \tag{1.4}$$

$$G_{21} = e^{(-\alpha_{21}\tau_{21})} \tag{1.5}$$

Donde g_{ij} representa el parámetro de energía característico de la interacción ij. El parámetro α_{12} se relaciona con la no aletoriedad en la mezcla. De acuerdo con un gran número de resultados para la ecuación de NRTL indican que α_{12} varía de 0.20 a 0.47.

A partir de la ecuación (1.1) los coeficientes de actividad se expresan con las ecuaciones (1.6) y (1.7).

$$\ln \gamma_1 = {x_2}^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right) \right] \tag{1.6}$$

$$\ln \gamma_2 = {x_1}^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_2 + x_1 G_{21})^2} \right) \right] \tag{1.7}$$

Aplicando la ecuación de NRTL para un sistema multicomponente, la energía de exceso de Gibbs se expresa mediante la ecuación (1.8).

$$\frac{gE}{RT} = \sum_{i=1}^{m} xi \, \frac{\sum_{j=1}^{m} \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{i=1}^{m} G_{ii} x_{ii}} \tag{1.8}$$

Donde

$$\tau_{ij} = \frac{g_{ji} - g_{ii}}{RT} \tag{1.9}$$

$$G_{ji} = e^{(-\alpha_{ji}\tau_{ji})} \qquad (\alpha_{ji} = \alpha_{ij}) \tag{1.10}$$

El coeficiente de actividad para el componente *i* en la mezcla está dado por la ecuación (1.11).

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{i=1}^{m} G_{li} x_l} + \sum_{j=1}^{m} \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{j=1}^{m} G_{lj} \, x_l} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_{n=1}^{m} x_n \tau_{nj} G_{nj}}{\sum_{l=1}^{m} G_{ij} x_l} \right] \tag{1.11}$$

Las ecuaciones (1.1) y (1.6) solamente contienen parámetros obtenidos de datos para sistemas binarios.

Modelo UNIQUAC

La ecuación UNIQUAC trata la energía libre de Gibbs $g = G^E/RT$ como constituida de dos partes aditivas, un término combinatorio g^C, que explica el tamaño molecular y las diferencias de forma y un término residual g^R que estima las interacciones moleculares.

$$g = g^C + g^R$$

La función g^C contiene únicamente parámetros de componentes puros, mientras que la función g^R incluye dos parámetros de interacción por cada par de moléculas. Para un sistema multicomponente esta relación se expresa de la manera siguiente:

$$g^C = \sum_i x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + 5 \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} \qquad (1.12)$$

Y

$$g^R = -\sum_i q'_i \, x_i \ln \left(\phi'_j \tau_{ji} \right) \qquad (1.13)$$

Donde ϕ y θ son la fracción del segmento y la fracción del área, y están dadas por:

$$\phi i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \qquad \theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \qquad \theta'_i = \frac{x_i q'_i}{\sum_j x_j q'_j}$$

Los subíndices i identifican especies, τ_i (volumen molar relativo) y q_i (un área superficial molecular relativa) son parámetros de los componentes puros. La influencia de la temperatura sobre g se introduce por medio de parámetros de interacción τ_{ji} de la ecuación (1.13), los cuales son dependientes de la temperatura:

$$T_{ji} = e^{\frac{-(u_{ji}-u_{ii})}{RT}} \qquad (1.14)$$

Los parámetros de interacción para la ecuación de UNIQUAC son las diferencias (u_{ji}-u_{ii}). Para un componente *i*, el coeficiente de actividad está dado por la ecuación (1.15).

$$\ln\gamma_i = \ln\frac{\phi_i^*}{x_i} + \frac{z}{2}q_i\ln\frac{\theta}{\phi_i^*} + l_i - \frac{\phi_i^*}{x_i}\sum x_j l_j - q_i{}'\ln\left(\sum_i \theta_j{}'\tau_{ji}\right) + q_i{}' - q_i{}'\sum_j \frac{\theta_j{}'\tau_{ij}}{\sum_k \theta_k{}'\tau_{kj}}$$

Donde

$$l_j = \frac{z}{2}(r_j - q_j) - (r_j - 1)$$

Las ecuaciones obtenidas describen el modelo de UNIQUAC.

MODELO UNIFAC

La ecuación UNIFAC se basa en UNIQUAC, y trata a g = G^E/RT como constituida de dos partes aditivas, un término *combinatorio* g^C, para explicar el tamaño molecular y las diferencias de forma, y un término *residual* g^R (no es una propiedad residual según se ha definido en la sección 6.2) para explicar las interacciones moleculares:

$$g = g^C + g^R \qquad (G.1)$$

La función g^C contiene solamente parámetros de especies puras, mientras que la función g^R incorpora dos parámetros binarios para cada par de moléculas. Para un sistema de multicomponentes,

$$g^C = \sum_i x_i \ln\frac{\Phi_i}{x_i} + 5\sum_i q_i x_i \ln\frac{\theta_i}{\Phi_i} \qquad (G.2)$$

Y

$$g^R = -\sum_i q_i x_i \ln\left(\sum_j \theta_j \tau_{ji}\right) \qquad (G.3)$$

En donde

$$\Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum x_j r_j} \qquad (G.4)$$

Y

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \qquad (G.5)$$

Los subíndices ***i*** identifican especies, y_j es un índice ficticio; todas las adiciones se hacen sobre todas las especies. Note que $\tau_{ji} \neq \tau_{ij}$; sin embargo, cuando *i* = *j,* entonces $\tau_{ii} = \tau_{jj} = 1$. En estas ecuaciones, r_i (un volumen molecular relativo) y ***qi*** (un área superficial molecular relativa) son parámetros de especies puras. La influencia de la temperatura sobre g se introduce por medio de los parámetros de interacción τ_{ji} de la ecuación (G.3), los cuales son dependientes de la temperatura:

$$\tau_{ji} = e^{\frac{-(u_{ji}-u_{ii})}{RT}} \qquad (G.6)$$

Los parámetros para la ecuación de UNIQUAC son, por consiguiente, valores de $(u_{ji} - u_{ii})$.

Al aplicar la ecuación (10.94) a la ecuación de UNIQUAC para g se encuentra una expresión para ln γ_{ig} [ecuaciones (G.l) a la (G.3)]. El resultado se da mediante las ecuaciones siguientes:

$$\ln \gamma_i = \ln {\gamma_i}^C + \ln {\gamma_i}^R \qquad (G.7)$$

$$\ln {\gamma_i}^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i\left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln\frac{J_i}{L_i}\right) \qquad (G.8)$$

Y

$$\ln \gamma_i{}^R = q_i \left(1 - \ln s_i - \sum_j \theta_j \frac{\tau_{ij}}{s_j} \right) \qquad (G.9)$$

En donde, además de las ecuaciones (G.5) y (G. 6),

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_i x_i} \qquad (G.10)$$

$$L_i = \frac{q_i}{\sum q_j x_j} \qquad (G.11)$$

$$s_i = \sum_l \theta_l \tau_{li} \qquad (G.12)$$

De nuevo, el subíndice *i* identifica especies, y *j* y *l* son índices ficticios. Todas las adiciones son sobre todas las especies, y τ_{ij} = 1 para *i* = *j***.** Los valores para los parámetros (u_{ij} -u_{jj}) se encuentran por regresión de los datos de EVL binario, y se dan por Gmehling *et al*.[2]

El método UNIFAC para la estimación de los coeficientes de actividad[3] depende del concepto de que una mezcla líquida puede ser considerada como una solución de las unidades estructurales de las cuales están formadas las moléculas, más que una solución de las moléculas mismas. Estas unidades estructurales se llaman subgrupos y algunas pocas de ellas se han enlistado en la segunda columna de la tabla G.1. Un índice, designado *k*, identifica cada subgrupo. El volumen relativo, R_k, y el área superficial relativa Q_k, son propiedades de los subgrupos y su valor se ha enlistado en las columnas 4 y 5 de la tabla G.1. También se muestran (columnas 6 y 7) ejemplos de las composiciones de los subgrupos de las especies moleculares. Cuando es posible construir una molécula a partir a de más de un conjunto de subgrupos, el conjunto que contiene el menor número de subgrupo diferentes es el conjunto correcto. La gran ventaja del

método UNIFAC es que un número relativamente pequeño de subgrupos se combina para formar un grupo muy grande de moléculas.

Los coeficientes de actividad dependen no solo de las prioridades de los subgrupos R_k y Q_k, sino también de las interacciones entre subgrupos. Aquí, se asignan subgrupos similares a un grupo principal, como se muestra en las primeras dos columnas de la tabla G.1 las designaciones de grupos principales, por ejemplo "CH_2", "ACH", etc. solamente son descriptivas. Todos los subgrupos que corresponden al mismo grupo principal se consideran idénticos con respecto a las interacciones de grupo. Por consiguiente, los parámetros que caracterizan las interacciones de grupo se identifican con pares de grupos *principales*. Los valores a_{mk} de parámetros para unos pocos pares se dan en la tabla G.2.

El método UNIFAC se basa en las ecuaciones UNIQUAC, para las cuales se dan los coeficientes de actividad en la ecuación (G.7). Cuando se aplican a una resolución de grupos, las ecuaciones (G.8) y (G.9) se escriben:

$$\ln {\gamma_i}^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i\left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln\frac{J_i}{L_i}\right) \qquad (G.13)$$

Y

$$\ln {\gamma_i}^R = q_i\left[1 - \sum_k\left(\theta_k\frac{\beta_{ik}}{s_k} - e_{ki}\ln\frac{\beta_{ik}}{s_k}\right)\right] \qquad (G.14)$$

Aún están dadas las cantidades J_i y L_i por las ecuaciones (G.10) y (G.11). Además, se aplican las definiciones siguientes:

$$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k \qquad (G.15)$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k \qquad (G.16)$$

$$e_{ki} = \frac{v_k^{(i)} Q_k}{q_i} \qquad (G.17)$$

$$B_{ik} = \sum_m e_{mi} \tau_{mk} \qquad (G.18)$$

$$\theta_k = \frac{\sum_i x_i q_i e_{ki}}{\sum_j x_j q_j} \qquad (G.19)$$

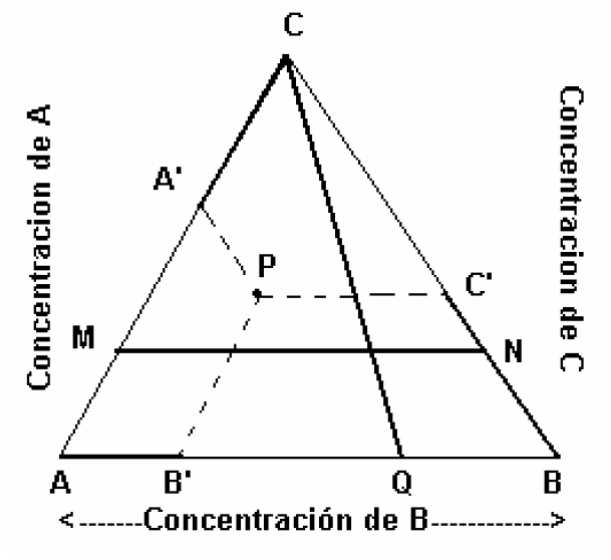
$$s_k = \sum_m \theta_m \tau_{mk} \qquad (G.20)$$

$$\tau_{mk} = e^{-\frac{\alpha_{mk}}{T}} \qquad (G.21)$$

El subíndice *i* identifica a las especies, y j es un índice ficticio que va sobre todas las especies. El subíndice *k* identifica los subgrupos y *m* es un índice ficticio que va sobre todos los subgrupos. La cantidad $v_k^{(i)}$ es el número de subgrupos del tipo k en una molécula de la especie i. El valor de los parámetros de los subgrupos R_k *y* Q_k**,** así como los parámetros a_{mk} de interacción del grupo se han tomado de tabulaciones de la bibliografía. Las tablas G. 1 y 6.2 muestran algunos valores de los parámetros; las designaciones numéricas de las tablas completas se conservan.

Propiedades del triángulo de concentraciones

El triángulo equilátero elegido para representar las concentraciones de un sistema ternario tiene la enorme ventaja de ser una figura muy regular con bastante simetría, y con una geometría muy simple. A continuación se verán las propiedades geométricas que se usan al estudiar el equilibrio heterogéneo en sistemas ternarios.



1. El triángulo equilátero tiene iguales sus lados, sus ángulos internos y externos, sus alturas, sus transversales de gravedad y sus bisectrices. Cada altura coincide con la transversal de gravedad, con la bisectriz y con la simetral correspondiente de modo que el baricentro es a la vez ortocentro y centro del triángulo.
2. Si los lados del triángulo expresan las concentraciones de A, B y C (en fracciones molares o en porcentaje en peso), entonces la concentración de A, B y C de un punto P cualquiera en el interior del triángulo viene dada por:

   $AB' = x_B$ (o porcentaje de B)

   $BC' = x_C$ (o porcentaje de C)

   $CA' = x_A$ (o porcentaje de A)

   Si el punto P está expresado en coordenadas dadas en porcentaje en peso, no tiene por qué coincidir con el punto P equivalente, expresado en coordenadas dadas en fracciones molares.
3. Una transversal cualquiera, por ejemplo CQ en la figura, es el lugar geométrico de los puntos que cumplen la condición x_A / x_B= constante, o bien %A/ %B= constante, en el caso que el triángulo esté expresado en porcentaje en peso.
4. Una paralela a cualquier lado del triángulo, por ejemplo MN / AB en la figura, debe satisfacer la relación que la suma de las concentraciones de

los componentes ubicados en el lado paralelo es constante. Así, para MN se tiene $x_A + x_B = 1 - x_C$ = constante, o bien (%A +%B)=100-%C = constante.

5. Si se elige, por ejemplo el punto P ubicado en el interior del triángulo AQC de la figura, las concentraciones de él pueden quedar expresadas en términos de A, Q y C, pero es imposible expresarlas en términos de Q, B y C porque el triángulo QBC ni siquiera contiene al punto P.

Líneas y reglas de Alkemade

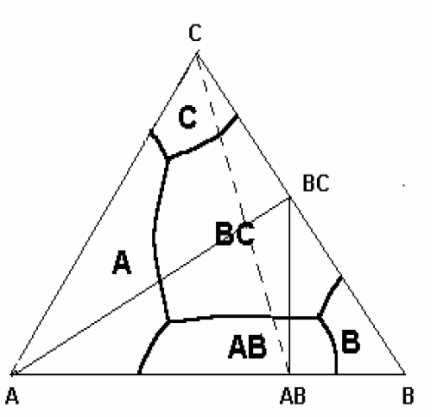
Se entiende por línea de Alkemade dentro o en la periferia de un diagrama ternario, la recta que une las composiciones de 2 fases primarias cuyas áreas son adyacentes y la intersección de las cuales forma una curva límite entre fases. Dicho en otras palabras es la línea que une a un compuesto AB con el tercer componente del sistema ternario.

Las líneas de Alkemade dependen de los datos experimentales, luego son resultados o consecuencia de ello.

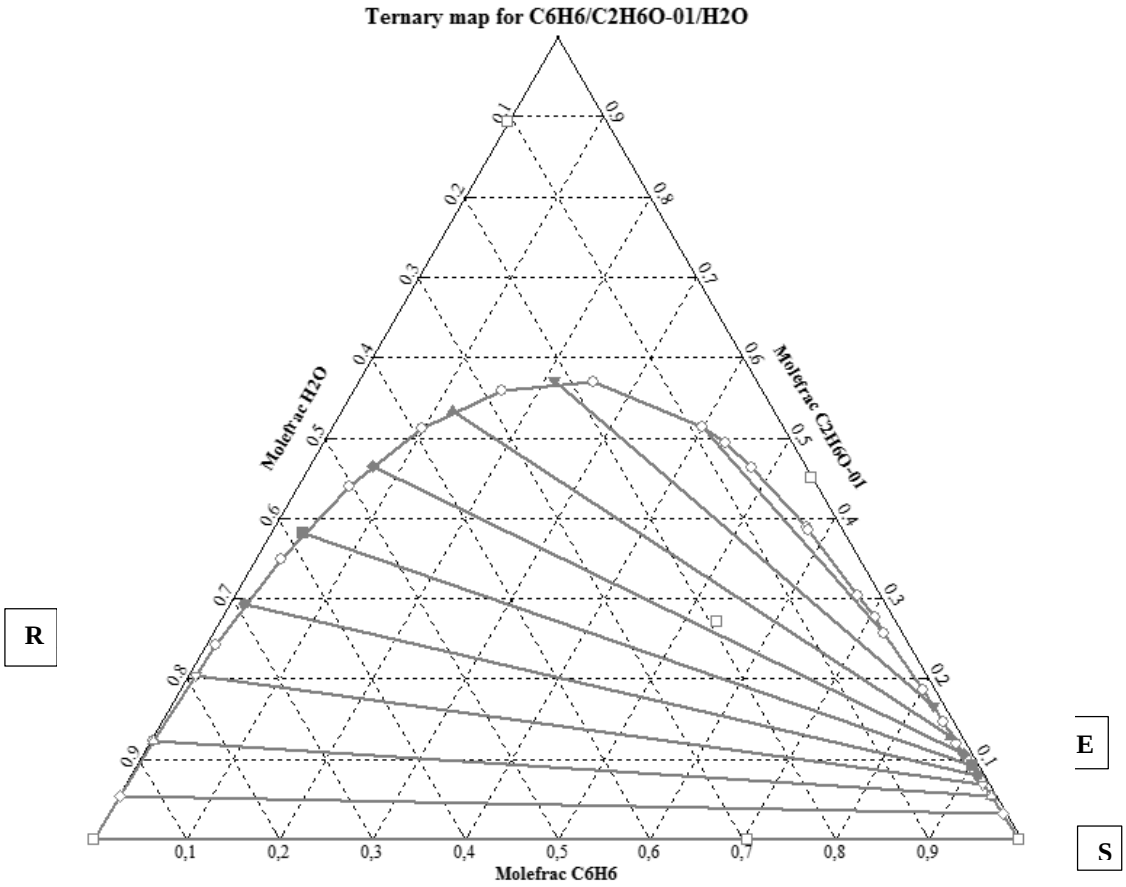
Como las líneas de Alkemade son muy importantes en los enfriamientos, se ven dos reglas importantes.

Reglas de Alkemade:

1. La temperatura, a lo largo de una curva límite entre fases, decrece alejándose de la línea de Alkemade.
2. La temperatura máxima en una curva límite entre fases se encuentra en la intersección de ésta con la línea de Alkemade (o en la extrapolación de ésta en el caso que no la corte).



Las operaciones de extracción pueden calcularse sobre un diagrama ternario. Sea una corriente de alimentación *F*, constituida por una disolución de un soluto C en un disolvente A (en este caso Etanol-Agua), y una corriente de disolvente *S*, constituida por disolvente B puro (Benceno). Ambas corrientes pueden situarse en el diagrama ternario tal como se indica. En el equipo de extracción *F* y *S* son mezcladas para obtener una mezcla bifásica. El punto mezcla, *M*, es la suma de *F* y *S*, es decir, es combinación lineal de ellas, por lo que se encontrará situado sobre la recta que une *F* y *S*. Para situar el punto *M* bastará con el balance de materia que se ha calculado donde nos servirá la composición para situarlo. Una vez alcanzado el equilibrio, la composición de las corrientes de refinado, *R*, y extracto, *E*, obtenidas vendrá dado por los extremos de la recta de reparto que pasa por el punto mezcla.



La línea de reparto es la línea de E a R, donde E es el punto que indica la extracción y la composición en ese punto.

9. Métodos y propuestas de solución

La figura 1 muestra la configuración de la columna junto con los parámetros de funcionamiento y el diseño. La tabla 1 muestra el diseño detallado y condiciones de operación para el presente análisis. La columna tiene 35 platos teóricos con dos corrientes, uno de los cuales es metanol puro y el otro es una alimentación que pasa por un reactor antes de mezclarse, con un 56-63% de conversión de Isoamilenos a TAME en el pre-reactor. La materia prima contiene componentes inertes, como el Isopentano, n-pentano, 1-pentano, 2-pentano, etc. El Isopentano es el principal componente de la fracción inerte total, y no hay mucha diferencia en los puntos de ebullición de estos componentes. Por lo tanto, para simplificar todos los componentes inertes han sido representados por un solo componente (es decir, Isopentano).

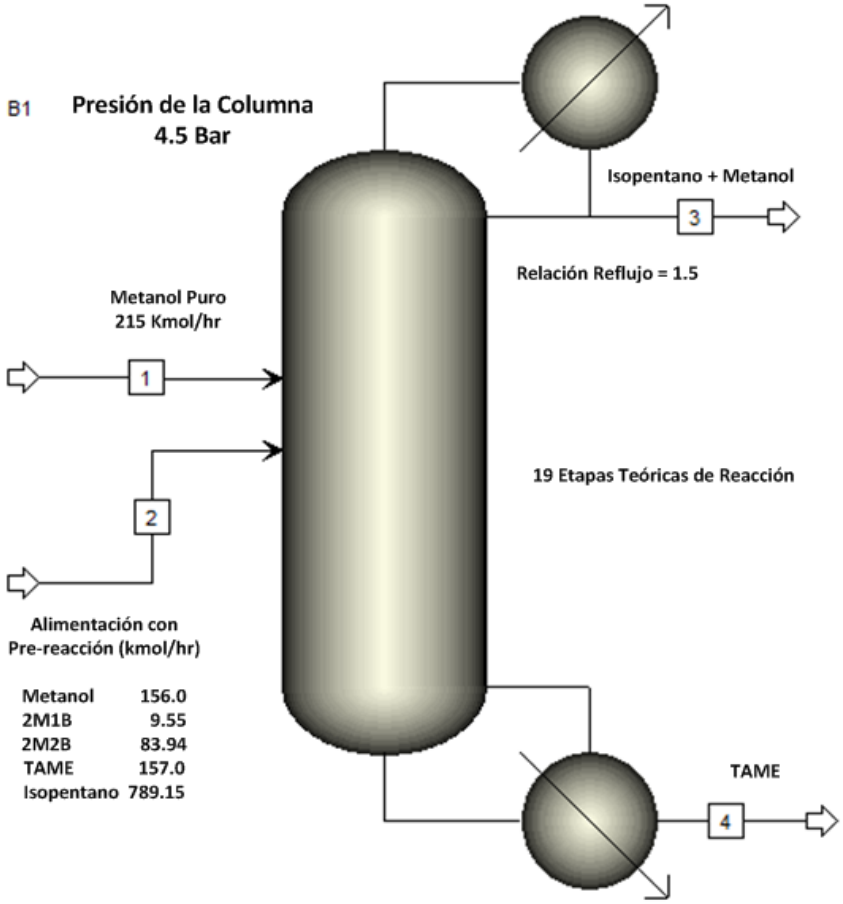


FIGURA 1. CONFIGURACIÓN DE LA COLUMNA DESTILACIÓN-REACCIÓN PARA SIMULACIÓN

Diseño y Síntesis en Estado Estable

El TAME es producido por la reacción de Isoamilenos [2-metil-1Butano (2M1B) y 2-metil-2-Butano (2M2B)] con metanol. Las reacciones involucradas en la síntesis de TAME son las siguientes:

$$MeOH + 2M1B \leftrightarrow TAME \quad R_1 = k_{f_1}\left(\frac{a_{2M1B}}{a_{MeOH}} - \frac{1}{K_{a1}}\frac{a_{TAME}}{a_{MeOH}^2}\right)$$

$$MeOH + 2M2B \leftrightarrow TAME \quad R_2 = k_{f_2}\left(\frac{a_{2M2B}}{a_{MeOH}} - \frac{1}{K_{a2}}\frac{a_{TAME}}{a_{MeOH}^2}\right)$$

$$2M1B \leftrightarrow 2M2B \quad R_3 = k_{f_3}\left(\frac{a_{2M1B}}{a_{MeOH}} - \frac{1}{K_{a1}}\frac{a_{2M2B}}{a_{MeOH}}\right)$$

Hay 3 isómeros de amileno [2-metil-1Butano (2M1B), 2-metil-2-Butano (2M2B) los cuales son reactivos, y 2-metil-3-Butano (2M3B)] el cual no es reactivo.

En el modelo dinámico por etapas en equilibrio de la columna de destilación reactiva, las suposiciones involucras son las siguientes: las constantes de transferencia de masa líquido y gas en cada etapa o plato de la columna, mezcla perfecta de vapor y líquido en cada plato, flujos de líquido en cada etapa, la reacción tiene lugar en fase líquida solamente. La columna tiene un condensador total con reflujo con su punto de burbuja. El balance de energía cuasiestática ha sido considerado para dejar de lado los términos dinámicos de la ecuación de energía.

El modelo matemático de este sistema es dado a continuación.

Ecuaciones para los platos reales:

$$0 = V_{k+1} + L_{k-1} + F_k - (L_k + S_k) - (V_k + S_k^V) + r_f \sum_{m=1}^{r}\sum_{i=1}^{C}\left(\gamma_{i,m} R_{m,k} \epsilon_k\right)$$

$$0 = V_{k+1}y_{i,k+1} + L_{k-1}x_{i,k-1} + F_k z_{i,k} - (L_k + S_k)x_{i,k} - (V_k + S_k^V)y_{i,k} + r_f \sum_{m=1}^{r} \left(\gamma_{i,m} R_{m,k} \epsilon_k\right)$$

$$0 = V_{k+1}H_{k+1} + L_{k-1}h_{k-1} + F_k h_{fk} - (L_k + S_k^L)h_k - (V_k + S_k^V)H_k + r_f \sum_{m=1}^{r} \left(R_{m,k} \epsilon_k H_{m,k}^R\right) - Q_k$$

$$y_{i,k} = K_{i,k} x_{i,k}$$

$$\sum_{i=1}^{C} x_{i,k} = 1$$

$$\sum_{i=1}^{C} y_{ik} = 1$$

Aquí, rf es un factor de multiplicación que toma valores iguales a cero de los no reactivos y otro para la fase liquida. El número Damkohler, Da = $K_{f1}W/F_{Total}$ es la relación entre el tiempo de residencia de líquido al tiempo de reacción. Aquí, k_{f1} es el flujo constante de la primera reacción en referencia con la temperatura.

Ecuaciones de Condensado:

$$0 = V_{k+1} + F_k - (L_k + D) - V_k$$

$$0 = V_{k+1}y_{i,k+1} + F_k z_{i,k} - (L_k + D)x_{i,k} - V_k y_{i,k}$$

$$0 = V_{k+1}H_{k+1}F_k h_{fk} - (L_k + D)h_k - V_k H_k - Qc$$

$$y_{i,k} = K_{i,k} x_{i,k}$$

$$\sum_{i=1}^{C} x_{i,k} = 1$$

$$\sum_{i=1}^{C} y_{ik} = 1$$

Para el caso del condensador total, V_k=0, el cual es una ecuación adicional. Asimismo, el reflujo regresa a la columna a su punto de burbuja; por lo que la condición de la suma de las composiciones de la fase de vapor se utiliza para determinar la temperatura de la etapa del condensador.

Ecuaciones del Rehervidor:

$$0 = L_{k-1} + F_k - B - V_k + r_f \sum_{m=1}^{r} \sum_{i=1}^{C} \left(\gamma_{i,m} R_{m,k} \epsilon_k\right)$$

$$0 = L_{k-1} x_{i,k-1} + F_k z_{i,k} - B x_{i,k} - V_k y_{i,k} + r_f \sum_{m=1}^{r} \left(\gamma_{i,m} R_{m,k} \epsilon_k\right)$$

$$0 = L_{k-1} h_{k-1} + F_k h_{fk} - B h_k - V_k H_k + r_f \sum_{m=1}^{r} \left(R_{m,k} \epsilon_k H_{m,k}^{R}\right) - Q_r$$

$$y_{i,k} = K_{i,k} x_{i,k}$$

$$\sum_{i=1}^{C} x_{i,k} = 1$$

$$\sum_{i=1}^{C} y_{ik} = 1$$

Coeficientes cinéticos son:

$$k_{f_1} = 1.7054 \times 10^{17} \times exp\left(-\frac{100000.0}{8.314} \times \frac{1}{T}\right)$$

$$k_{f_2} = 1.3282 \times 10^{17} \times exp\left(-\frac{95100.0}{8.314} \times \frac{1}{T}\right)$$

$$k_{f_3} = 3.6 \times 1.078 \times 10^{3} \times exp\left[-10861\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{333.15}\right)\right]$$

$$K_{a1} = exp\left(-8.3881 + \frac{4041.2}{T}\right)$$

$$K_{a2} = exp\left(-8.2473 + \frac{3225.3}{T}\right)$$

$$K_{a3} = exp\left(-0.188 + \frac{833.3}{T}\right)$$

$$\frac{kt}{km} = 0.1283$$

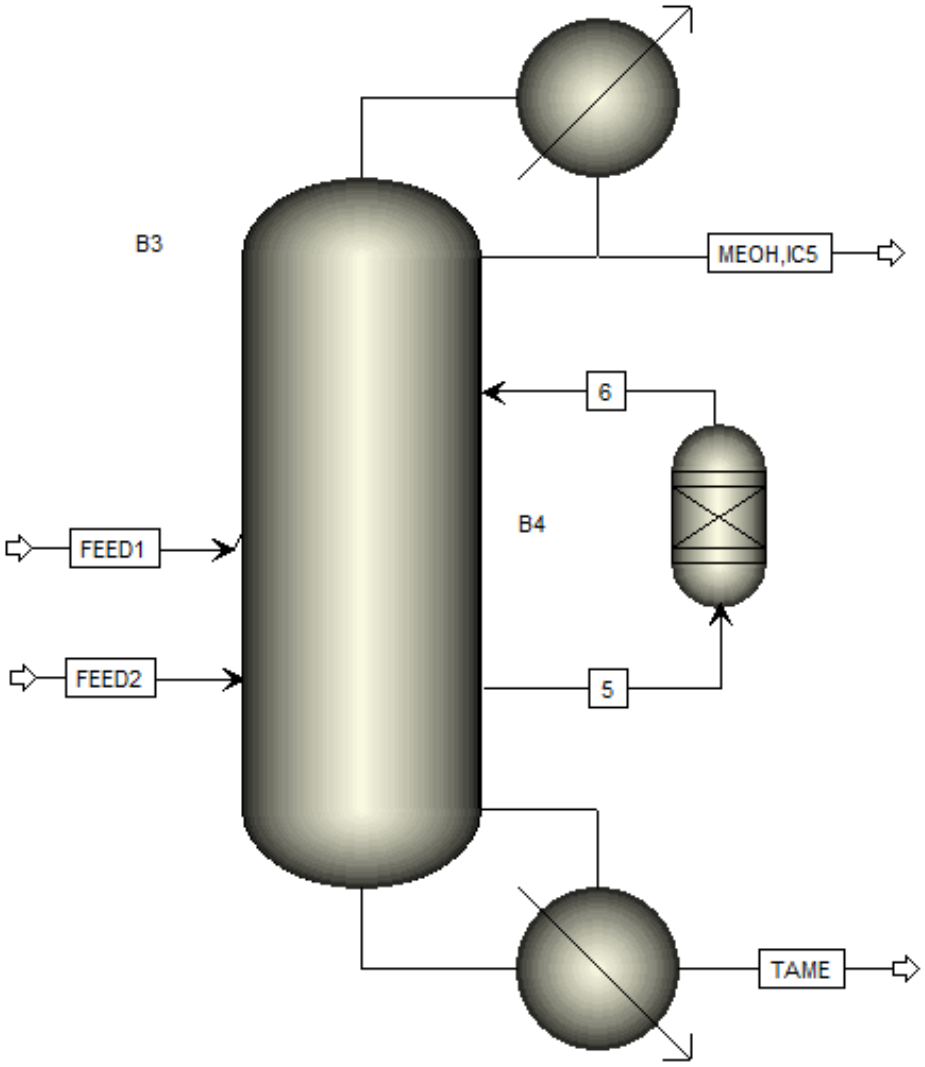
<u>Nota:</u> Los símbolos de las variables se muestra en la nomenclatura que viene al final del trabajo.

Columna de Destilación con un Reactor Lateral para Producir TAME

Para el diseño de la columna con reactor lateral (SR) se consideran el mismo número de platos (35 platos) pero una presión de 4.5 Bar en todo el proceso, a diferencia de la destilación reactiva (DR) que era de 4 Bar. Se consideran también las mismas composiciones de alimentación para observar en los resultados cuál de los dos procesos produce una mayor cantidad de TAME.

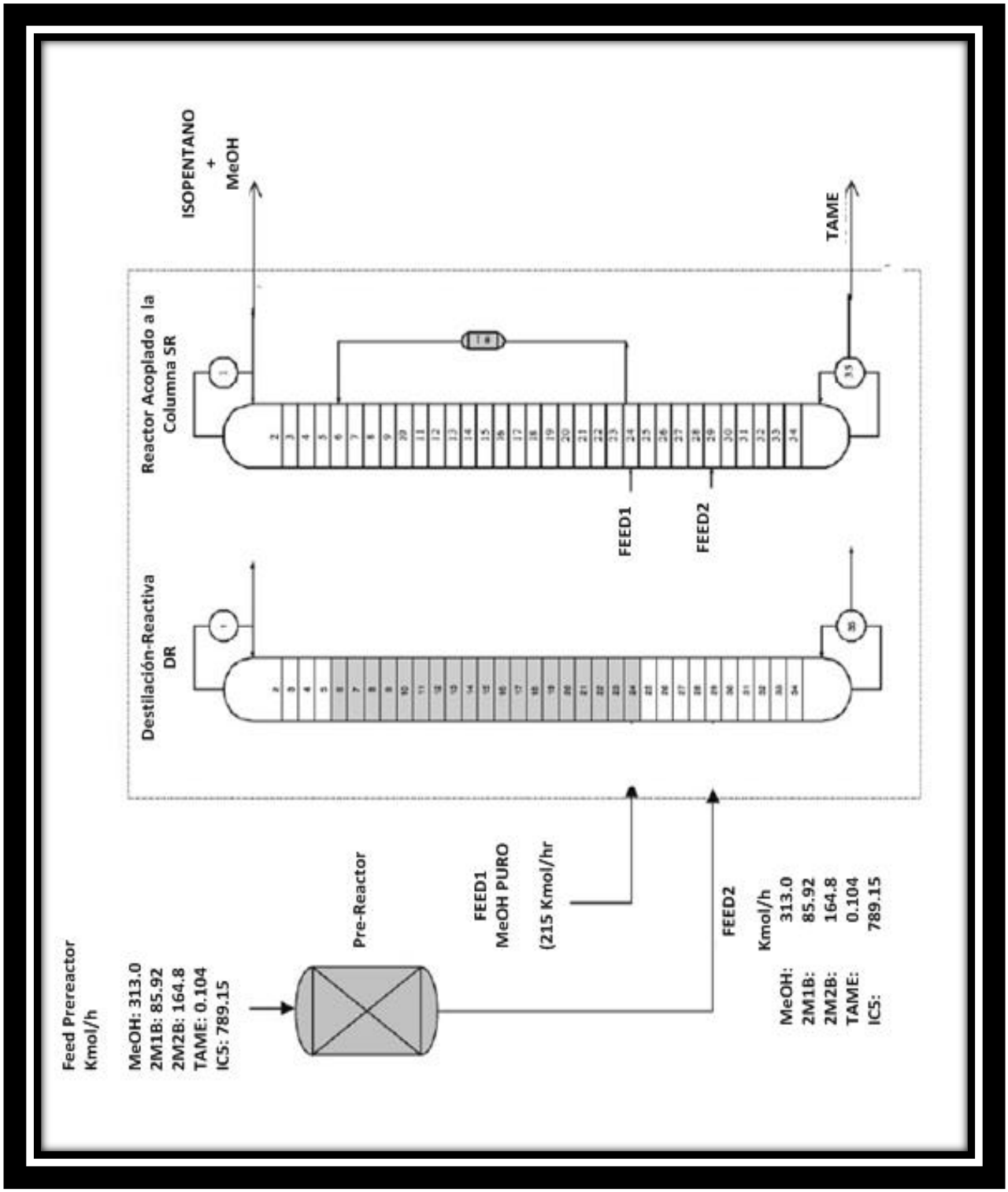
En el SR se hará con el mismo modelo cinético que el RD para la simulación del proceso, por lo que involucra las mismas ecuaciones de balance de materia y energía.

Diagrama Modelo SR Columna de Destilación con Reactor Lateral



Cabe señalar que para la simulación de los dos procesos, las únicas variables que se manipularon en la columna son el reflujo del destilador y el flujo de destilado, y en el reactor solamente la longitud y no la masa del catalizador, para evitar sistemas multiestados.

DIFERENCIA ENTRE LA DESTILACIÓN REACTIVA Y EL REACTOR SIMPRE ACOPLADO ALA COLUMNA



10. Resultados

Se obtuvieron diagramas ternarios y residuales en diferentes presiones para adquirir datos más precisos del sistema que nos facilitaría el predecir y manipular algunas variables como reflujos en las etapas del proceso de destilación reactiva. Los diagramas ternarios y residuales se hicieron a partir de los siguientes datos obtenidos del simulador.

A UNA PRESION DE 4 BAR

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M1B/TAME									
Etapa	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M1B	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M1B	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M1B	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,7309	0,2691	0,0000	0,1909	0,8091	0,0000	0,3187	0,6813	0,0000
2	0,7203	0,2754	0,0044	0,1992	0,7939	0,0069	0,3198	0,6789	0,0013
3	0,7093	0,2819	0,0088	0,2080	0,7784	0,0137	0,3210	0,6765	0,0025
4	0,6977	0,2889	0,0134	0,2173	0,7623	0,0204	0,3221	0,6741	0,0038
5	0,6856	0,2964	0,0180	0,2272	0,7458	0,0270	0,3233	0,6717	0,0050
6	0,6728	0,3044	0,0228	0,2379	0,7287	0,0334	0,3244	0,6693	0,0063
7	0,6591	0,3131	0,0277	0,2494	0,7108	0,0398	0,3256	0,6670	0,0075
8	0,6445	0,3227	0,0328	0,2620	0,6921	0,0459	0,3267	0,6646	0,0087
9	0,6287	0,3332	0,0380	0,2758	0,6723	0,0519	0,3279	0,6622	0,0099
10	0,6114	0,3451	0,0435	0,2912	0,6511	0,0577	0,3290	0,6599	0,0111

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMP MEOH/2M1B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M1B	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,3186905	0,6813095	0	346,6594
2	0,8443365	0	0,1556635	375,9923

A UNA PRESION DE 4 BAR

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M2B/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M2B	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M2B	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M2B	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,7262	0,2738	0,0000	0,1778	0,8222	0,0000	0,2619	0,7381	0,0000
2	0,7103	0,2831	0,0066	0,1899	0,7997	0,0104	0,2637	0,7347	0,0016
3	0,6934	0,2931	0,0135	0,2031	0,7763	0,0206	0,2655	0,7313	0,0033
4	0,6752	0,3042	0,0206	0,2176	0,7518	0,0306	0,2673	0,7279	0,0049
5	0,6555	0,3165	0,0279	0,2337	0,7259	0,0403	0,2691	0,7245	0,0065
6	0,6338	0,3305	0,0356	0,2520	0,6983	0,0497	0,2709	0,7211	0,0080
7	0,6094	0,3469	0,0437	0,2731	0,6682	0,0586	0,2728	0,7176	0,0096
8	0,5808	0,3668	0,0524	0,2984	0,6345	0,0670	0,2746	0,7142	0,0111
9	0,5450	0,3932	0,0619	0,3311	0,5943	0,0746	0,2765	0,7108	0,0127
10	-999,00	-999,00	-999,00	-999,00	-999,00	-999,00	0,2782	0,7076	0,0141

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMP MEOH/2M2B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M2B	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,261872	0,738128	0	341,4345
2	0,8443365	0	0,1556635	375,9923

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/IC5/TAME									
NO.	**MOLEFRAC LIQUID1 MEOH**	**MOLEFRAC LIQUID1 IC5**	**MOLEFRAC LIQUID1 TAME**	**MOLEFRAC LIQUID2 MEOH**	**MOLEFRAC LIQUID2 IC5**	**MOLEFRAC LIQUID2 TAME**	**MOLEFRAC VAPOR MEOH**	**MOLEFRAC VAPOR IC5**	**MOLEFRAC VAPOR TAME**
1	0,8088	0,1912	0,0000	0,1592	0,8408	0,0000	0,2501	0,7499	0,0000
2	0,7930	0,1992	0,0078	0,1707	0,8160	0,0132	0,2523	0,7456	0,0021
3	0,7762	0,2080	0,0158	0,1833	0,7904	0,0262	0,2545	0,7413	0,0042
4	0,7585	0,2175	0,0240	0,1971	0,7639	0,0390	0,2568	0,7370	0,0063
5	0,7394	0,2280	0,0326	0,2123	0,7363	0,0514	0,2590	0,7327	0,0083
6	0,7189	0,2396	0,0415	0,2291	0,7074	0,0635	0,2613	0,7284	0,0103
7	0,6963	0,2528	0,0509	0,2481	0,6768	0,0751	0,2635	0,7242	0,0123
8	0,6712	0,2680	0,0608	0,2698	0,6440	0,0862	0,2658	0,7199	0,0142
9	0,6423	0,2863	0,0714	0,2953	0,6080	0,0966	0,2681	0,7157	0,0162
10	0,6075	0,3096	0,0829	0,3270	0,5670	0,1060	0,2705	0,7115	0,0181

A UNA PRESION DE 4 BAR

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMP MEOH/IC5/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC IC5	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,2501065	0,7498935	0	339,2521
2	0,8443365	0	0,1556635	375,9923

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M1B/2M2B									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M1B	MOLEFRAC LIQUID1 2M2B	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M1B	MOLEFRAC LIQUID2 2M2B	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M1B	MOLEFRAC VAPOR 2M2B
1	0,7262	0,0000	0,2738	0,1778	0,0000	0,8222	0,2619	0,0000	0,7381
2	0,7265	0,0297	0,2438	0,1793	0,0902	0,7306	0,2674	0,0673	0,6654
3	0,7269	0,0594	0,2137	0,1808	0,1803	0,6390	0,2731	0,1364	0,5905
4	0,7273	0,0892	0,1835	0,1823	0,2703	0,5474	0,2790	0,2076	0,5135
5	0,7278	0,1191	0,1531	0,1837	0,3603	0,4560	0,2850	0,2808	0,4342
6	0,7283	0,1490	0,1227	0,1852	0,4502	0,3646	0,2913	0,3562	0,3525
7	0,7288	0,1790	0,0921	0,1866	0,5400	0,2733	0,2978	0,4338	0,2684
8	0,7295	0,2090	0,0615	0,1881	0,6298	0,1821	0,3045	0,5138	0,1817
9	0,7301	0,2391	0,0308	0,1895	0,7195	0,0910	0,3115	0,5963	0,0922
10	0,7309	0,2691	0,0000	0,1909	0,8091	0,0000	0,3187	0,6813	0,0000

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMPERATURA MEOH/2M1B/2M2B				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M1B	MOLEFRAC 2M2B	TEMP K
1	0,3186905	0,6813095	0	346,6594
2	0,261872	0	0,738128	341,4345

A UNA PRESION DE 2.5 ATM

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M1B/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M1B	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M1B	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M1B	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,7559	0,2441	0,0000	0,1550	0,8450	0,0000	0,2847	0,7153	0,0000
2	0,7398	0,2529	0,0073	0,1664	0,8216	0,0120	0,2866	0,7113	0,0021
3	0,7228	0,2623	0,0149	0,1789	0,7974	0,0238	0,2884	0,7074	0,0041
4	0,7047	0,2726	0,0227	0,1925	0,7722	0,0353	0,2903	0,7035	0,0062
5	0,6852	0,2840	0,0308	0,2077	0,7459	0,0465	0,2922	0,6997	0,0082
6	0,6641	0,2967	0,0392	0,2246	0,7181	0,0574	0,2940	0,6958	0,0102
7	0,6407	0,3112	0,0481	0,2438	0,6884	0,0678	0,2959	0,6919	0,0121
8	0,6143	0,3283	0,0574	0,2662	0,6561	0,0777	0,2978	0,6881	0,0141
9	0,5832	0,3492	0,0675	0,2933	0,6198	0,0869	0,2998	0,6843	0,0160
10	0,5437	0,3775	0,0788	0,3290	0,5761	0,0950	0,3017	0,6804	0,0179

AZEOTROPO MEOH/2M1B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M1B	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,2847581	0,7152419	0	332,0814
2	0,8259815	0	0,1740185	361,5722

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M2B/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M2B	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M2B	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M2B	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,7505	0,2495	0,0000	0,1435	0,8565	0,0000	0,2278	0,7722	0,0000
2	0,7344	0,2581	0,0075	0,1545	0,8333	0,0122	0,2297	0,7686	0,0018
3	0,7173	0,2675	0,0152	0,1665	0,8093	0,0242	0,2316	0,7649	0,0035
4	0,6992	0,2777	0,0231	0,1797	0,7843	0,0360	0,2335	0,7613	0,0052
5	0,6798	0,2889	0,0313	0,1943	0,7583	0,0474	0,2354	0,7577	0,0069
6	0,6587	0,3014	0,0399	0,2106	0,7308	0,0585	0,2373	0,7541	0,0086
7	0,6355	0,3156	0,0489	0,2291	0,7016	0,0693	0,2393	0,7504	0,0103
8	0,6095	0,3321	0,0584	0,2506	0,6699	0,0794	0,2412	0,7468	0,0120
9	0,5793	0,3522	0,0686	0,2765	0,6346	0,0889	0,2432	0,7432	0,0136
10	0,5416	0,3786	0,0798	0,3098	0,5929	0,0974	0,2452	0,7396	0,0153

A UNA PRESION DE 2.5 ATM

AZEOTROPO MEOH/2M2B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M2B	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,227785	0,772215	0	326,7427
2	0,8259815	0	0,1740185	361,5722

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/IC5/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 IC5	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 IC5	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR IC5	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,8265	0,1735	0,0000	0,1298	0,8702	0,0000	0,2137	0,7863	0,0000
2	0,8045	0,1839	0,0115	0,1442	0,8357	0,0200	0,2166	0,7804	0,0029
3	0,7810	0,1955	0,0235	0,1605	0,7999	0,0396	0,2197	0,7746	0,0058
4	0,7555	0,2084	0,0360	0,1789	0,7624	0,0587	0,2227	0,7687	0,0086
5	0,7276	0,2232	0,0493	0,2001	0,7228	0,0770	0,2258	0,7629	0,0113
6	0,6962	0,2405	0,0633	0,2249	0,6805	0,0946	0,2289	0,7571	0,0140
7	0,6601	0,2615	0,0785	0,2549	0,6342	0,1110	0,2321	0,7512	0,0167
8	0,6159	0,2888	0,0952	0,2931	0,5812	0,1257	0,2353	0,7454	0,0193
9	0,5543	0,3306	0,1151	0,3491	0,5136	0,1373	0,2385	0,7396	0,0219
10	-999	-999	-999	-999	-999	-999	0,2422	0,7331	0,0248

AZEOTROPO MEOH/IC5/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC IC5	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,2136706	0,7863294	0	324,3662
2	0,8259815	0	0,1740185	361,5722

A UNA PRESION DE 2.5 ATM

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO									
NUMBER	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC
	LIQUID1	LIQUID1	LIQUID1	LIQUID2	LIQUID2	LIQUID2	VAPOR	VAPOR	VAPOR
	MEOH	2M1B	2M2B	MEOH	2M1B	2M2B	MEOH	2M1B	2M2B
1	0,7505	0,0000	0,2495	0,1435	0,0000	0,8565	0,2278	0,0000	0,7722
2	0,7510	0,0270	0,2220	0,1447	0,0941	0,7612	0,2332	0,0694	0,6974
3	0,7514	0,0540	0,1946	0,1460	0,1881	0,6659	0,2388	0,1410	0,6202
4	0,7520	0,0811	0,1670	0,1473	0,2821	0,5706	0,2446	0,2149	0,5404
5	0,7525	0,1082	0,1393	0,1486	0,3760	0,4754	0,2507	0,2914	0,4579
6	0,7531	0,1353	0,1116	0,1499	0,4700	0,3802	0,2570	0,3704	0,3726
7	0,7537	0,1625	0,0838	0,1512	0,5638	0,2850	0,2635	0,4522	0,2843
8	0,7544	0,1897	0,0559	0,1525	0,6576	0,1899	0,2703	0,5368	0,1929
9	0,7551	0,2169	0,0280	0,1538	0,7513	0,0949	0,2774	0,6245	0,0982
10	0,7559	0,2441	0,0000	0,1550	0,8450	0,0000	0,2847	0,7153	0,0000

AZEOTROPO MEOH/2M1B/2M2B				
NUMBER	MOLEFRAC	MOLEFRAC	MOLEFRAC	TEMPERATURA (K)
	MEOH	2M1B	2M2B	
1	0,2847581	0,7152419	0	332,0814
2	0,227785	0	0,772215	326,7427

A UNA PRESION DE 1 ATM

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M1B/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M1B	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M1B	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M1B	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,7909	0,2091	0,0000	0,1050	0,8950	0,0000	0,2212	0,7788	0,0000
2	0,7701	0,2191	0,0108	0,1169	0,8647	0,0184	0,2236	0,7735	0,0029
3	0,7480	0,2300	0,0219	0,1302	0,8333	0,0365	0,2260	0,7683	0,0056
4	0,7245	0,2420	0,0335	0,1451	0,8007	0,0542	0,2285	0,7631	0,0084
5	0,6990	0,2553	0,0457	0,1621	0,7666	0,0713	0,2309	0,7580	0,0111
6	0,6712	0,2704	0,0584	0,1817	0,7305	0,0878	0,2334	0,7529	0,0138
7	0,6400	0,2880	0,0720	0,2047	0,6918	0,1035	0,2359	0,7477	0,0164
8	0,6041	0,3094	0,0866	0,2327	0,6492	0,1181	0,2384	0,7426	0,0190
9	0,5601	0,3372	0,1027	0,2689	0,6000	0,1311	0,2410	0,7375	0,0215
10	0,4974	0,3807	0,1219	0,3240	0,5350	0,1410	0,2436	0,7323	0,0241

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMPERATURA MEOH/2M1B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M1B	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,2212271	0,7787729	0	306,0666
2	0,7854714	0	0,2145286	335,9738

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M2B/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M2B	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M2B	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M2B	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,7846	0,2154	0,0000	0,0959	0,9041	0,0000	0,1676	0,8324	0,0000
2	0,7636	0,2254	0,0110	0,1073	0,8740	0,0187	0,1699	0,8278	0,0023
3	0,7413	0,2363	0,0223	0,1200	0,8429	0,0370	0,1722	0,8233	0,0045
4	0,7176	0,2482	0,0341	0,1344	0,8107	0,0549	0,1745	0,8188	0,0067
5	0,6921	0,2614	0,0465	0,1507	0,7770	0,0723	0,1768	0,8143	0,0089
6	0,6643	0,2764	0,0594	0,1695	0,7414	0,0891	0,1791	0,8098	0,0111
7	0,6332	0,2937	0,0731	0,1916	0,7033	0,1051	0,1815	0,8052	0,0132
8	0,5977	0,3145	0,0878	0,2184	0,6615	0,1200	0,1839	0,8007	0,0154
9	0,2528	0,6137	0,1335	0,5548	0,3412	0,1040	0,1864	0,7961	0,0175
10	0,3035	0,5524	0,1441	0,4957	0,3813	0,1230	0,1888	0,7916	0,0196

A UNA PRESIÓN DE 1 ATM

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMPERATURA MEOH/2M1B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M2B	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,1676303	0,8323697	0	300,6146
2	0,7854714	0	0,2145286	335,9738

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/IC5/TAME									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 IC5	MOLEFRAC LIQUID1 TAME	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 IC5	MOLEFRAC LIQUID2 TAME	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR IC5	MOLEFRAC VAPOR TAME
1	0,8524	0,1476	0,0000	0,0877	0,9123	0,0000	0,1506	0,8494	0,0000
2	0,8313	0,1565	0,0123	0,0985	0,8796	0,0218	0,1531	0,8443	0,0026
3	0,8090	0,1661	0,0249	0,1107	0,8460	0,0433	0,1556	0,8393	0,0052
4	0,7854	0,1767	0,0380	0,1245	0,8112	0,0643	0,1581	0,8342	0,0077
5	0,7601	0,1883	0,0516	0,1400	0,7752	0,0848	0,1607	0,8292	0,0101
6	0,7328	0,2014	0,0658	0,1579	0,7375	0,1047	0,1633	0,8242	0,0126
7	0,7028	0,2163	0,0808	0,1786	0,6977	0,1237	0,1659	0,8192	0,0149
8	0,6693	0,2338	0,0969	0,2031	0,6552	0,1417	0,1686	0,8141	0,0173
9	0,6304	0,2553	0,1143	0,2332	0,6085	0,1583	0,1713	0,8091	0,0196
10	0,5825	0,2837	0,1339	0,2725	0,5548	0,1727	0,1740	0,8040	0,0219

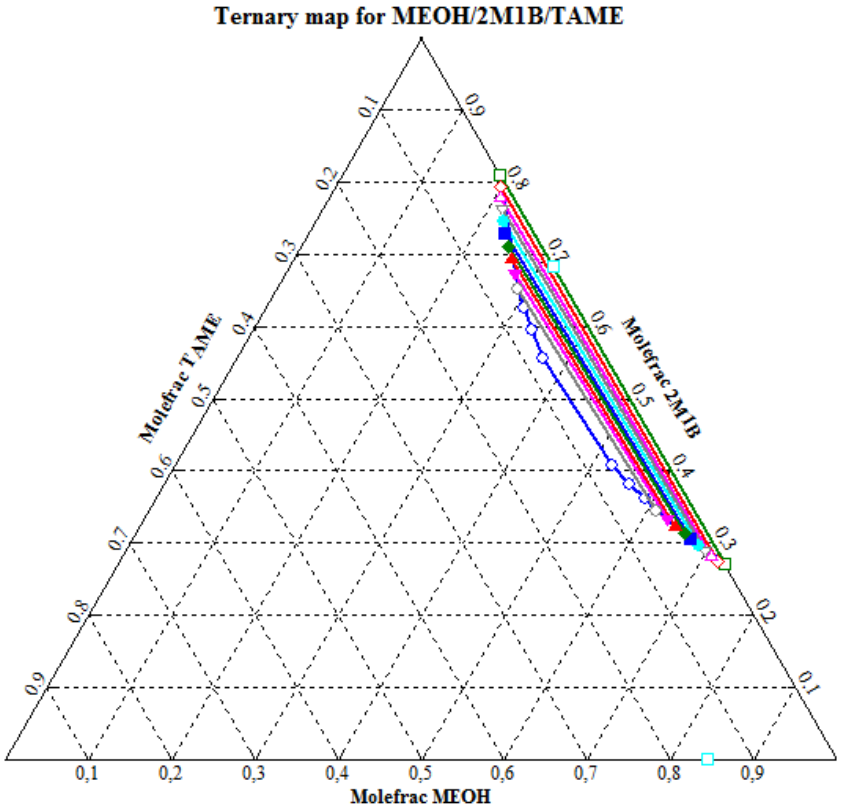
AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMPERATURA MEOH/2M1B/TAME				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC IC5	MOLEFRAC TAME	TEMP K
1	0,150581	0,849419	0	297,8454
2	0,7854714	0	0,2145286	335,9738

A UNA PRESIÓN DE 1 ATM

COMPOSICIÓN DE EQUILIBRIO MEOH/2M1B/2M2B									
NUMBER	MOLEFRAC LIQUID1 MEOH	MOLEFRAC LIQUID1 2M1B	MOLEFRAC LIQUID1 2M2B	MOLEFRAC LIQUID2 MEOH	MOLEFRAC LIQUID2 2M1B	MOLEFRAC LIQUID2 2M2B	MOLEFRAC VAPOR MEOH	MOLEFRAC VAPOR 2M1B	MOLEFRAC VAPOR 2M2B
1	0,7846	0,0000	0,2154	0,0959	0,0000	0,9041	0,1676	0,0000	0,8324
2	0,7851	0,0232	0,1916	0,0969	0,0995	0,8036	0,1725	0,0728	0,7546
3	0,7858	0,0464	0,1678	0,0979	0,1990	0,7031	0,1776	0,1486	0,6738
4	0,7864	0,0697	0,1439	0,0989	0,2985	0,6026	0,1830	0,2275	0,5895
5	0,7871	0,0929	0,1200	0,0999	0,3980	0,5021	0,1886	0,3098	0,5017
6	0,7878	0,1161	0,0961	0,1009	0,4975	0,4016	0,1945	0,3955	0,4100
7	0,7885	0,1394	0,0721	0,1019	0,5969	0,3012	0,2007	0,4851	0,3143
8	0,7892	0,1626	0,0481	0,1029	0,6964	0,2007	0,2072	0,5786	0,2143
9	0,7900	0,1859	0,0241	0,1039	0,7957	0,1003	0,2140	0,6764	0,1096
10	0,7909	0,2091	0,0000	0,1050	0,8950	0,0000	0,2212	0,7788	0,0000

AZEÓTROPO COMPOSICIÓN Y TEMPERATURA MEOH/2M1B/2M2B				
NUMBER	MOLEFRAC MEOH	MOLEFRAC 2M1B	MOLEFRAC 2M2B	TEMPERATURA K
1	0,2212271	0,7787729	0	306,0666
2	0,1676303	0	0,8323697	300,6146

DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M1B/TAME A 4 BAR



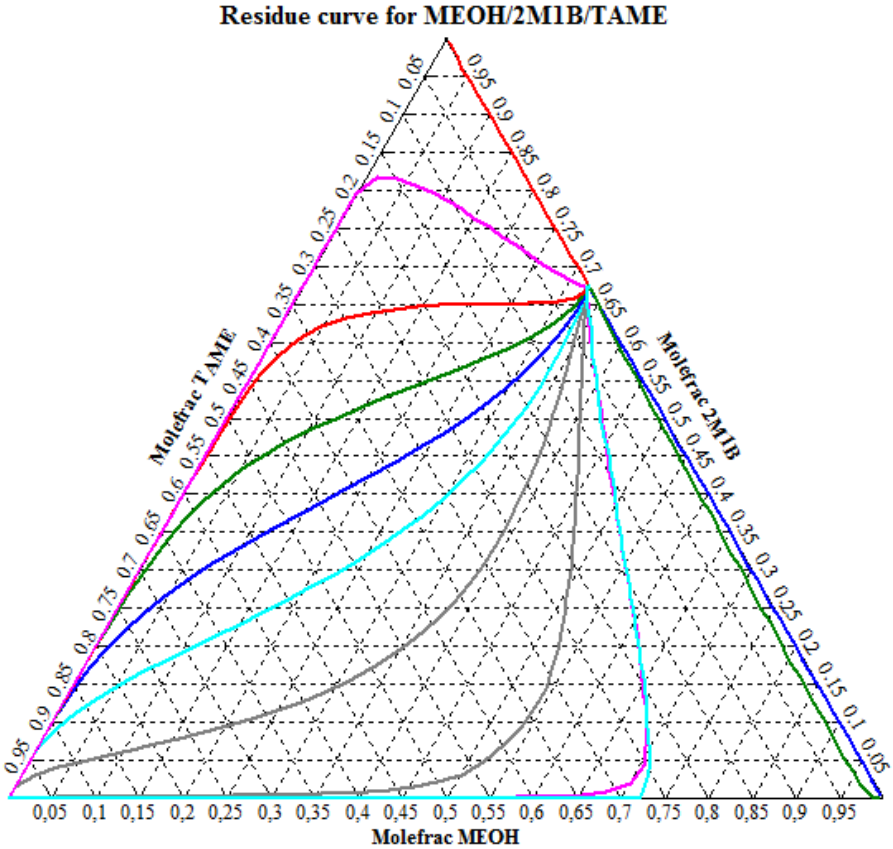
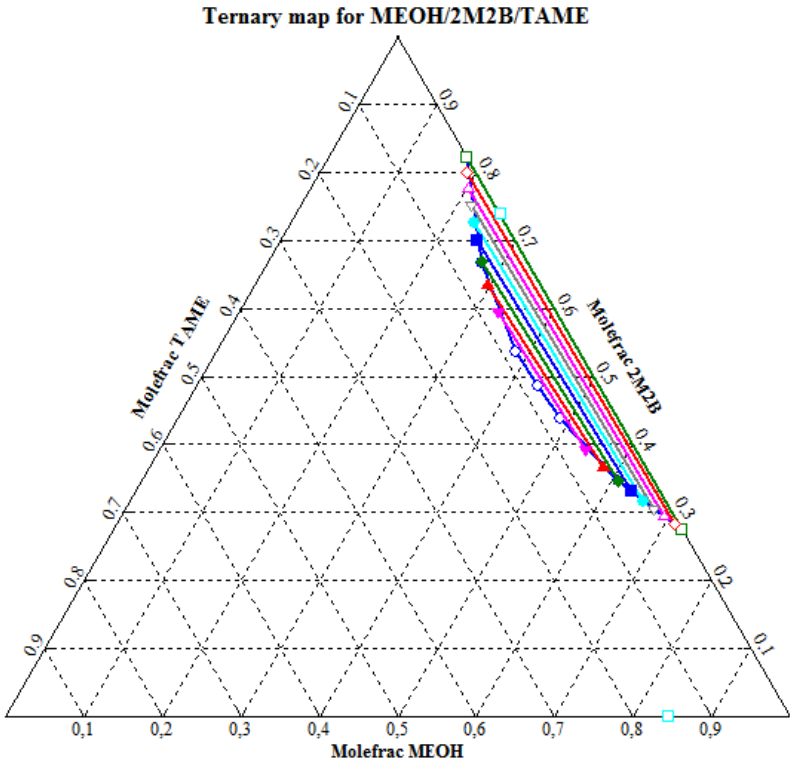


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M2B/TAME A 4 BAR



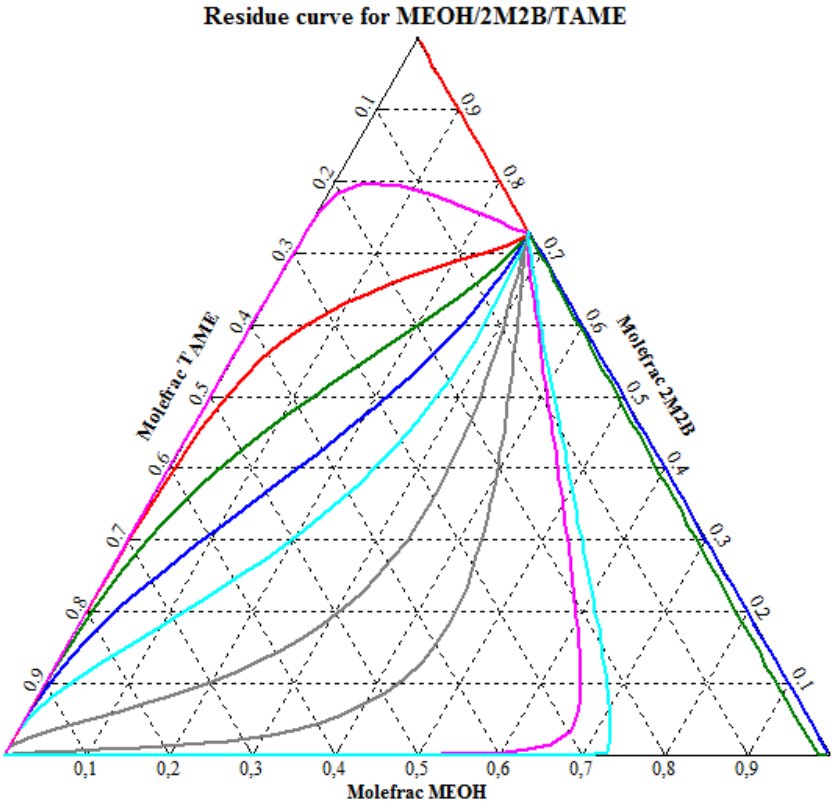
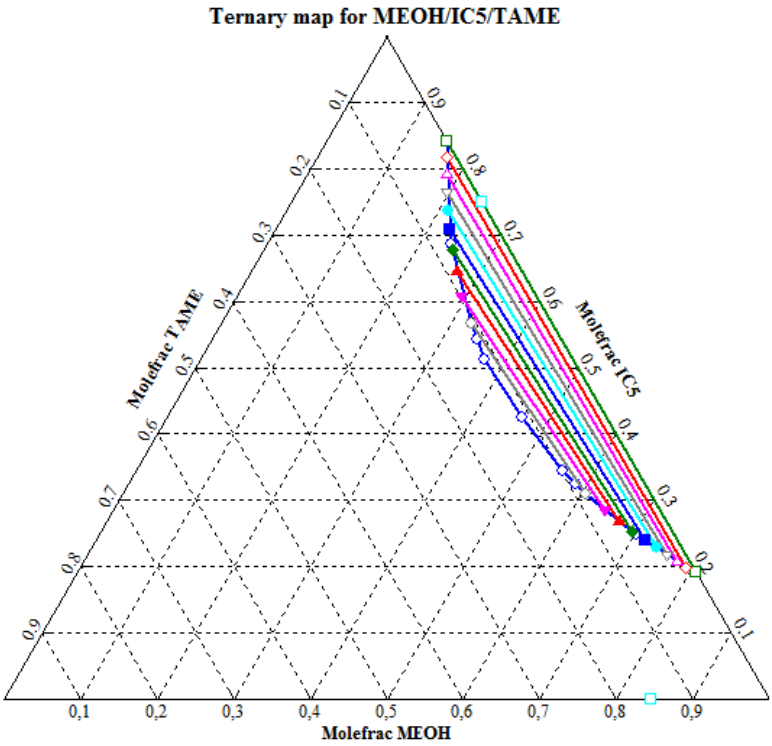


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/IC5/TAME A 4 BAR



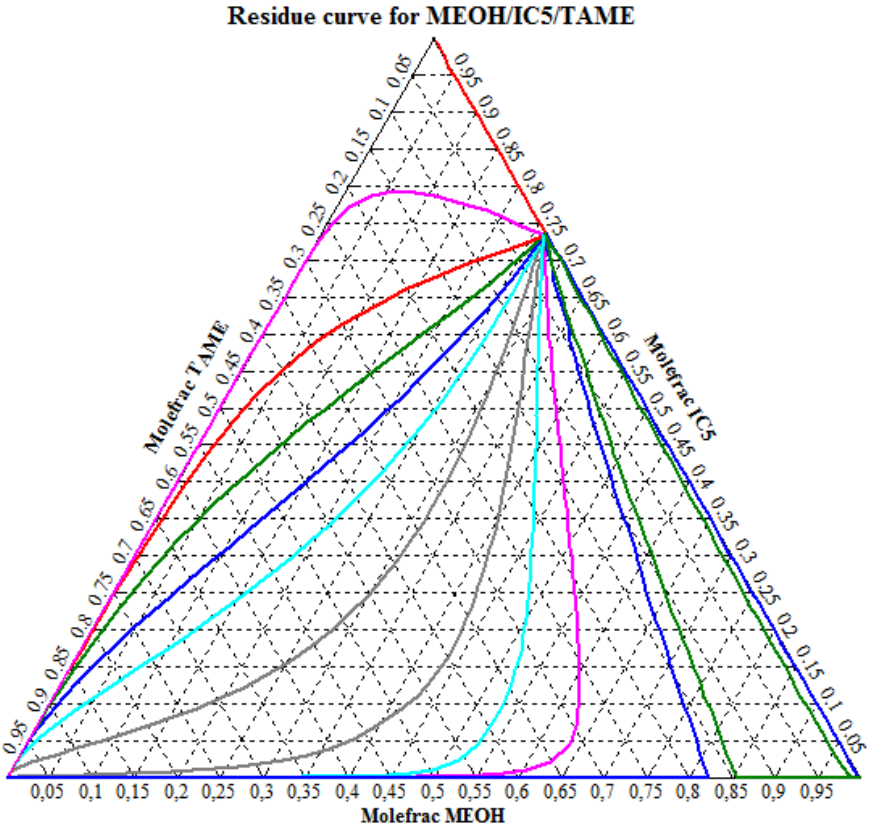
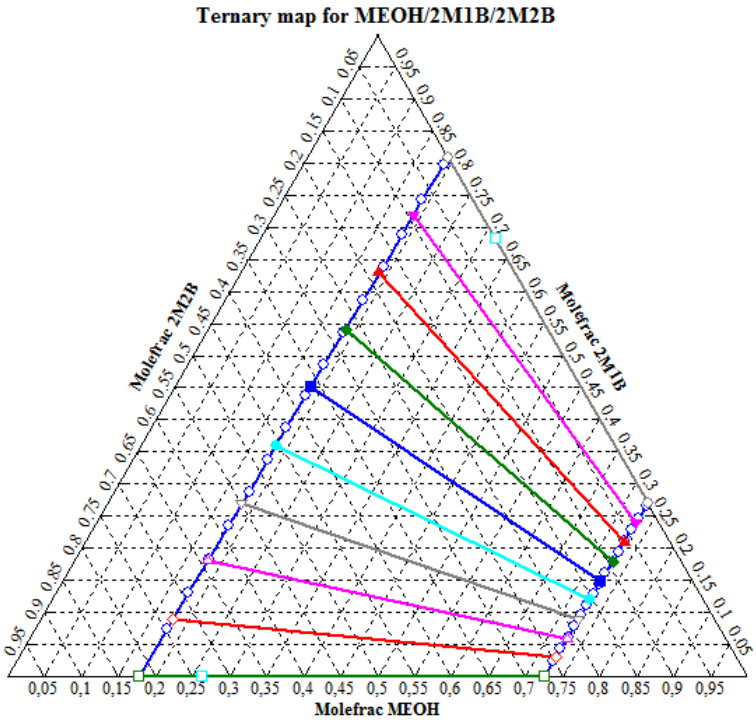


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M1B/2M2B A 4 BAR



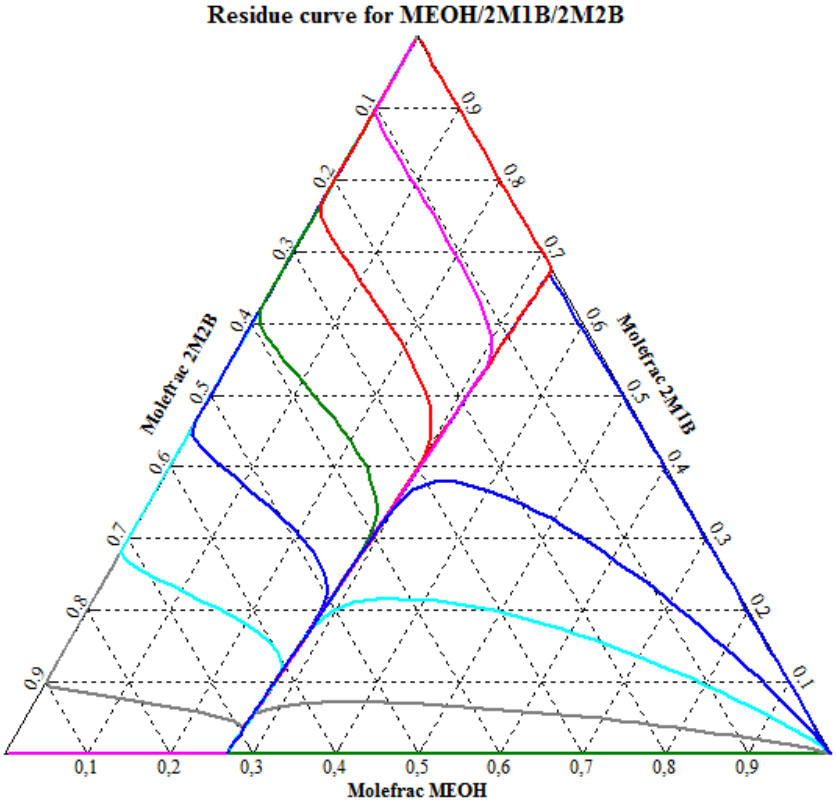
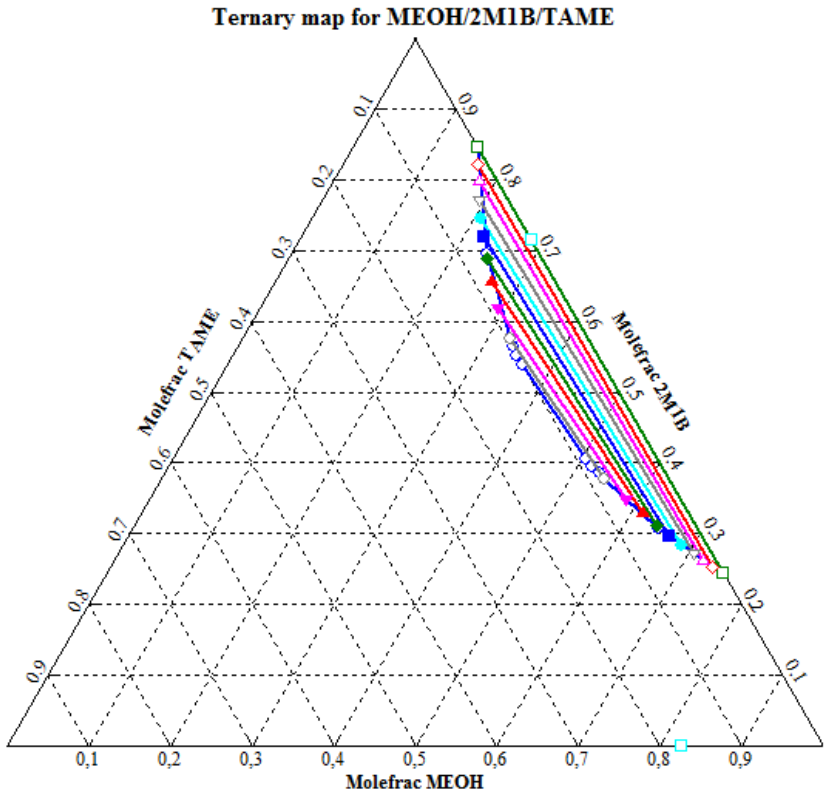


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M1B/TAME A 2.5 ATM



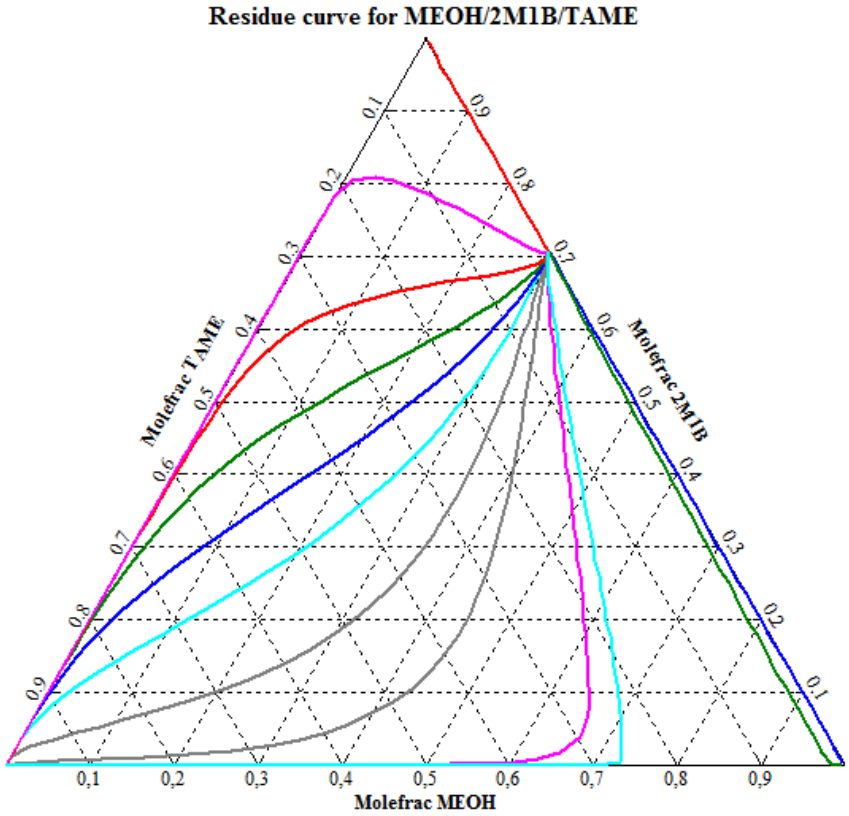
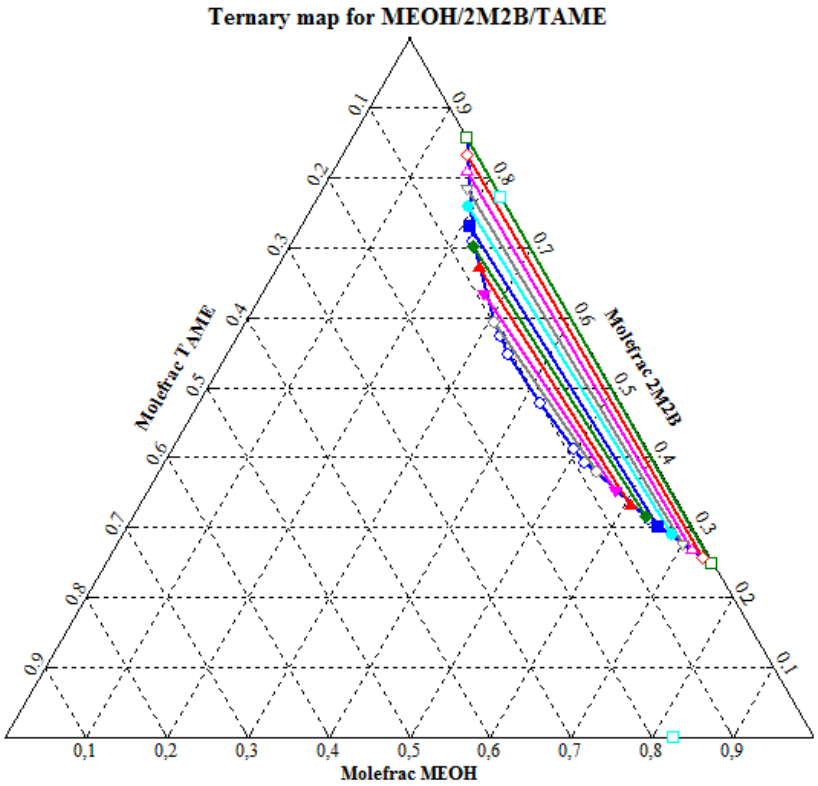


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M2B/TAME A 2.5 ATM



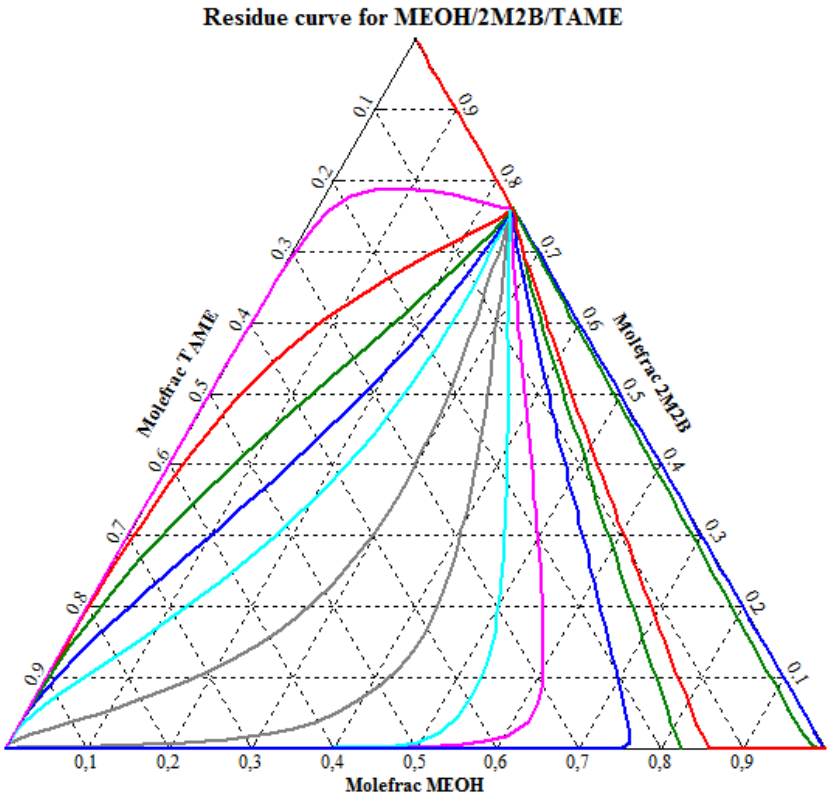
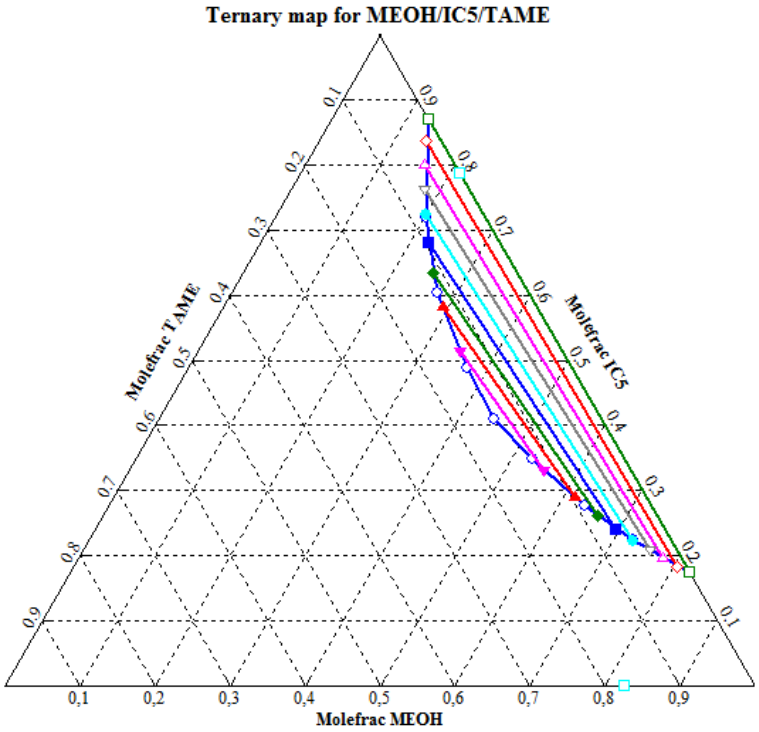


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/IC5/TAME A 2.5 ATM



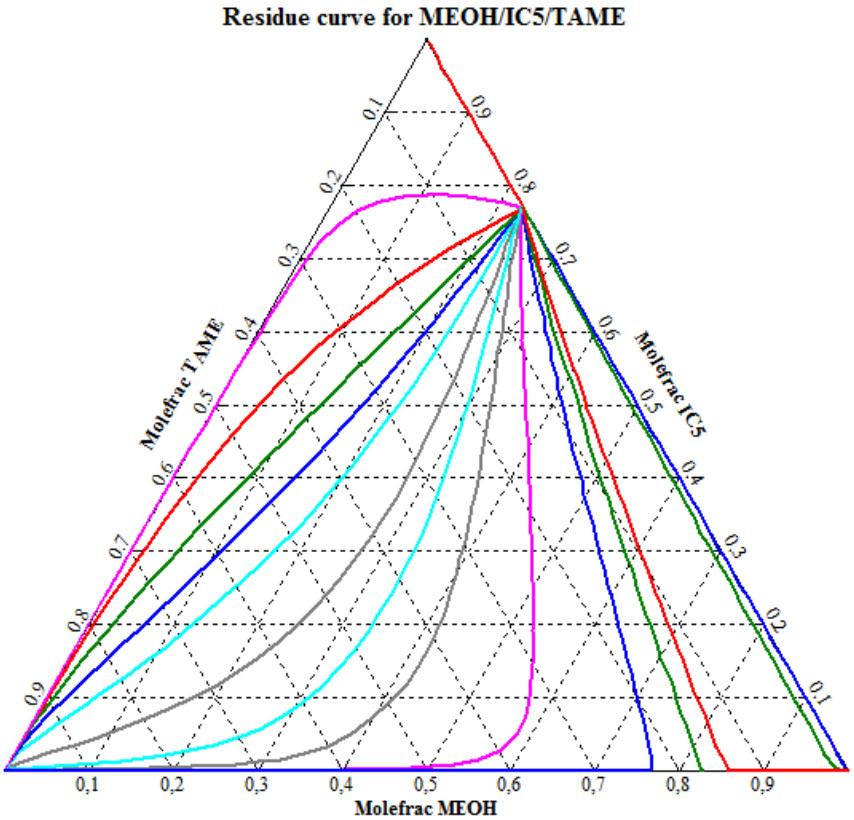
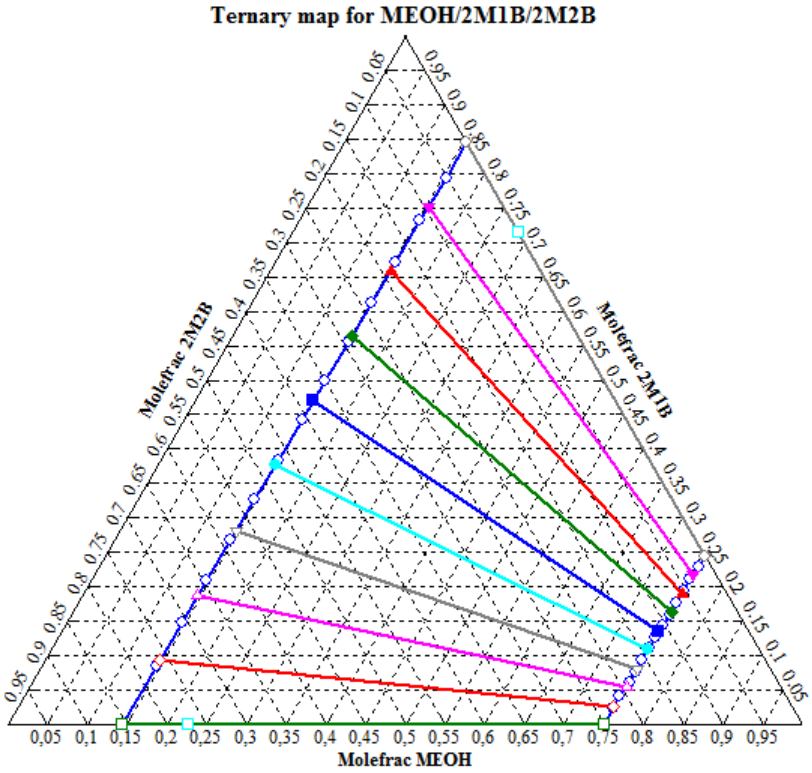


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M1B/2M2B A 2.5 ATM



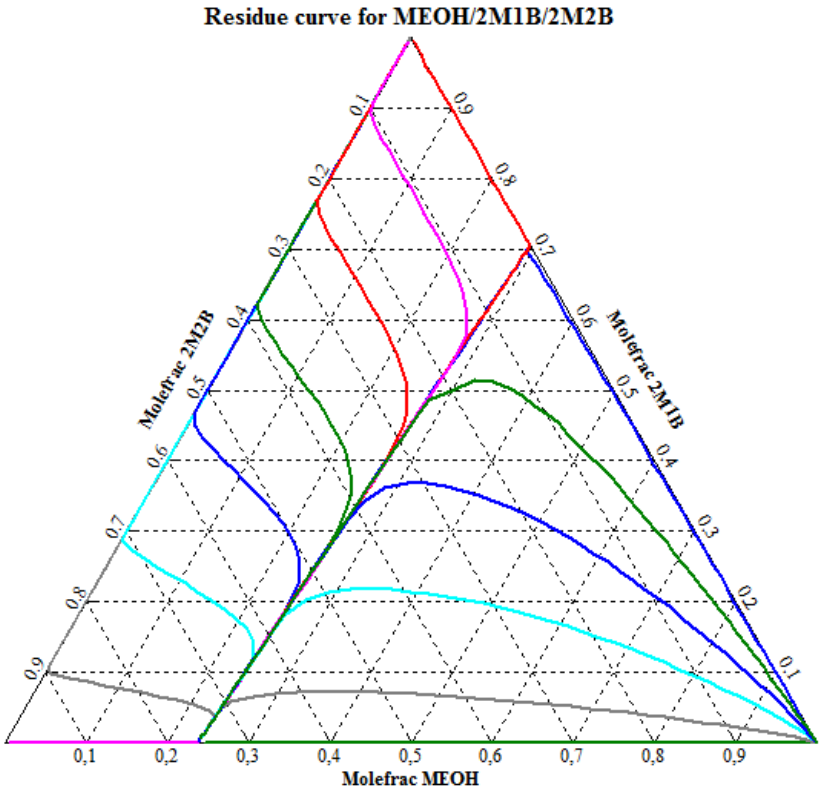
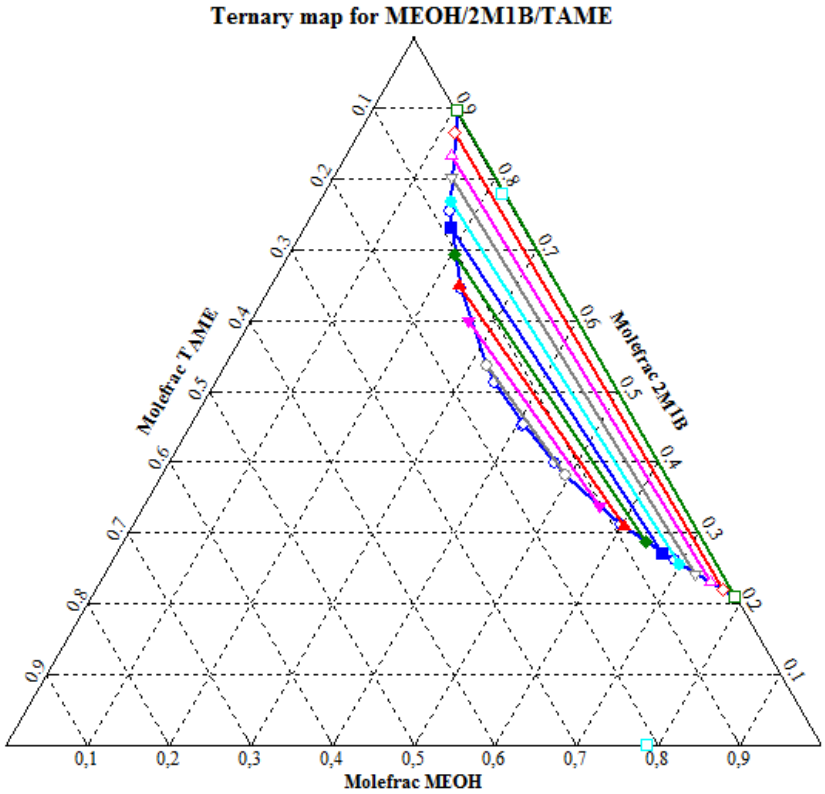


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M1B/TAME A 1 ATM



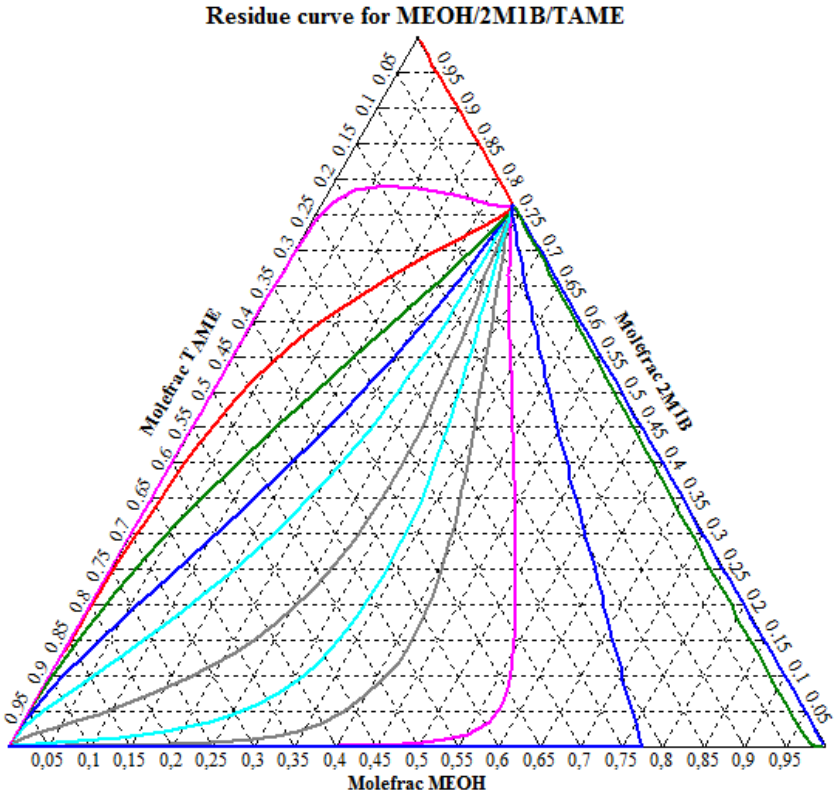
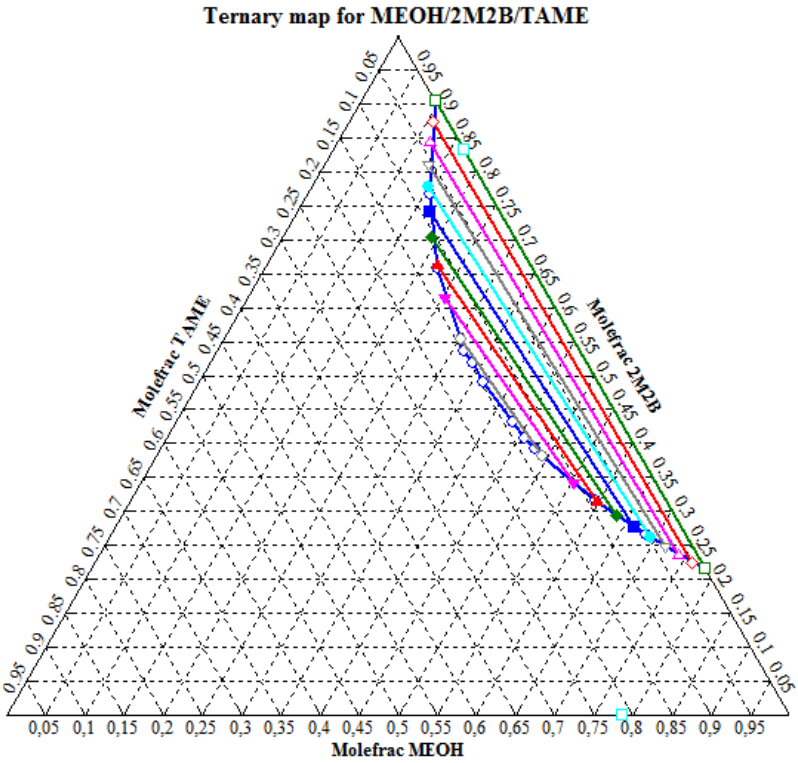


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M2B/TAME A 1 ATM



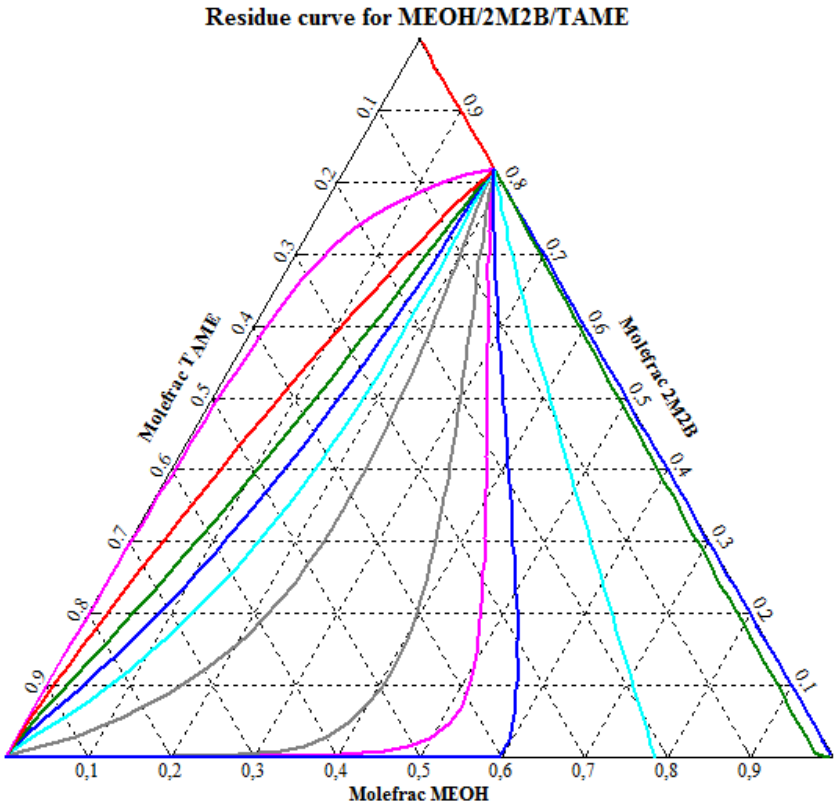
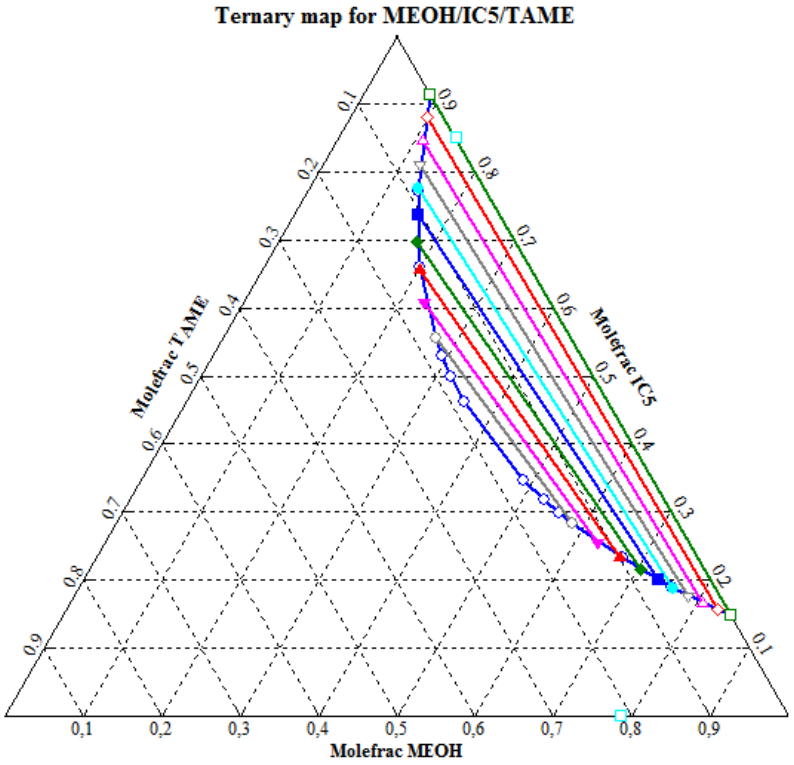


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/IC5/TAME A 1 ATM



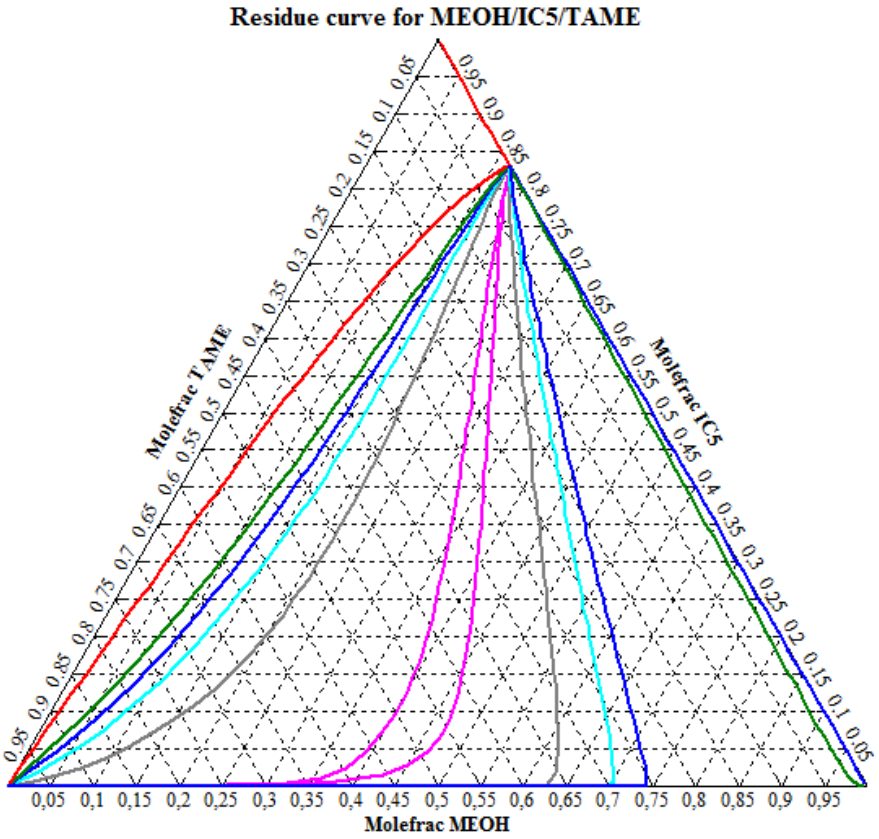
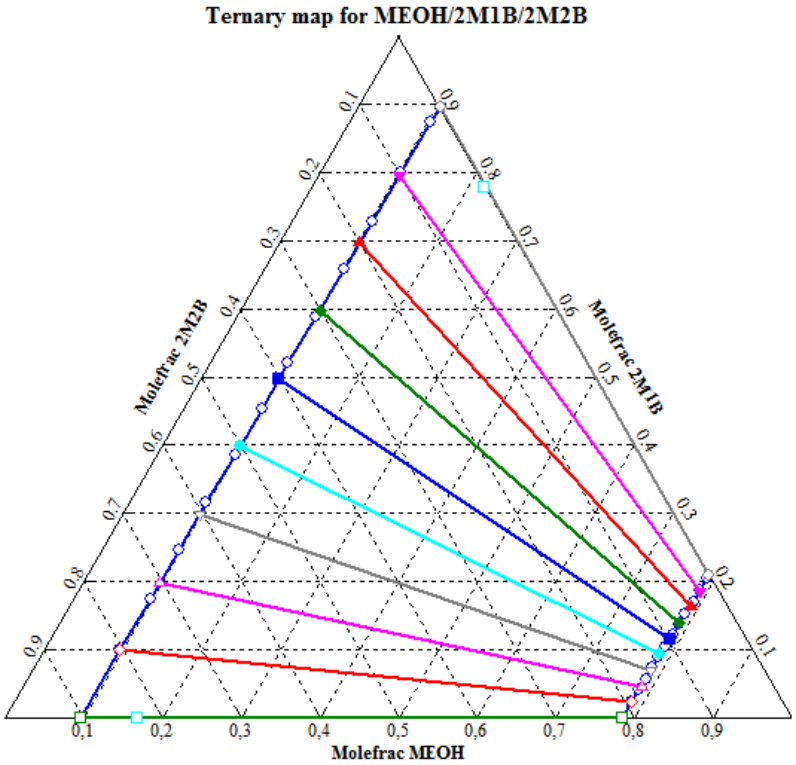


DIAGRAMA TERNARIO Y RESIDUAL MEOH/2M2B/TAME A 1 ATM



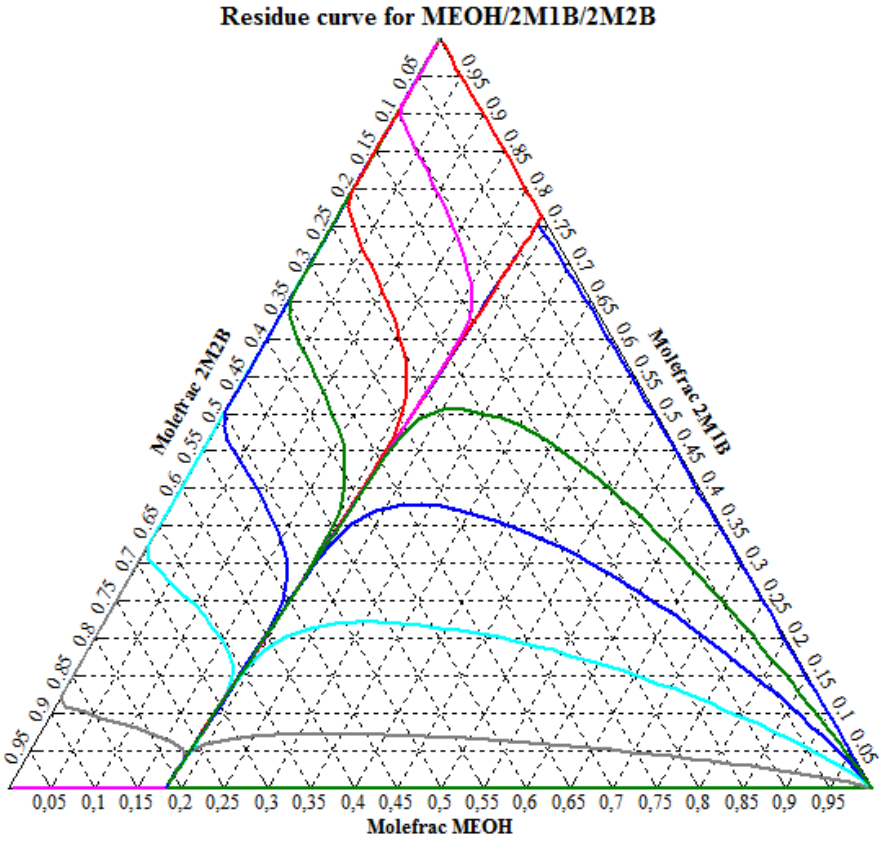
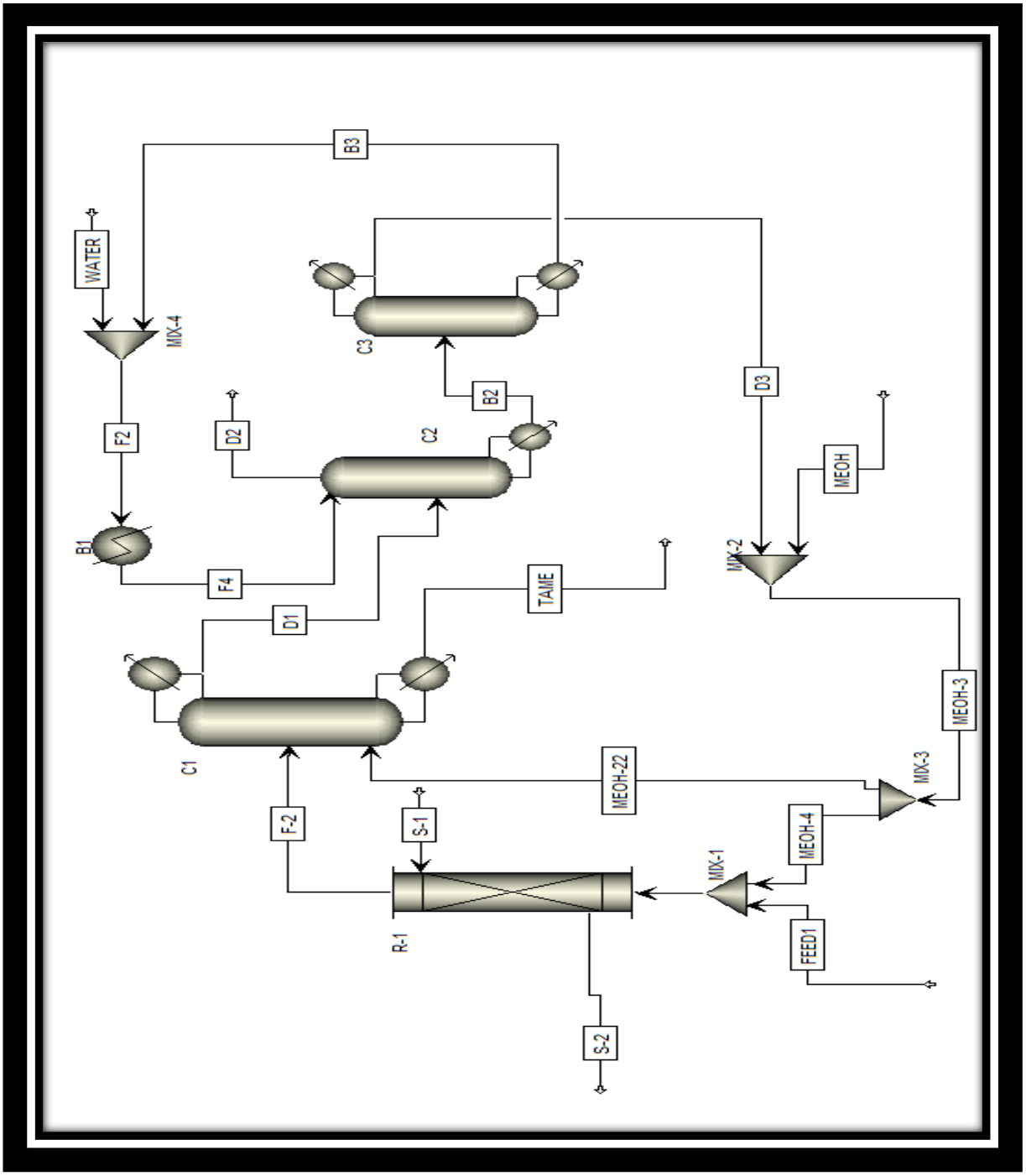


DIAGRAMA FLUJO DE PROCESO DESTILACIÓN-REACTIVA PARA LA PRODUCCIÓN TER AMIL METIL ÉTER (TAME).

El proceso lo constituye un pre-reactor seguido del destilador-reactivo donde se producirá TAME en donde luego se llevará a cabo la separación de metanol por las diferentes columnas y su aprovechamiento nuevamente.

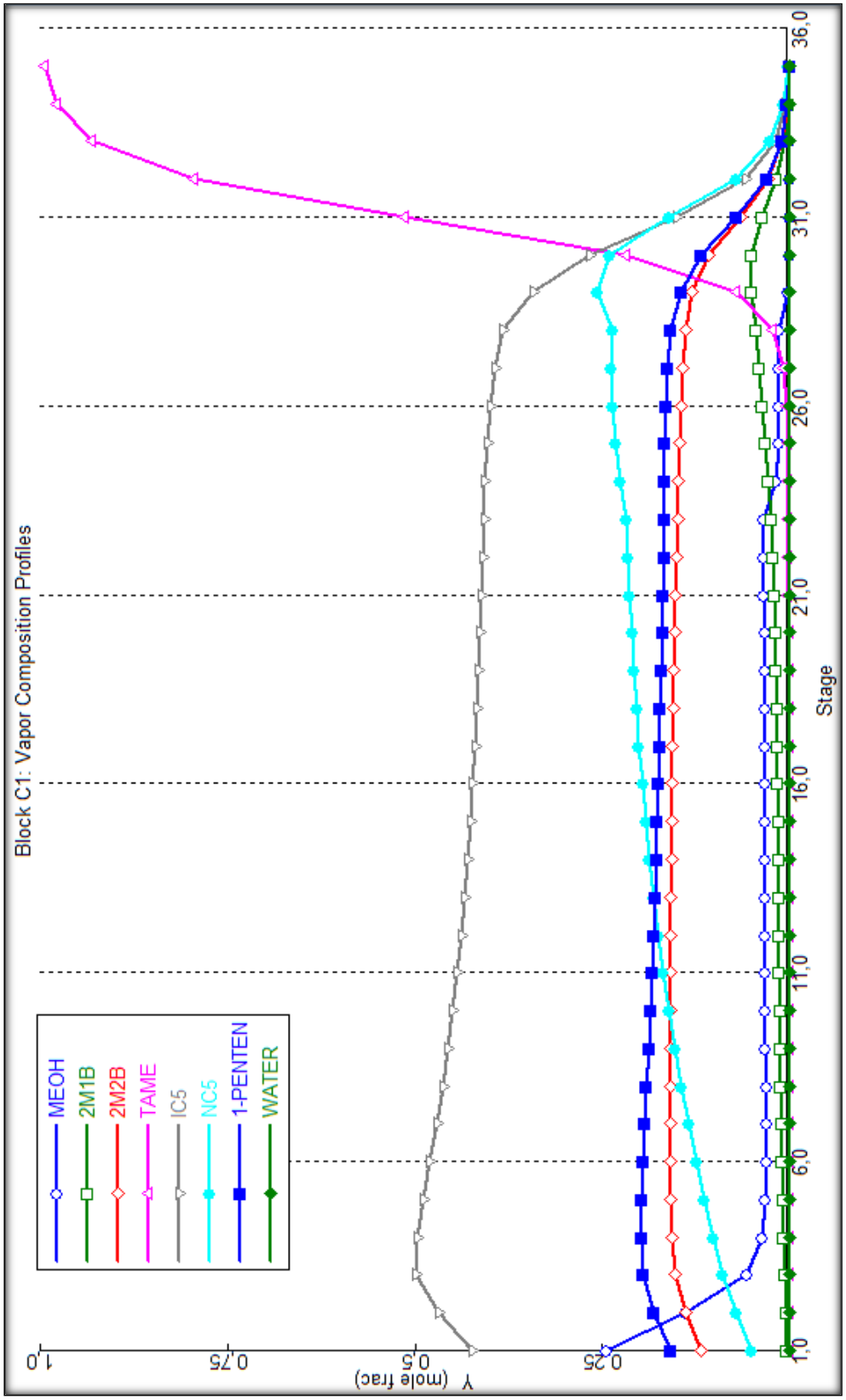


TABLAS DE RESULTADOS DEL PROCESO DESTILACIÓN REACTIVA

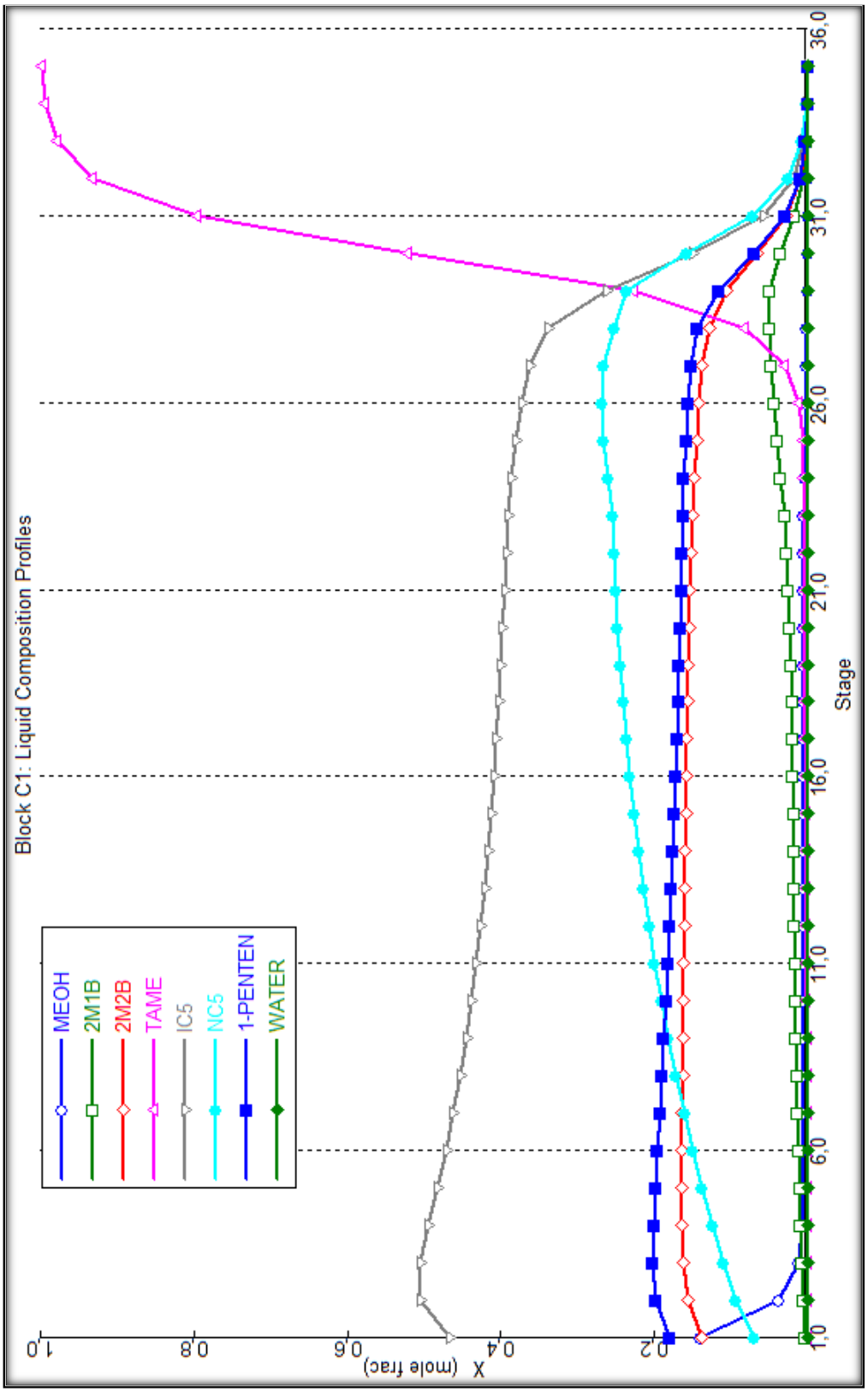
FLUJOS COLUMNA DE DESTILACIÓN-REACTIVA C-1				
Flujo Molar kmol/hr	Flujo o corriente			
	F-2	MEOH-22	D1	TAME
MEOH	92,5903764	121,211426	196,578737	2,07E-06
2M1B	25,5568069	0,2015985	6,38686275	0,02352399
2M2B	176,298833	15,7989852	194,1996	0,0231728
TAME	70,2387068	2,96E-13	0,00033912	87,4614314
IC5	592,059367	67,7854075	659,810375	0,03439974
NC5	94,8019764	4,76568851	99,4974574	0,07020755
1-PENTEN	231,209121	23,2323488	254,417477	0,02399284
WATER	0,00610585	0,00454525	0,01065111	3,94E-09
Fracción Mol				
MEOH	0,07218051	0,52022071	0,13932846	2,36E-08
2M1B	0,01992327	0,00086522	0,00452679	0,00026842
2M2B	0,13743698	0,0678068	0,13764221	0,00026441
TAME	0,05475586	1,27E-15	2,40E-07	0,99799971
IC5	0,4615507	0,2909245	0,46765162	0,00039252
NC5	0,07390461	0,02045359	0,07052048	0,00080112
1-PENTEN	0,18024329	0,09970965	0,18032264	0,00027377
WATER	4,76E-06	1,95E-05	7,55E-06	4,50E-11
Propiedades Fisicoquímicas				
Total Flow kmol/hr	1282,76129	233	1410,9015	87,6367305
Total Flow kg/hr	90073,6305	11870,1179	92994,7349	8949,01349
Total Flow l/min	2546,12835	291,29541	2608,10565	233,728511
Temperature K	346,045464	313,047258	340,221934	413,061505
Pressure atm	5,9215396	3,94769307	3,94769307	3,94769307
Vapor Frac	0	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1	1
Solid Frac	0	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-33580,089	-44374,837	-33101,642	-74385,029
Enthalpy cal/gm	-478,22252	-871,03911	-502,21291	-728,44462
Enthalpy cal/sec	-11965344	-2872038,1	-12973099	-1810794,6
Entropy cal/mol-K	-109,2444	-84,643696	-103,54492	-157,68429
Entropy cal/gm-K	-1,555777	-1,6614815	-1,5709672	-1,5441853
Density mol/cc	0,0083968	0,01333125	0,00901613	0,00624918
Density gm/cc	0,58961173	0,67915693	0,59426743	0,63813449
Average MW	70,2185441	50,9447119	65,9115714	102,114872
Liq Vol 60F l/min	2322,16247	292,204544	2416,08913	194,836694

PERFLIES GENERALES COLUMNA DE DESTILACIÓN-REACTIVA C-1					
Stage	Temperatura	Presión	Flujo de Calor	Flujo Líquido	Flujo Vapor
	K	atm	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr
1	340,222	3,948	-11138447,000	5643,606	0,000
2	343,685	3,948	0,000	5854,761	7054,507
3	346,788	3,948	0,000	5995,304	7265,663
4	347,717	3,948	0,000	6030,507	7406,206
5	347,991	3,948	0,000	6033,762	7441,408
6	348,135	3,948	0,000	6030,778	7444,663
7	348,256	3,948	0,000	6023,198	7441,680
8	348,357	3,948	0,000	6015,662	7435,257
9	348,449	3,948	0,000	6008,531	7428,865
10	348,532	3,948	0,000	6001,831	7422,863
11	348,608	3,948	0,000	5995,534	7417,275
12	348,678	3,948	0,000	5989,606	7412,070
13	348,741	3,948	0,000	5984,017	7407,213
14	348,800	3,948	0,000	5978,737	7402,673
15	348,853	3,948	0,000	5973,742	7398,420
16	348,903	3,948	0,000	5969,009	7394,429
17	348,949	3,948	0,000	5964,520	7390,679
18	348,993	3,948	0,000	5960,255	7387,151
19	349,035	3,948	0,000	5956,200	7383,829
20	349,076	3,948	0,000	5952,344	7380,700
21	349,118	3,948	0,000	5948,681	7377,757
22	349,161	3,948	0,000	5945,225	7374,998
23	349,208	3,948	0,000	6253,773	7372,442
24	349,927	3,948	0,000	6278,613	7448,897
25	350,180	3,948	0,000	6271,484	7473,738
26	350,469	3,948	0,000	6241,712	7466,609
27	351,119	3,948	0,000	6157,916	7436,837
28	352,880	3,948	0,000	7232,113	7353,040
29	358,784	3,948	0,000	6665,219	7144,476
30	372,376	3,948	0,000	6006,412	6577,583
31	391,780	3,948	0,000	5936,177	5918,775
32	405,156	3,948	0,000	6184,423	5848,540
33	410,668	3,948	0,000	6341,387	6096,786
34	412,495	3,948	0,000	6400,276	6253,750
35	413,062	3,948	11191935,100	87,637	6312,639

Stage	COMPOSICIÓN VAPOR C-1							
	MEOH	2M1B	2M2B	TAME	IC5	NC5	1-PENTEN	WATER
1	0,2441	0,0031	0,1178	0,0000	0,4241	0,0518	0,1591	0,0000
2	0,1393	0,0045	0,1376	0,0000	0,4677	0,0705	0,1803	0,0000
3	0,0580	0,0060	0,1529	0,0000	0,4983	0,0891	0,1957	0,0000
4	0,0362	0,0073	0,1578	0,0000	0,4977	0,1027	0,1982	0,0000
5	0,0321	0,0084	0,1592	0,0000	0,4890	0,1143	0,1970	0,0000
6	0,0314	0,0095	0,1595	0,0000	0,4797	0,1249	0,1949	0,0000
7	0,0313	0,0107	0,1594	0,0001	0,4711	0,1348	0,1927	0,0000
8	0,0314	0,0116	0,1592	0,0002	0,4632	0,1441	0,1904	0,0000
9	0,0316	0,0123	0,1590	0,0003	0,4560	0,1527	0,1882	0,0000
10	0,0318	0,0129	0,1588	0,0003	0,4496	0,1607	0,1860	0,0000
11	0,0320	0,0134	0,1585	0,0004	0,4438	0,1680	0,1838	0,0000
12	0,0322	0,0138	0,1583	0,0005	0,4387	0,1748	0,1818	0,0000
13	0,0323	0,0142	0,1579	0,0005	0,4340	0,1810	0,1799	0,0000
14	0,0325	0,0146	0,1576	0,0006	0,4299	0,1867	0,1781	0,0000
15	0,0327	0,0150	0,1571	0,0007	0,4262	0,1918	0,1764	0,0000
16	0,0329	0,0155	0,1567	0,0007	0,4229	0,1965	0,1749	0,0000
17	0,0330	0,0161	0,1561	0,0008	0,4199	0,2007	0,1735	0,0000
18	0,0332	0,0168	0,1554	0,0009	0,4172	0,2044	0,1721	0,0000
19	0,0334	0,0177	0,1547	0,0009	0,4147	0,2077	0,1709	0,0000
20	0,0335	0,0188	0,1537	0,0010	0,4125	0,2107	0,1698	0,0000
21	0,0337	0,0203	0,1525	0,0010	0,4104	0,2132	0,1687	0,0000
22	0,0338	0,0223	0,1511	0,0011	0,4085	0,2154	0,1677	0,0000
23	0,0340	0,0249	0,1492	0,0012	0,4066	0,2173	0,1668	0,0000
24	0,0178	0,0293	0,1494	0,0014	0,4078	0,2264	0,1678	0,0000
25	0,0151	0,0333	0,1476	0,0019	0,4037	0,2319	0,1665	0,0000
26	0,0147	0,0373	0,1454	0,0036	0,3986	0,2359	0,1647	0,0000
27	0,0147	0,0410	0,1428	0,0086	0,3926	0,2380	0,1624	0,0000
28	0,0149	0,0441	0,1392	0,0234	0,3835	0,2360	0,1590	0,0000
29	0,0030	0,0507	0,1306	0,0714	0,3429	0,2559	0,1455	0,0000
30	0,0007	0,0507	0,1078	0,2170	0,2668	0,2396	0,1174	0,0000
31	0,0002	0,0368	0,0661	0,5132	0,1516	0,1612	0,0709	0,0000
32	0,0000	0,0179	0,0279	0,7935	0,0587	0,0723	0,0296	0,0000
33	0,0000	0,0068	0,0094	0,9299	0,0182	0,0256	0,0100	0,0000
34	0,0000	0,0024	0,0029	0,9781	0,0052	0,0083	0,0031	0,0000
35	0,0000	0,0008	0,0009	0,9933	0,0014	0,0026	0,0009	0,0000


Block C1: Vapor Composition Profiles
MEOH
2M1B
2M2B
TAME
IC5
NC5
1-PENTEN
WATER
Y (mole frac)
0,25
0,5
0,75
1,0
Stage
1,0
6,0
11,0
16,0
21,0
26,0
31,0
36,0

Stage	COMPOSICIÓN LIQUIDO C-1							
	MEOH	2M1B	2M2B	TAME	IC5	NC5	1-PENTEN	WATER
1	0,1393	0,0045	0,1376	0,0000	0,4677	0,0705	0,1803	0,0000
2	0,0384	0,0064	0,1566	0,0000	0,5057	0,0936	0,1994	0,0000
3	0,0120	0,0079	0,1626	0,0000	0,5048	0,1103	0,2024	0,0000
4	0,0070	0,0093	0,1643	0,0000	0,4940	0,1245	0,2009	0,0000
5	0,0061	0,0107	0,1647	0,0000	0,4825	0,1376	0,1984	0,0000
6	0,0060	0,0121	0,1644	0,0001	0,4719	0,1498	0,1956	0,0000
7	0,0059	0,0135	0,1638	0,0004	0,4622	0,1613	0,1929	0,0000
8	0,0059	0,0146	0,1632	0,0007	0,4535	0,1720	0,1901	0,0000
9	0,0060	0,0155	0,1626	0,0010	0,4456	0,1819	0,1874	0,0000
10	0,0060	0,0162	0,1621	0,0012	0,4386	0,1911	0,1848	0,0000
11	0,0060	0,0168	0,1615	0,0015	0,4322	0,1995	0,1823	0,0000
12	0,0061	0,0173	0,1610	0,0018	0,4266	0,2073	0,1800	0,0000
13	0,0061	0,0178	0,1604	0,0020	0,4216	0,2143	0,1778	0,0000
14	0,0061	0,0182	0,1598	0,0023	0,4170	0,2207	0,1758	0,0000
15	0,0062	0,0187	0,1591	0,0025	0,4130	0,2266	0,1739	0,0000
16	0,0062	0,0193	0,1584	0,0028	0,4093	0,2318	0,1722	0,0000
17	0,0062	0,0200	0,1577	0,0030	0,4060	0,2365	0,1705	0,0000
18	0,0062	0,0208	0,1569	0,0033	0,4031	0,2407	0,1691	0,0000
19	0,0063	0,0219	0,1559	0,0035	0,4003	0,2444	0,1677	0,0000
20	0,0063	0,0233	0,1548	0,0037	0,3978	0,2476	0,1664	0,0000
21	0,0063	0,0252	0,1535	0,0040	0,3955	0,2504	0,1652	0,0000
22	0,0064	0,0276	0,1518	0,0042	0,3933	0,2527	0,1640	0,0000
23	0,0064	0,0308	0,1498	0,0044	0,3911	0,2546	0,1629	0,0000
24	0,0032	0,0356	0,1476	0,0050	0,3862	0,2610	0,1613	0,0000
25	0,0027	0,0403	0,1450	0,0070	0,3801	0,2657	0,1592	0,0000
26	0,0026	0,0448	0,1419	0,0129	0,3729	0,2684	0,1565	0,0000
27	0,0027	0,0485	0,1375	0,0308	0,3617	0,2665	0,1523	0,0000
28	0,0030	0,0501	0,1291	0,0826	0,3388	0,2528	0,1437	0,0000
29	0,0007	0,0500	0,1064	0,2273	0,2633	0,2365	0,1159	0,0000
30	0,0002	0,0363	0,0652	0,5203	0,1494	0,1588	0,0699	0,0000
31	0,0000	0,0176	0,0275	0,7966	0,0579	0,0712	0,0292	0,0000
32	0,0000	0,0068	0,0093	0,9309	0,0180	0,0252	0,0098	0,0000
33	0,0000	0,0024	0,0029	0,9784	0,0051	0,0082	0,0030	0,0000
34	0,0000	0,0008	0,0009	0,9934	0,0014	0,0026	0,0009	0,0000
35	0,0000	0,0003	0,0003	0,9980	0,0004	0,0008	0,0003	0,0000


Block C1: Liquid Composition Profiles
MEOH
2M1B
2M2B
TAME
IC5
NC5
1-PENTEN
WATER
X (mole frac)
0,0
0,2
0,4
0,6
0,8
1,0
Stage
1,0
6,0
11,0
16,0
21,0
26,0
31,0
36,0

Stage	CANTIDAD GENERADA DEL COMPONENTE (BASE MOL)							
	MEOH	2M1B	2M2B	TAME	IC5	NC5	1-PENTEN	WATER
1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0
7	-1,16	1,69	-2,85	1,16	0	0	0	0
8	-1,14	1,24	-2,39	1,14	0	0	0	0
9	-1,13	0,88	-2,01	1,13	0	0	0	0
10	-1,11	0,58	-1,69	1,11	0	0	0	0
11	-1,09	0,32	-1,41	1,09	0	0	0	0
12	-1,07	0,09	-1,16	1,07	0	0	0	0
13	-1,05	-0,12	-0,93	1,05	0	0	0	0
14	-1,03	-0,34	-0,69	1,03	0	0	0	0
15	-1,00	-0,57	-0,43	1,00	0	0	0	0
16	-0,98	-0,84	-0,14	0,98	0	0	0	0
17	-0,96	-1,17	0,21	0,96	0	0	0	0
18	-0,94	-1,57	0,63	0,94	0	0	0	0
19	-0,93	-2,09	1,16	0,93	0	0	0	0
20	-0,91	-2,76	1,84	0,91	0	0	0	0
21	-0,90	-3,63	2,73	0,90	0	0	0	0
22	-0,90	-4,78	3,88	0,90	0	0	0	0
23	-0,91	-6,29	5,38	0,91	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	0	0
25	0	0	0	0	0	0	0	0
26	0	0	0	0	0	0	0	0
27	0	0	0	0	0	0	0	0
28	0	0	0	0	0	0	0	0
29	0	0	0	0	0	0	0	0
30	0	0	0	0	0	0	0	0
31	0	0	0	0	0	0	0	0
32	0	0	0	0	0	0	0	0
33	0	0	0	0	0	0	0	0
34	0	0	0	0	0	0	0	0
35	0	0	0	0	0	0	0	0

Stage	VALOR DE K (COEFICIENTE GENERAL DE TRANSFERENCIA DE MASA)							
	MEOH	2M1B	2M2B	TAME	IC5	NC5	1-PENTEN	WATER
1	1,7519	0,6889	0,8556	0,1608	0,9069	0,7352	0,8822	2,0034
2	3,6322	0,7098	0,8789	0,2082	0,9248	0,7534	0,9045	5,5621
3	4,8346	0,7625	0,9407	0,2429	0,9872	0,8077	0,9665	8,5557
4	5,1552	0,7796	0,9608	0,2529	1,0074	0,8253	0,9868	9,4587
5	5,2296	0,7847	0,9669	0,2555	1,0135	0,8306	0,9930	9,7011
6	5,2554	0,7874	0,9702	0,2568	1,0166	0,8333	0,9965	9,8139
7	5,2702	0,7898	0,9730	0,2578	1,0192	0,8356	0,9994	9,8867
8	5,2799	0,7918	0,9754	0,2586	1,0214	0,8375	1,0019	9,9481
9	5,2878	0,7935	0,9776	0,2593	1,0234	0,8392	1,0042	10,0063
10	5,2944	0,7952	0,9796	0,2599	1,0252	0,8408	1,0063	10,0620
11	5,3001	0,7967	0,9815	0,2605	1,0268	0,8422	1,0082	10,1147
12	5,3049	0,7981	0,9832	0,2611	1,0283	0,8435	1,0100	10,1639
13	5,3090	0,7993	0,9847	0,2616	1,0296	0,8447	1,0117	10,2092
14	5,3124	0,8005	0,9862	0,2621	1,0309	0,8457	1,0132	10,2503
15	5,3152	0,8016	0,9875	0,2625	1,0320	0,8467	1,0146	10,2869
16	5,3175	0,8026	0,9887	0,2629	1,0331	0,8477	1,0159	10,3190
17	5,3195	0,8035	0,9899	0,2632	1,0340	0,8485	1,0171	10,3466
18	5,3212	0,8044	0,9910	0,2636	1,0350	0,8494	1,0183	10,3697
19	5,3228	0,8052	0,9920	0,2639	1,0359	0,8501	1,0193	10,3886
20	5,3243	0,8060	0,9930	0,2642	1,0368	0,8509	1,0204	10,4036
21	5,3261	0,8069	0,9940	0,2645	1,0377	0,8517	1,0215	10,4151
22	5,3282	0,8077	0,9950	0,2648	1,0387	0,8526	1,0226	10,4242
23	5,3311	0,8086	0,9961	0,2651	1,0397	0,8535	1,0237	10,4331
24	5,5613	0,8225	1,0123	0,2729	1,0560	0,8677	1,0401	11,1195
25	5,5933	0,8273	1,0180	0,2749	1,0619	0,8728	1,0460	11,0302
26	5,5574	0,8328	1,0243	0,2762	1,0689	0,8789	1,0523	10,3301
27	5,4151	0,8453	1,0384	0,2781	1,0852	0,8931	1,0665	8,5544
28	5,0358	0,8808	1,0782	0,2834	1,1319	0,9336	1,1061	5,6556
29	4,4895	1,0134	1,2278	0,3140	1,3024	1,0823	1,2555	3,2081
30	4,1283	1,3961	1,6547	0,4172	1,7856	1,5085	1,6802	2,2533
31	4,8868	2,0882	2,4060	0,6442	2,6205	2,2628	2,4277	2,7054
32	5,8178	2,6504	2,9958	0,8524	3,2691	2,8642	3,0166	3,4218
33	6,2694	2,8996	3,2514	0,9505	3,5490	3,1279	3,2727	3,7944
34	6,4265	2,9842	3,3374	0,9846	3,6430	3,2171	3,3590	3,9277
35	6,4757	3,0106	3,3642	0,9953	3,6723	3,2449	3,3859	3,9699

PERFILES DE FLUJO DE CALOR				
Stage	Temperatura	Flujo de Calor	Liquido entalpía	Vapor entalpía
	K	cal/sec	cal/mol	cal/mol
1	340,221934	-11138447	-33101,642	-30071,531
2	343,684587	0	-30338,663	-27417,559
3	346,788068	0	-29522,535	-25356,308
4	347,717096	0	-29361,616	-24790,201
5	347,991059	0	-29352,386	-24682,179
6	348,13474	0	-29385,768	-24676,744
7	348,255634	0	-29444,367	-24701,923
8	348,357322	0	-29510,668	-24740,772
9	348,4488	0	-29581,151	-24785,88
10	348,532151	0	-29653,76	-24834,625
11	348,608257	0	-29726,889	-24885,368
12	348,67779	0	-29799,203	-24936,803
13	348,741383	0	-29869,588	-24987,838
14	348,799665	0	-29937,125	-25037,56
15	348,853277	0	-30001,05	-25085,213
16	348,90288	0	-30060,728	-25130,172
17	348,949179	0	-30115,607	-25171,91
18	348,992935	0	-30165,177	-25209,972
19	349,035002	0	-30208,919	-25243,932
20	349,076348	0	-30246,248	-25273,361
21	349,11809	0	-30276,416	-25297,772
22	349,161482	0	-30298,351	-25316,55
23	349,207782	0	-30310,255	-25328,82
24	349,926833	0	-30236,956	-24945,821
25	350,179617	0	-30307,042	-24902,073
26	350,468606	0	-30567,92	-24955,847
27	351,118839	0	-31368,638	-25153,38
28	352,879665	0	-33727,557	-25762,25
29	358,784433	0	-40396,421	-27589,393
30	372,375752	0	-53777,1	-33818,106
31	391,779919	0	-65974,287	-46664,696
32	405,15644	0	-71635,509	-58959,212
33	410,6675	0	-73583,624	-64987,432
34	412,495426	0	-74196,642	-67129,705
35	413,061505	11191935,1	-74385,029	-67811,44

FLUJO DE MATERIA (BASE MOL) EN CADA PLATO			
Stage	Temperatura	Flujo Líquido	Flujo Vapor
	K	kmol/hr	kmol/hr
1	340,221934	5643,606	0
2	343,684587	5854,76148	7054,50749
3	346,788068	5995,30442	7265,66298
4	347,717096	6030,50677	7406,20592
5	347,991059	6033,76188	7441,40827
6	348,13474	6030,77814	7444,66338
7	348,255634	6023,19763	7441,67964
8	348,357322	6015,66185	7435,25657
9	348,4488	6008,53126	7428,86477
10	348,532151	6001,83135	7422,86316
11	348,608257	5995,53419	7417,27483
12	348,67779	5989,60632	7412,06981
13	348,741383	5984,01654	7407,21314
14	348,799665	5978,73676	7402,6726
15	348,853277	5973,74187	7398,41964
16	348,90288	5969,00946	7394,42919
17	348,949179	5964,51958	7390,67939
18	348,992935	5960,25469	7387,15138
19	349,035002	5956,19983	7383,82927
20	349,076348	5952,34365	7380,70047
21	349,11809	5948,68144	7377,75683
22	349,161482	5945,22456	7374,998
23	349,207782	6253,77279	7372,44161
24	349,926833	6278,61346	7448,89736
25	350,179617	6271,48403	7473,73802
26	350,468606	6241,71222	7466,60859
27	351,118839	6157,91576	7436,83678
28	352,879665	7232,11313	7353,04032
29	358,784433	6665,21923	7144,4764
30	372,375752	6006,41193	6577,5825
31	391,779919	5936,17671	5918,7752
32	405,15644	6184,4231	5848,53998
33	410,6675	6341,38652	6096,78637
34	412,495426	6400,27574	6253,74979
35	413,061505	87,6367305	6312,63901

SUMARIO DE LA COLUMNA C-1 DE DESTILACIÓN-REACTIVA

BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA					
Total		**Entrada**	**Salida**	**Generado (mol)**	**Δ Diferencia**
Flujo Molar	**kmol/hr**	1515,76129	1498,53823	-17,223064	3,90E-15
Flujo Másico	**kg/hr**	101943,748	101943,748		3,57E-15
Entalpía	**cal/sec**	-14837382	-14783894		-0,0036049

CONDENSADOR EN EL DESTILADO		
Temperatura	**K**	340,221
Calor Removido	**cal/seg**	-11138447
Flujo de Destilado	**Kmol/hr**	1410,901
Flujo de Reflujo	**Kmol/hr**	5643,606
Relación de Reflujo		4

HERVIDOR EN EL DESTILADOR		
Temperatura	K	413,061
Calor Suministrado	cal/sec	1119193,5
Flujo de Fondos	kmol/hr	87,6367
Flujo Hervido	kmol/hr	6312,639
Relación de Reflujo		72,031

RESULTADOS DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN C-2

PERFILES GENERALES COLUMNA DE DESTILACIÓN C-2					
Stage	Temperatura	Presión	Flujo de Calor	Flujo Líquido	Flujo Vapor
	K	atm	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr
1	327,103109	2,5	0	1094,38612	1119,90046
2	326,676574	2,5	0	1091,00268	1163,28762
3	326,343574	2,5	0	1087,40808	1159,90417
4	326,057877	2,5	0	1083,78699	1156,30958
5	325,772737	2,5	0	1079,39338	1152,68849
6	325,443579	2,5	0	2343,42377	1148,29488
7	325,44699	2,5	0	2343,64413	1001,42377
8	325,463158	2,5	0	2344,72078	1001,64413
9	325,541447	2,5	0	2349,48359	1002,72078
10	325,921406	2,5	0	2365,59066	1007,48359
11	327,432482	2,5	1690171,34	1342	1023,59066

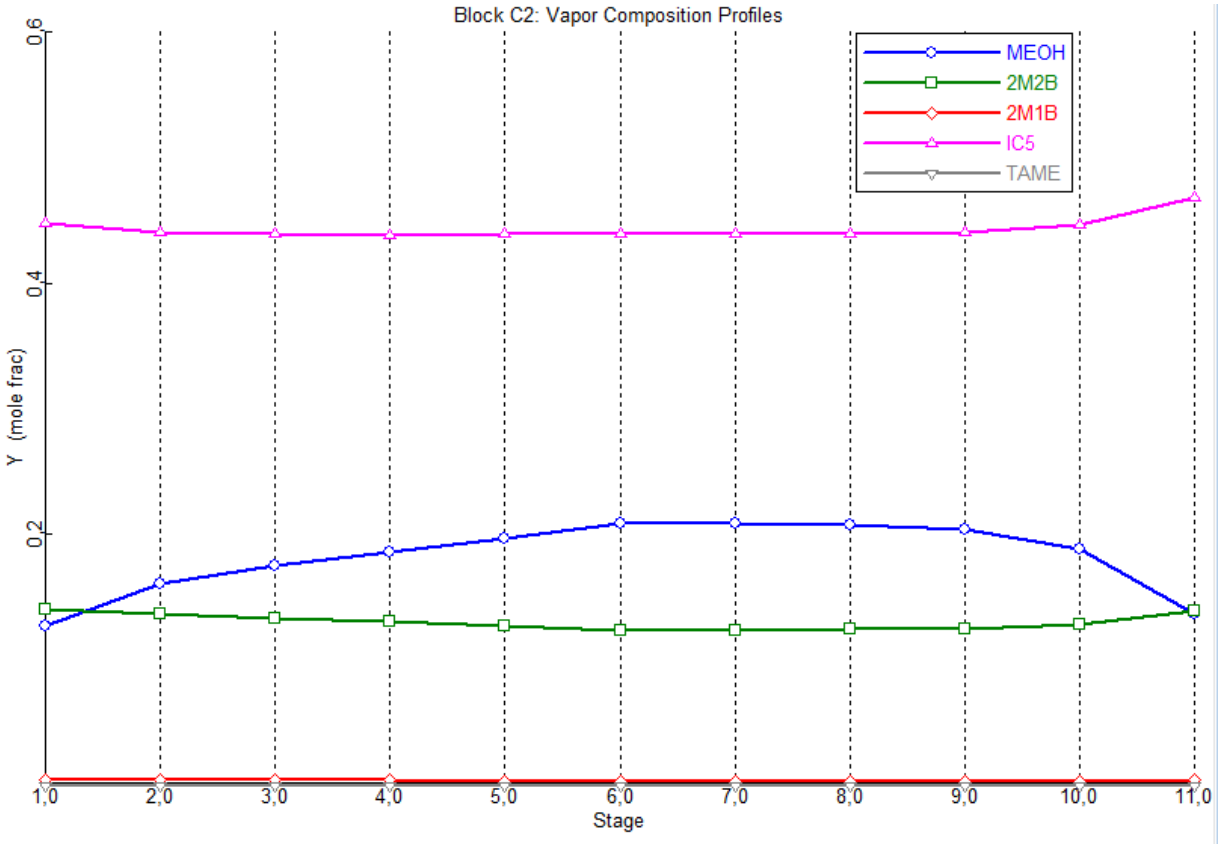
PERFILES DE ALIMENTACIÓN Y PRODUCTOS EN C-2						
Stage	Temperatura	Liquid feed	Vapor feed	Mixed Feed	Liquido producto	Vapor producto
	K	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr
1	327,103109	0	0	1050,99896	0	1119,90046
2	326,676574	0	0	0	0	0
3	326,343574	0	0	0	0	0
4	326,057877	0	0	0	0	0
5	325,772737	0	0	0	0	0
6	325,443579	0	0	1410,9015	0	0
7	325,44699	0	0	0	0	0
8	325,463158	0	0	0	0	0
9	325,541447	0	0	0	0	0
10	325,921406	0	0	0	0	0
11	327,432482	0	0	0	1341,99896	0

RESULTADOS DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN C-2

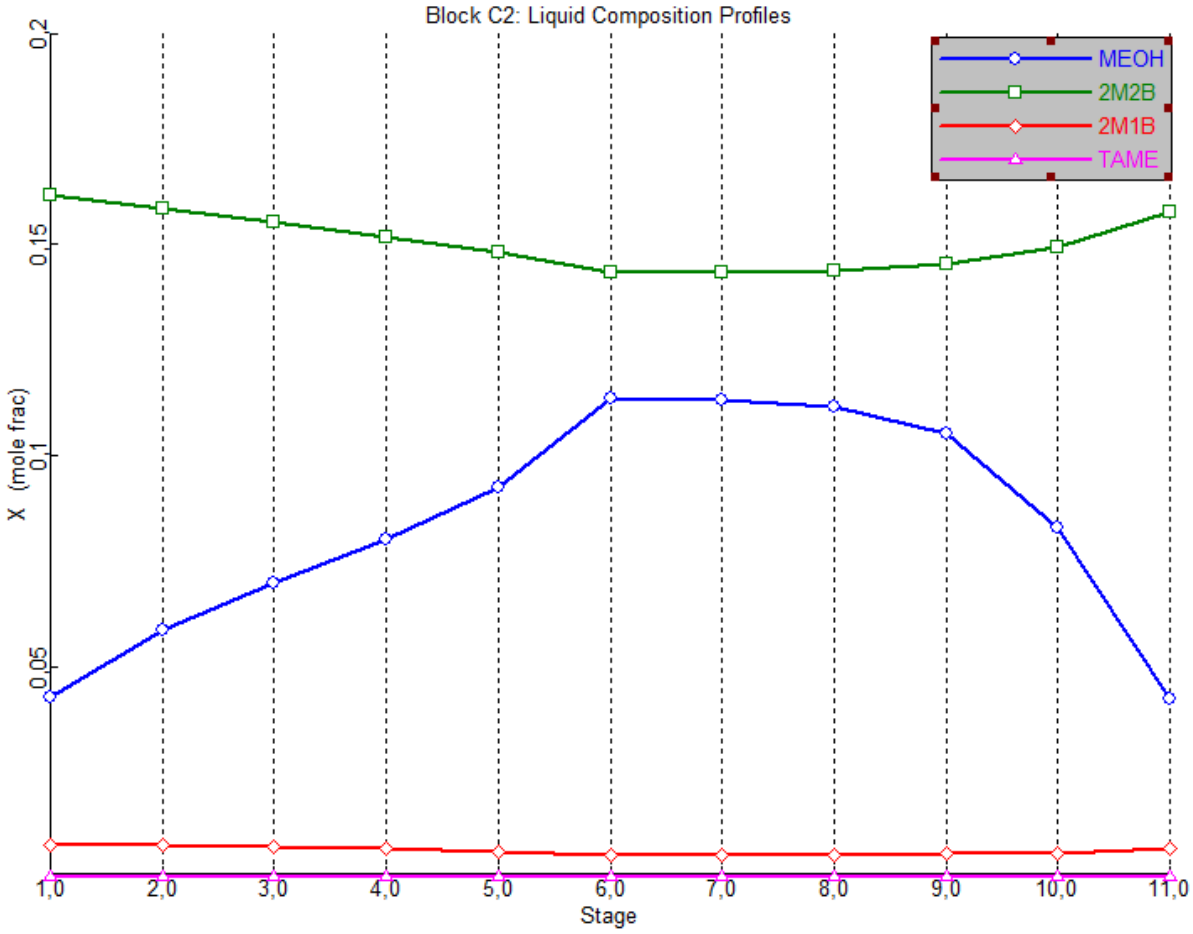
PERFILES DE FLUJO DE CALOR EN C-2				
Stage	Temperatura	Flujo de Calor	Liquid Entalpía	Vapor Entalpía
	K	cal/sec	cal/mol	cal/mol
1	327,103109	0	-31073,744	-28105,68
2	326,676574	0	-31396,701	-28333,098
3	326,343574	0	-31712,14	-28628,877
4	326,057877	0	-32036,989	-28916,914
5	325,772737	0	-32420,718	-29213,564
6	325,443579	0	-33007,279	-29563,465
7	325,44699	0	-32997,162	-29557,67
8	325,463158	0	-32954,309	-29534,757
9	325,541447	0	-32775,342	-29438,268
10	325,921406	0	-32176,882	-29037,533
11	327,432482	1690171,34	-31047,447	-27713,265

Stage	VALOR DE K (COEFICIENTE GENERAL DE TRANSFERENCIA DE MASA)							
	MEOH	2M1B	2M2B	TAME	IC5	NC5	1-PENTEN	WATER
1	2,9837	0,6887	0,8672	0,1650	0,9375	0,7441	0,8973	3,9171
2	2,7289	0,6848	0,8645	0,1647	0,9284	0,7364	0,8959	3,3882
3	2,5200	0,6818	0,8616	0,1613	0,9239	0,7325	0,8932	3,0279
4	2,3300	0,6800	0,8597	0,1575	0,9219	0,7305	0,8915	2,7232
5	2,1240	0,6796	0,8595	0,1531	0,9222	0,7304	0,8915	2,4062
6	1,8412	0,6831	0,8640	0,1472	0,9283	0,7349	0,8963	1,9903
7	1,8448	0,6830	0,8639	0,1472	0,9281	0,7348	0,8962	1,9952
8	1,8621	0,6826	0,8633	0,1476	0,9275	0,7343	0,8956	2,0196
9	1,9433	0,6809	0,8612	0,1492	0,9248	0,7322	0,8934	2,1367
10	2,2750	0,6785	0,8581	0,1562	0,9200	0,7289	0,8899	2,6410
11	3,2255	0,6952	0,8779	0,1776	0,9386	0,7454	0,9094	4,3052

COMPOSICIÓN VAPOR C-2								
Stage	**MEOH**	**2M1B**	**2M2B**	**TAME**	**IC5**	**NC5**	**1-PENTEN**	**WATER**
1	0,12728	0,00528	0,14035	0,00000	0,44733	0,07887	0,17857	0,02232
2	0,16031	0,00509	0,13699	0,00000	0,44084	0,07563	0,17577	0,00536
3	0,17578	0,00487	0,13373	0,00000	0,43861	0,07246	0,17306	0,00149
4	0,18650	0,00458	0,13062	0,00000	0,43835	0,06881	0,17068	0,00046
5	0,19654	0,00419	0,12745	0,00000	0,43896	0,06426	0,16845	0,00016
6	0,20872	0,00365	0,12393	0,00000	0,43932	0,05830	0,16601	0,00006
7	0,20858	0,00365	0,12399	0,00000	0,43930	0,05834	0,16608	0,00006
8	0,20787	0,00366	0,12423	0,00000	0,43941	0,05848	0,16630	0,00006
9	0,20441	0,00370	0,12510	0,00000	0,44048	0,05909	0,16716	0,00006
10	0,18894	0,00389	0,12836	0,00000	0,44655	0,06162	0,17058	0,00005
11	0,13647	0,00459	0,13865	0,00000	0,46800	0,07082	0,18144	0,00004



COMPOSICIÓN LÍQUIDO EN C-2								
Stage	**MEOH**	**2M1B**	**2M2B**	**TAME**	**IC5**	**NC5**	**1-PENTEN**	**WATER**
1	0,04266	0,00767	0,16184	0,00000	0,47713	0,10599	0,19901	0,00570
2	0,05874	0,00744	0,15845	0,00000	0,47486	0,10271	0,19620	0,00158
3	0,06975	0,00714	0,15522	0,00000	0,47471	0,09893	0,19375	0,00049
4	0,08004	0,00673	0,15193	0,00000	0,47548	0,09419	0,19145	0,00017
5	0,09253	0,00617	0,14829	0,00000	0,47602	0,08798	0,18895	0,00007
6	0,11336	0,00534	0,14343	0,00000	0,47327	0,07934	0,18522	0,00003
7	0,11307	0,00534	0,14353	0,00000	0,47331	0,07940	0,18531	0,00003
8	0,11163	0,00536	0,14390	0,00000	0,47376	0,07965	0,18567	0,00003
9	0,10519	0,00544	0,14526	0,00000	0,47629	0,08070	0,18711	0,00003
10	0,08305	0,00573	0,14959	0,00000	0,48537	0,08455	0,19169	0,00002
11	0,04231	0,00660	0,15794	0,00000	0,49862	0,09501	0,19951	0,00001



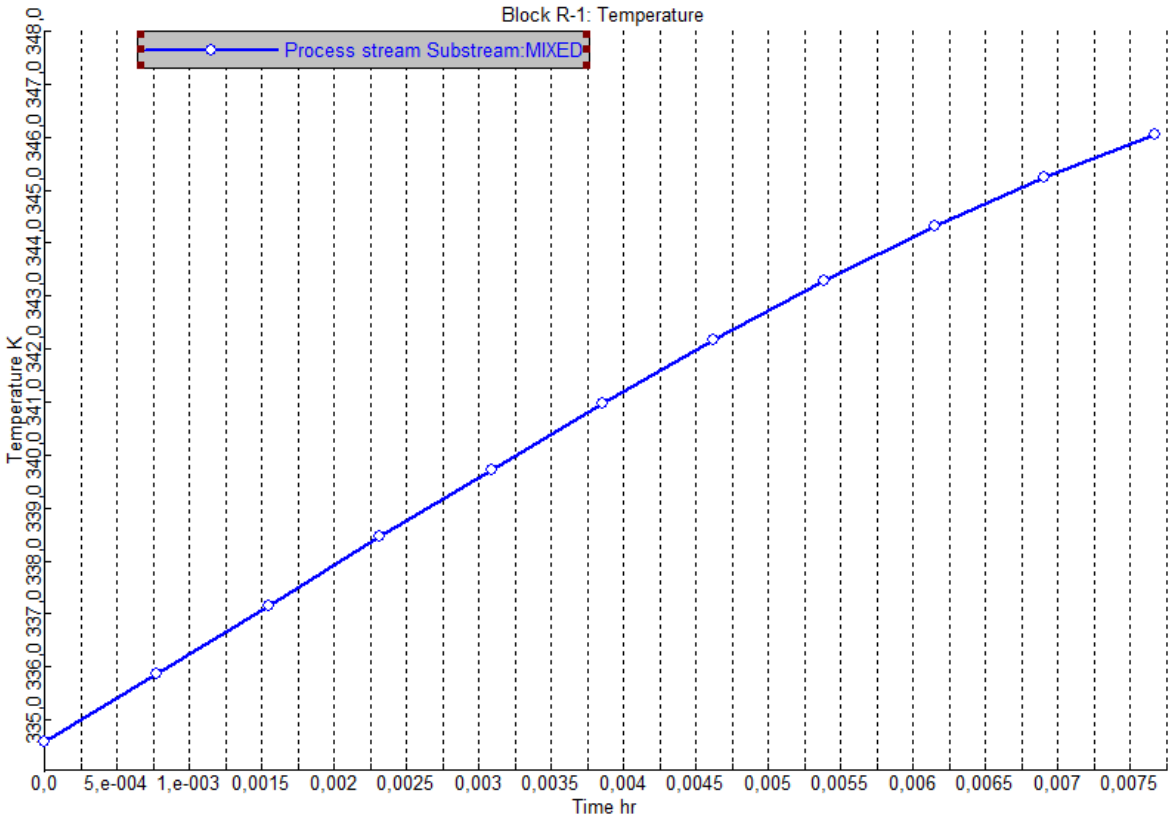
RESULTADOS DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN C-2

FLUJOS DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN C-3			
Mole Flow kmol/hr	**Flujo o Corriente**		
	B2	**D3**	**B3**
MEOH	56,7779695	54,0405093	2,73746012
2M1B	8,85520521	0,47241537	8,38278984
2M2B	211,95663	37,0225147	174,934115
TAME	0,00199638	6,95E-13	0,00199638
IC5	669,147655	158,844775	510,302881
NC5	127,50856	11,1676649	116,340895
1-PENTEN	267,739769	54,4414698	213,298299
WATER	0,01118005	0,01065111	0,00052894
Fracción Mol			
MEOH	0,0423085	0,17101427	0,00266809
2M1B	0,00659851	0,00149498	0,00817036
2M2B	0,15794098	0,11715986	0,17050126
TAME	1,49E-06	2,20E-15	1,95E-06
IC5	0,4986201	0,50267334	0,49737173
NC5	0,0950139	0,03534071	0,1133928
1-PENTEN	0,19950818	0,17228313	0,20789329
WATER	8,33E-06	3,37E-05	5,16E-07
Propiedades Fisicoquímicas			
Total Flow kmol/hr	1341,99896	316	1025,99896
Total Flow kg/hr	93562,9368	20446,1159	73116,8209
Total Flow l/min	2605,81645	526,931918	1958,81116
Temperature K	327,432482	298,359002	302,156572
Pressure atm	2,5	1	1
Vapor Frac	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1
Solid Frac	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-31047,39	-36184,401	-30905,147
Enthalpy cal/gm	-445,32126	-559,23926	-433,67105
Enthalpy cal/sec	-11573768	-3176186,4	-8807958,1
Entropy cal/mol-K	-110,92847	-107,63678	-116,57747
Entropy cal/gm-K	-1,5910776	-1,6635542	-1,6358529
Density mol/cc	0,00858335	0,00999496	0,00872977
Density gm/cc	0,59842368	0,64670327	0,62211901
Average MW	69,7190827	64,7028984	71,2640299
Liq Vol 60F l/min	2453,92334	530,120864	1923,80248

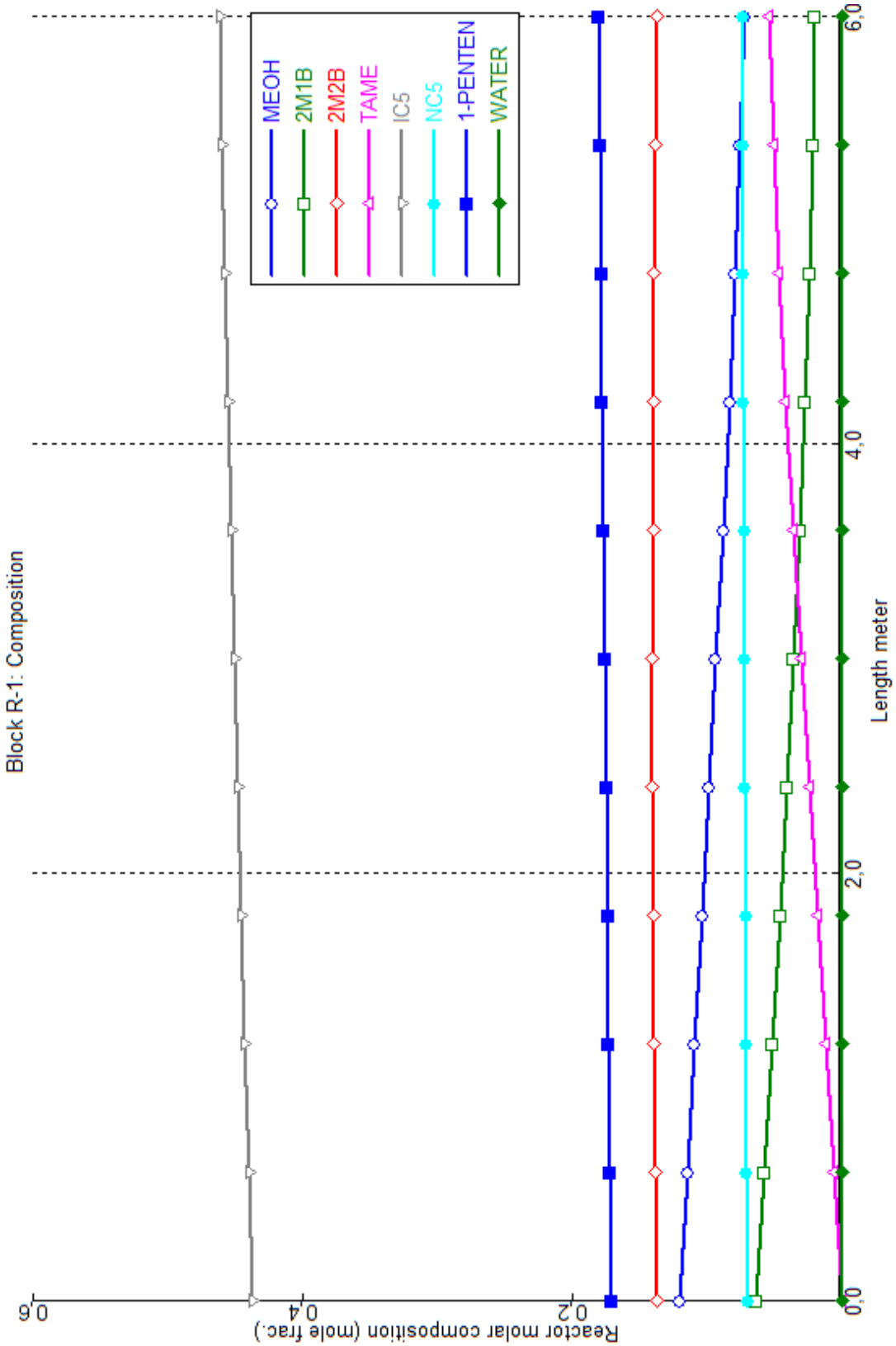
RESULTADOS DEL REACTOR R-1

REACTOR				
Flujo molar kmol/hr	**Flujos o Corrientes:**			
	F-1	**S-1**	**F-2**	**S-2**
MEOH	162,829083	0	92,5903764	0
2M1B	85,8708169	0	25,5568069	0
2M2B	186,22353	0	176,298833	0
TAME	3,98E-13	0	70,2387068	0
IC5	592,059367	0	592,059367	0
NC5	94,8019764	0	94,8019764	0
1-PENTEN	231,209121	0	231,209121	0
WATER	0,00610585	100	0,00610585	100
Fracción mol				
MEOH	0,1203467	0	0,07218051	0
2M1B	0,06346697	0	0,01992327	0
2M2B	0,13763749	0	0,13743698	0
TAME	2,94E-16	0	0,05475586	0
IC5	0,43759007	0	0,4615507	0
NC5	0,07006798	0	0,07390461	0
1-PENTEN	0,17088627	0	0,18024329	0
WATER	4,51E-06	1	4,76E-06	1
Propiedades Fisicoquímicas				
Total Flow kmol/hr	1353	100	1282,76129	100
Total Flow kg/hr	90073,6305	1801,528	90073,6305	1801,528
Total Flow l/min	2499,60618	30,2080133	2546,12835	30,3873945
Temperature K	334,594617	298,15	346,045464	304,212721
Pressure atm	5,9215396	1	5,9215396	1
Vapor Frac	0	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1	1
Solid Frac	0	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-31829,379	-68234,418	-33580,089	-68133,531
Enthalpy cal/gm	-478,11051	-3787,5858	-478,22252	-3781,9857
Enthalpy cal/sec	-11962542	-1895400,5	-11965344	-1892598,1
Entropy cal/mol-K	-103,95391	-38,858213	-109,2444	-38,525937
Entropy cal/gm-K	-1,5614964	-2,1569586	-1,555777	-2,1385145
Density mol/cc	0,00902142	0,05517299	0,0083968	0,0548473
Density gm/cc	0,60058547	0,993957	0,58961173	0,98808953
Average MW	66,5732672	18,01528	70,2185441	18,01528
Liq Vol 60F l/min	2336,78774	30,083333	2322,16247	30,083333

PERFILES GENERALES REACTOR R-1					
Longitud en el Reactor	**Presión**	**Temperatura**	**Fracción molar de vapor**	**Calor**	**Tiempo de Residencia**
meter	atm	K		cal/sec	hr
0	5,9215396	334,594687	0	0	0
0,6	5,9215396	335,871469	0	-260,39086	0,00077364
1,2	5,9215396	337,16064	0	-525,59017	0,0015458
1,8	5,9215396	338,451299	0	-795,75921	0,0023164
2,4	5,9215396	339,729224	0	-1070,8242	0,00308543
3	5,9215396	340,976735	0	-1350,5744	0,00385291
3,6	5,9215396	342,172829	0	-1634,6569	0,00461887
4,2	5,9215396	343,295924	0	-1922,5767	0,00538339
4,8	5,9215396	344,325774	0	-2213,6957	0,00614655
5,4	5,9215396	345,245854	0	-2507,2606	0,00690848
6	5,9215396	346,045469	0	-2802,4307	0,00766932



GRAFICA R-1 LONGITUD VS COMPOSICIÓN



RESULTADOS DE MEZCLADORES

MIX-1	CORRIENTES		
	FEED1	MEOH-4	F-1
Flujo Molar kmol/hr			
MEOH	0,0000	162,8291	162,8291
2M1B	85,6000	0,2708	85,8708
2M2B	165,0000	21,2235	186,2235
TAME	0,0000	0,0000	0,0000
IC5	501,0000	91,0594	592,0594
NC5	88,4000	6,4020	94,8020
1-PENTEN	200,0000	31,2091	231,2091
WATER	0,0000	0,0061	0,0061
Fracción Mol			
MEOH	0,0000	0,5202	0,1203
2M1B	0,0823	0,0009	0,0635
2M2B	0,1587	0,0678	0,1376
TAME	0,0000	0,0000	0,0000
IC5	0,4817	0,2909	0,4376
NC5	0,0850	0,0205	0,0701
1-PENTEN	0,1923	0,0997	0,1709
WATER	0,0000	0,0000	0,0000
Propiedades Fisicoquímicas			
Total Flow kmol/hr	1040,0000	313,0000	1353,0000
Total Flow kg/hr	74127,9357	15945,6948	90073,6305
Total Flow l/min	2141,5971	391,3110	2499,6062
Temperature K	343,0000	313,0473	334,5946
Pressure atm	9,8692	3,9477	5,9215
Vapor Frac	0,0000	0,0000	0,0000
Liquid Frac	1,0000	1,0000	1,0000
Solid Frac	0,0000	0,0000	0,0000
Enthalpy cal/mol	-28053,6780	-44374,8370	-31829,3790
Enthalpy cal/gm	-393,5875	-871,0391	-478,1105
Enthalpy cal/sec	-8104396,1000	-3858145,5000	-11962542,0000
Entropy cal/mol-K	-110,0336	-84,6437	-103,9539
Entropy cal/gm-K	-1,5437	-1,6615	-1,5615
Density mol/cc	0,0081	0,0133	0,0090
Density gm/cc	0,5769	0,6792	0,6006
Average MW	71,2769	50,9447	66,5733
Liq Vol 60F l/min	1944,2555	392,5323	2336,7877

MIX-2	CORRIENTES		
	FEED1	MEOH-4	F-1
Flujo Molar kmol/hr			
MEOH	54,0405	230,0000	284,0405
2M1B	0,4724	0,0000	0,4724
2M2B	37,0225	0,0000	37,0225
TAME	0,0000	0,0000	0,0000
IC5	158,8448	0,0000	158,8448
NC5	11,1677	0,0000	11,1677
1-PENTEN	54,4415	0,0000	54,4415
WATER	0,0107	0,0000	0,0107
Fracción Mol			
MEOH	0,1710	1,0000	0,5202
2M1B	0,0015	0,0000	0,0009
2M2B	0,1172	0,0000	0,0678
TAME	0,0000	0,0000	0,0000
IC5	0,5027	0,0000	0,2909
NC5	0,0353	0,0000	0,0205
1-PENTEN	0,1723	0,0000	0,0997
WATER	0,0000	0,0000	0,0000
Propiedades Fisicoquímicas			
Total Flow kmol/hr	316	230	546
Total Flow kg/hr	20446,1159	7369,6968	27815,8127
Total Flow l/min	526,9319	169,0576	682,6064
Temperature K	298,3590	351,0000	313,0473
Pressure atm	1,0000	3,9477	3,9477
Vapor Frac	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1
Solid Frac	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-36184,4010	-55627,7820	-44374,8370
Enthalpy cal/gm	-559,2393	-1736,0809	-871,0391
Enthalpy cal/sec	-3176186,4	-3553997,2	-6730183,6
Entropy cal/mol-K	-107,6368	-53,5137	-84,6437
Entropy cal/gm-K	-1,6636	-1,6701	-1,6615
Density mol/cc	0,0100	0,0227	0,0133
Density gm/cc	0,6467	0,7265	0,6792
Average MW	64,7029	32,0422	50,9447
Liq Vol 60F l/min	530,1209	154,6160	684,7368

MIX-3	CORRIENTES		
	MEOH-3	MEOH-4	MEOH-22
Flujo Molar kmol/hr			
MEOH	284,0405	162,8291	121,2114
2M1B	0,4724	0,2708	0,2016
2M2B	37,0225	21,2235	15,7990
TAME	0,0000	0,0000	0,0000
IC5	158,8448	91,0594	67,7854
NC5	11,1677	6,4020	4,7657
1-PENTEN	54,4415	31,2091	23,2323
WATER	0,0107	0,0061	0,0045
Fracción Mol			
MEOH	0,5202	0,5202	0,5202
2M1B	0,0009	0,0009	0,0009
2M2B	0,0678	0,0678	0,0678
TAME	0,0000	0,0000	0,0000
IC5	0,2909	0,2909	0,2909
NC5	0,0205	0,0205	0,0205
1-PENTEN	0,0997	0,0997	0,0997
WATER	0,0000	0,0000	0,0000
Propiedades Fisicoquímicas			
Total Flow kmol/hr	546	313	233
Total Flow kg/hr	27815,8127	15945,6948	11870,1179
Total Flow l/min	682,6064	391,3110	291,2954
Temperature K	313,0473	313,0473	313,0473
Pressure atm	3,9477	3,9477	3,9477
Vapor Frac	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1
Solid Frac	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-44374,8370	-44374,8370	-44374,8370
Enthalpy cal/gm	-871,0391	-871,0391	-871,0391
Enthalpy cal/sec	-6730183,6000	-3858145,5000	-2872038,1000
Entropy cal/mol-K	-84,6437	-84,6437	-84,6437
Entropy cal/gm-K	-1,6615	-1,6615	-1,6615
Density mol/cc	0,0133	0,0133	0,0133
Density gm/cc	0,6792	0,6792	0,6792
Average MW	50,9447	50,9447	50,9447
Liq Vol 60F l/min	684,7368	392,5323	292,2045

MIX-4	CORRIENTES		
	B3	WATER	F2
Flujo Molar kmol/hr			
MEOH	2,7375	0	2,7375
2M1B	8,3828	0	8,3828
2M2B	174,9341	0	174,9341
TAME	0,0020	0	0,0020
IC5	510,3029	0	510,3029
NC5	116,3409	0	116,3409
1-PENTEN	213,2983	0	213,2983
WATER	0,0005	25	25,0005
Fracción Mol			
MEOH	0,0027	0	0,0026
2M1B	0,0082	0	0,0080
2M2B	0,1705	0	0,1664
TAME	0,0000	0	0,0000
IC5	0,4974	0	0,4855
NC5	0,1134	0	0,1107
1-PENTEN	0,2079	0	0,2029
WATER	0,0000	1	0,0238
Propiedades Fisicoquímicas			
Total Flow kmol/hr	1025,9990	25,0000	1050,9990
Total Flow kg/hr	73116,8209	450,3820	73567,2029
Total Flow l/min	1958,8112	7,7572	1958,7338
Temperature K	302,1566	325,0000	301,5421
Pressure atm	1	2,5	2,5
Vapor Frac	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1
Solid Frac	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-30905,1470	-67779,2500	-31782,2670
Enthalpy cal/gm	-433,6711	-3762,3201	-454,0492
Enthalpy cal/sec	-8807958,1000	-470689,2400	-9278647,3000
Entropy cal/mol-K	-116,5775	-37,4068	-114,7087
Entropy cal/gm-K	-1,6359	-2,0764	-1,6388
Density mol/cc	0,0087	0,0537	0,0089
Density gm/cc	0,6221	0,9677	0,6260
Average MW	71,2640	18,0153	69,9974
Liq Vol 60F l/min	1923,8025	7,5208	1931,3233

COLUMNA DE DESTILACION CON REACTOR ACOPLADO LATERAL

La alimentación entra al reactor donde hay reacción para producir TAME. Posteriormente ingresa a la columna de destilación para separar el TAME de los otros reactivos pero también parte de esos, se regresa al reactor a un lado de los platos para el aprovechamiento de los reactivos.

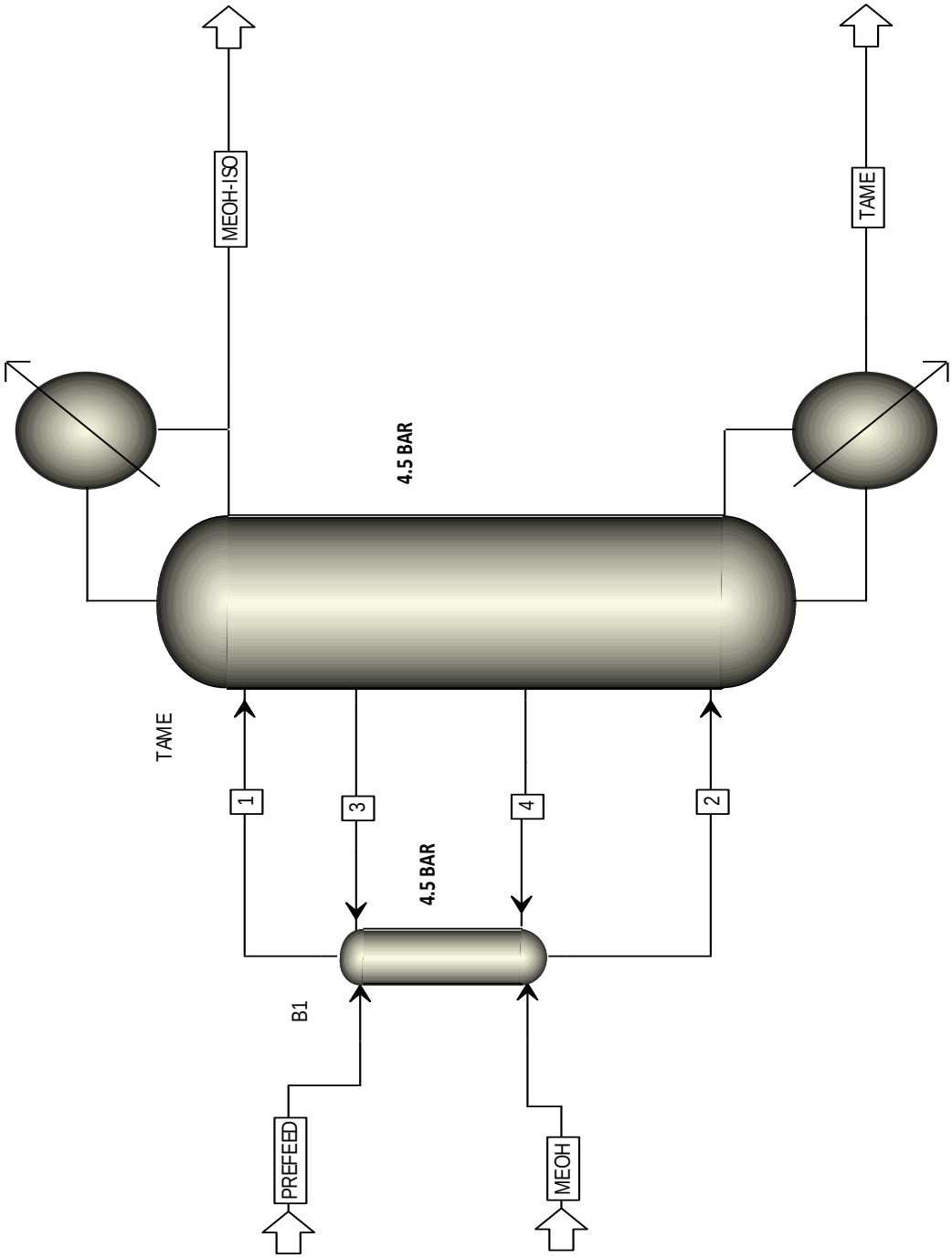
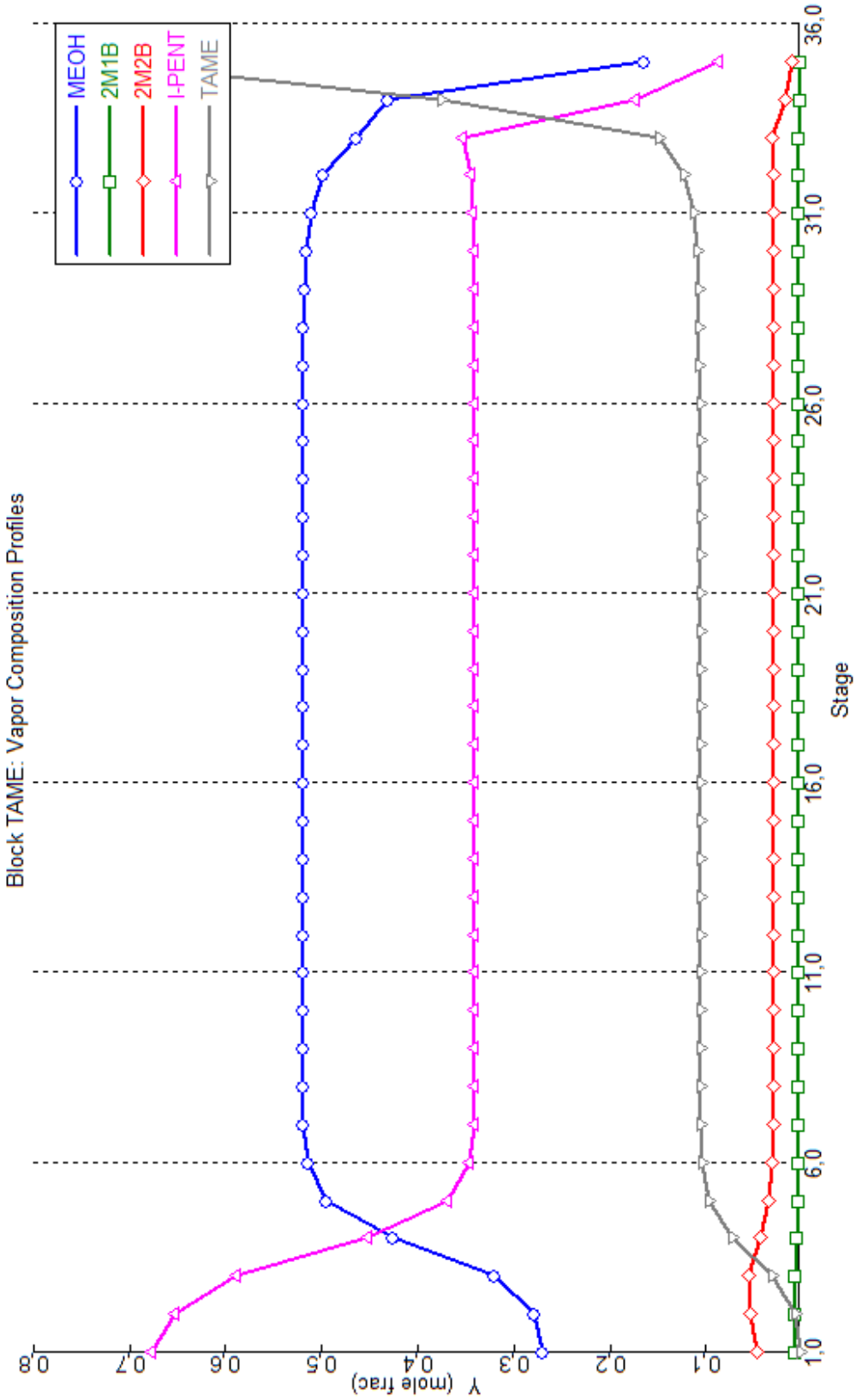


DIAGRAMA DE PROCESO «COLUMNA DE DESTILACIÓN CON REACTOR LATERAL ACOPLADO PARA PRODUCCIÓN DE TAME»

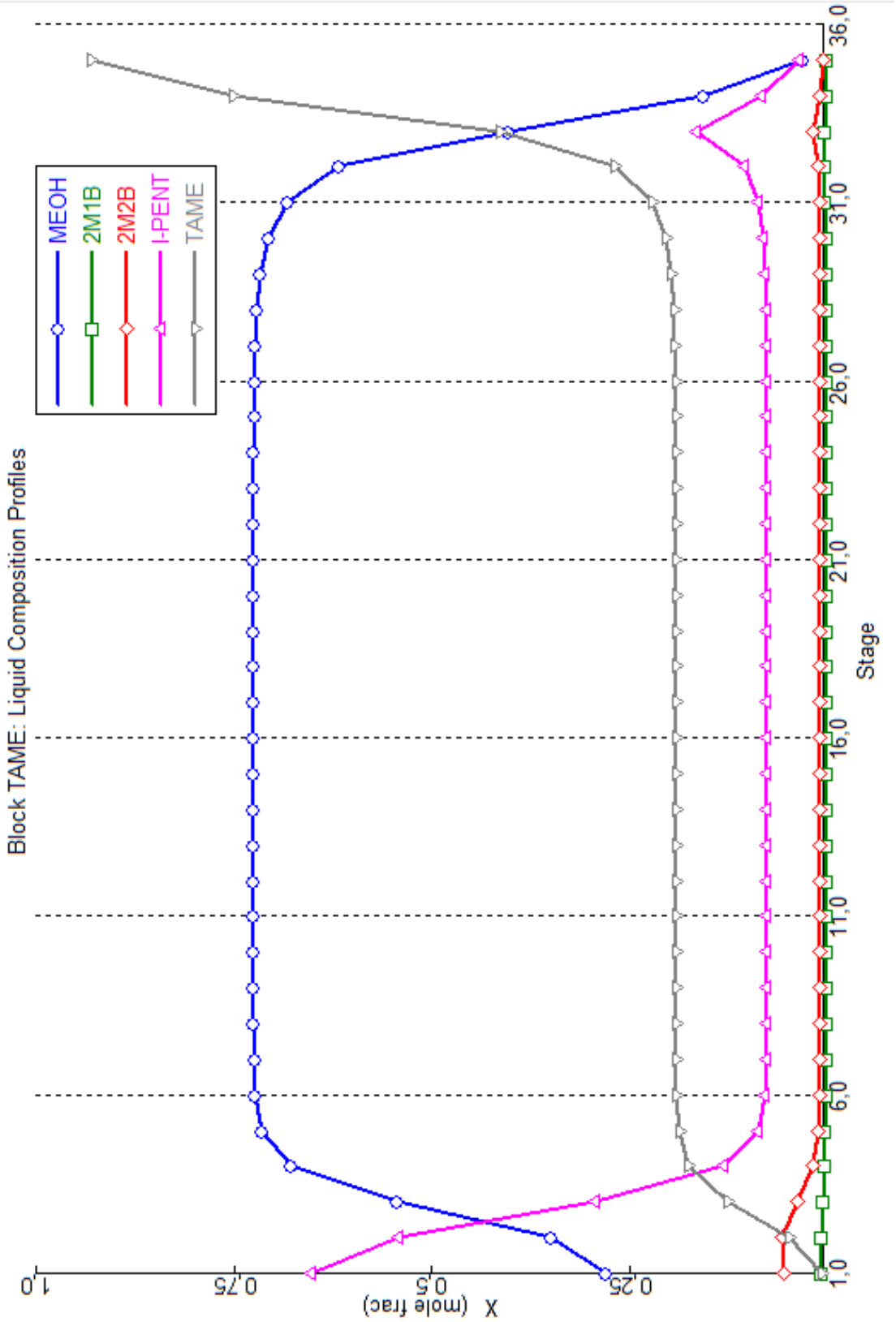
RESULTADOS COLUMNA DE DESTILACION

PERFLIES GENERALES COLUMNA DE DESTILACIÓN TAME					
Stage	**Temperatura K**	**Presión atm**	**Flujo de Calor cal/sec**	**Flujo Líquido kmol/hr**	**Flujo de Vapor kmol/hr**
1	344,578436	4,4411547	-4901254,7	1801,40152	0
2	346,172766	4,4411547	0	1672,07996	3002,33587
3	351,205435	4,4411547	0	1449,04114	2873,01431
4	359,817783	4,4411547	0	1366,76838	2606,5281
5	364,292558	4,4411547	0	1349,16701	2524,25534
6	365,452707	4,4411547	0	1348,81714	2516,65397
7	365,699873	4,4411547	0	1348,80711	2516,3041
8	365,750543	4,4411547	0	1348,80738	2516,29407
9	365,760865	4,4411547	0	1348,80748	2516,29434
10	365,762967	4,4411547	0	1348,8075	2516,29444
11	365,763395	4,4411547	0	1348,8075	2516,29446
12	365,763482	4,4411547	0	1348,80751	2516,29447
13	365,763499	4,4411547	0	1348,80751	2516,29447
14	365,763501	4,4411547	0	1348,80752	2516,29447
15	365,763501	4,4411547	0	1348,80754	2516,29448
16	365,7635	4,4411547	0	1348,80761	2516,29451
17	365,763499	4,4411547	0	1348,80778	2516,29458
18	365,763499	4,4411547	0	1348,80814	2516,29474
19	365,763499	4,4411547	0	1348,80895	2516,29511
20	365,763501	4,4411547	0	1348,81069	2516,29591
21	365,763507	4,4411547	0	1348,81439	2516,29765
22	365,763522	4,4411547	0	1348,82223	2516,30136
23	365,763555	4,4411547	0	1348,83874	2516,30919
24	365,763626	4,4411547	0	1348,87352	2516,32571
25	365,763777	4,4411547	0	1348,9467	2516,36048
26	365,764099	4,4411547	0	1349,1008	2516,43366
27	365,764799	4,4411547	0	1349,42598	2516,58776
28	365,766374	4,4411547	0	1350,11547	2516,91294
29	365,770171	4,4411547	0	1351,59199	2517,60244
30	365,78052	4,4411547	0	1354,81295	2519,07895
31	365,81503	4,4411547	0	1361,98852	2522,29992
32	365,973924	4,4411547	0	1375,8941	2529,47548
33	367,16264	4,4411547	0	2623,39733	2543,38106
34	385,010078	4,4411547	0	2593,75582	2393,39733
35	406,653253	4,4411547	5041850,21	180	2413,75582

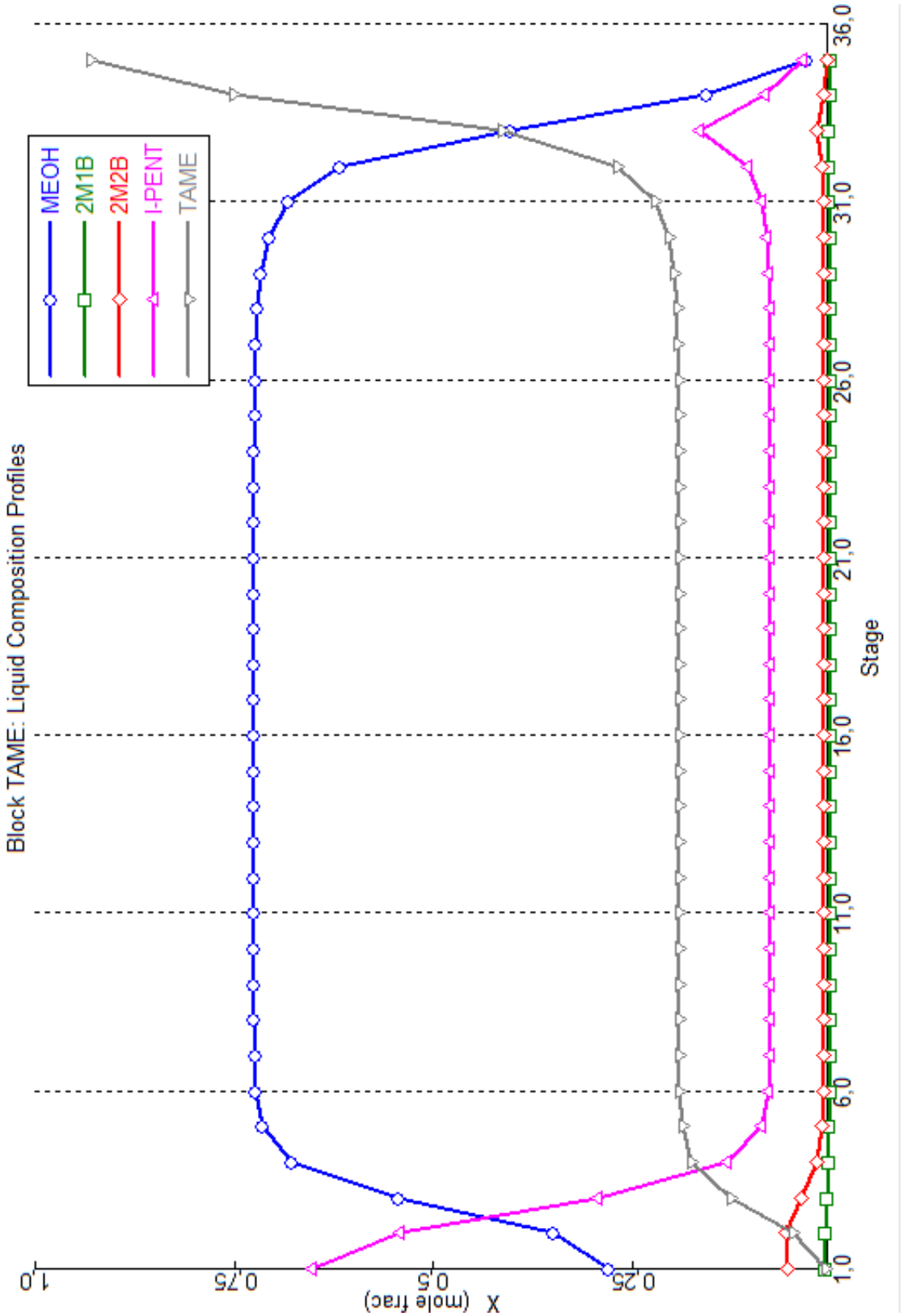
Stage	COMPOSICIÓN DE VAPOR EN LA COLUMNA TAME				
	MEOH	2M1B	2M2B	I-PENT	TAME
1	0,2700	0,0063	0,0459	0,6767	0,0011
2	0,2796	0,0066	0,0542	0,6520	0,0075
3	0,3197	0,0063	0,0553	0,5879	0,0309
4	0,4264	0,0050	0,0438	0,4515	0,0732
5	0,4955	0,0040	0,0338	0,3691	0,0976
6	0,5149	0,0037	0,0305	0,3466	0,1043
7	0,5191	0,0036	0,0298	0,3418	0,1058
8	0,5200	0,0036	0,0296	0,3408	0,1061
9	0,5202	0,0036	0,0295	0,3406	0,1061
10	0,5202	0,0036	0,0295	0,3406	0,1062
11	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
12	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
13	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
14	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
15	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
16	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
17	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
18	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
19	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
20	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
21	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
22	0,5202	0,0036	0,0295	0,3405	0,1062
23	0,5202	0,0036	0,0295	0,3406	0,1062
24	0,5202	0,0036	0,0295	0,3406	0,1062
25	0,5201	0,0036	0,0295	0,3406	0,1062
26	0,5200	0,0036	0,0295	0,3406	0,1063
27	0,5198	0,0036	0,0295	0,3406	0,1065
28	0,5193	0,0036	0,0296	0,3407	0,1069
29	0,5182	0,0036	0,0296	0,3409	0,1077
30	0,5160	0,0036	0,0296	0,3413	0,1095
31	0,5110	0,0036	0,0297	0,3423	0,1134
32	0,4989	0,0036	0,0300	0,3447	0,1228
33	0,4640	0,0037	0,0307	0,3528	0,1488
34	0,4308	0,0020	0,0178	0,1734	0,3760
35	0,1650	0,0011	0,0097	0,0867	0,7375


Block TAME: Vapor Composition Profiles
MEOH
2M1B
2M2B
I-PENT
TAME
Y (mole frac)
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
Stage
1,0
6,0
11,0
16,0
21,0
26,0
31,0
36,0

Stage	COMPOSICIÓN DE LÍQUIDO EN LA COLUMNA TAME				
	MEOH	2M1B	2M2B	I-PENT	TAME
1	0,2796	0,0066	0,0542	0,6520	0,0075
2	0,3484	0,0061	0,0561	0,5418	0,0476
3	0,5427	0,0037	0,0357	0,2917	0,1261
4	0,6773	0,0018	0,0168	0,1297	0,1744
5	0,7143	0,0012	0,0106	0,0867	0,1872
6	0,7222	0,0010	0,0091	0,0777	0,1899
7	0,7238	0,0010	0,0088	0,0759	0,1905
8	0,7241	0,0010	0,0088	0,0755	0,1906
9	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
10	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
11	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
12	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
13	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
14	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
15	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
16	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
17	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
18	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
19	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
20	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
21	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1906
22	0,7242	0,0010	0,0087	0,0754	0,1907
23	0,7241	0,0010	0,0087	0,0754	0,1907
24	0,7240	0,0010	0,0087	0,0755	0,1908
25	0,7238	0,0010	0,0087	0,0755	0,1909
26	0,7234	0,0010	0,0088	0,0756	0,1913
27	0,7224	0,0010	0,0088	0,0759	0,1919
28	0,7204	0,0010	0,0088	0,0764	0,1934
29	0,7160	0,0010	0,0089	0,0774	0,1966
30	0,7062	0,0011	0,0092	0,0798	0,2037
31	0,6827	0,0011	0,0097	0,0858	0,2207
32	0,6164	0,0013	0,0114	0,1033	0,2677
33	0,4034	0,0019	0,0169	0,1638	0,4141
34	0,1557	0,0010	0,0093	0,0830	0,7510
35	0,0303	0,0004	0,0040	0,0338	0,9315


Block TAME: Liquid Composition Profiles
MEOH
2M1B
2M2B
I-PENT
TAME
X (mole frac)
0,25
0,5
0,75
1,0
Stage
1,0
6,0
11,0
16,0
21,0
26,0
31,0
36,0

VALOR DE K (COEFICIENTE GENERAL DE TRANSFERENCIA DE MASA)					
Stage	**MEOH**	**2M1B**	**2M2B**	**I-PENT**	**TAME**
1	0,96562	0,95176	0,84738	1,03783	0,14114
2	0,80256	1,08364	0,96631	1,20349	0,15819
3	0,58903	1,69630	1,54627	2,01569	0,24456
4	0,62955	2,76871	2,61042	3,48110	0,42007
5	0,69371	3,33568	3,18643	4,25554	0,52159
6	0,71297	3,48600	3,34029	4,46037	0,54935
7	0,71720	3,51826	3,37337	4,50430	0,55535
8	0,71807	3,52489	3,38016	4,51333	0,55658
9	0,71825	3,52624	3,38155	4,51517	0,55683
10	0,71829	3,52651	3,38183	4,51554	0,55688
11	0,71829	3,52657	3,38189	4,51562	0,55689
12	0,71829	3,52658	3,38190	4,51563	0,55690
13	0,71829	3,52658	3,38190	4,51563	0,55690
14	0,71829	3,52658	3,38190	4,51563	0,55690
15	0,71829	3,52658	3,38190	4,51563	0,55690
16	0,71829	3,52658	3,38190	4,51563	0,55690
17	0,71830	3,52657	3,38189	4,51562	0,55690
18	0,71830	3,52656	3,38188	4,51560	0,55689
19	0,71830	3,52654	3,38186	4,51557	0,55689
20	0,71830	3,52649	3,38181	4,51549	0,55689
21	0,71831	3,52640	3,38172	4,51534	0,55687
22	0,71832	3,52620	3,38152	4,51502	0,55685
23	0,71835	3,52579	3,38111	4,51434	0,55679
24	0,71842	3,52492	3,38023	4,51292	0,55668
25	0,71856	3,52309	3,37840	4,50994	0,55644
26	0,71886	3,51924	3,37454	4,50366	0,55593
27	0,71949	3,51112	3,36640	4,49042	0,55486
28	0,72085	3,49394	3,34918	4,46247	0,55259
29	0,72382	3,45732	3,31248	4,40301	0,54777
30	0,73070	3,37788	3,23298	4,27484	0,53731
31	0,74851	3,19952	3,05498	3,99105	0,51387
32	0,80943	2,77525	2,63449	3,33857	0,45868
33	1,15043	1,94149	1,82260	2,15368	0,35924
34	2,76739	1,98284	1,91110	2,08909	0,50062
35	5,44086	2,46938	2,44783	2,56311	0,79180


Block TAME: Liquid Composition Profiles
MEOH
2M1B
2M2B
I-PENT
TAME
X (mole frac)
0,25
0,5
0,75
1,0
Stage
1,0
6,0
11,0
16,0
21,0
26,0
31,0
36,0

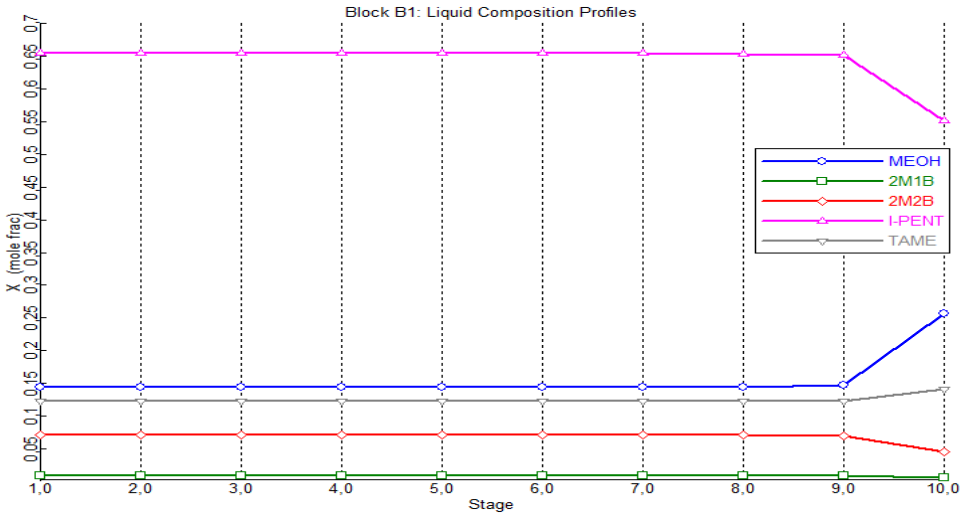
REACTOR POR ETAPAS LATERAL ACOPLADO AL DESTILADOR

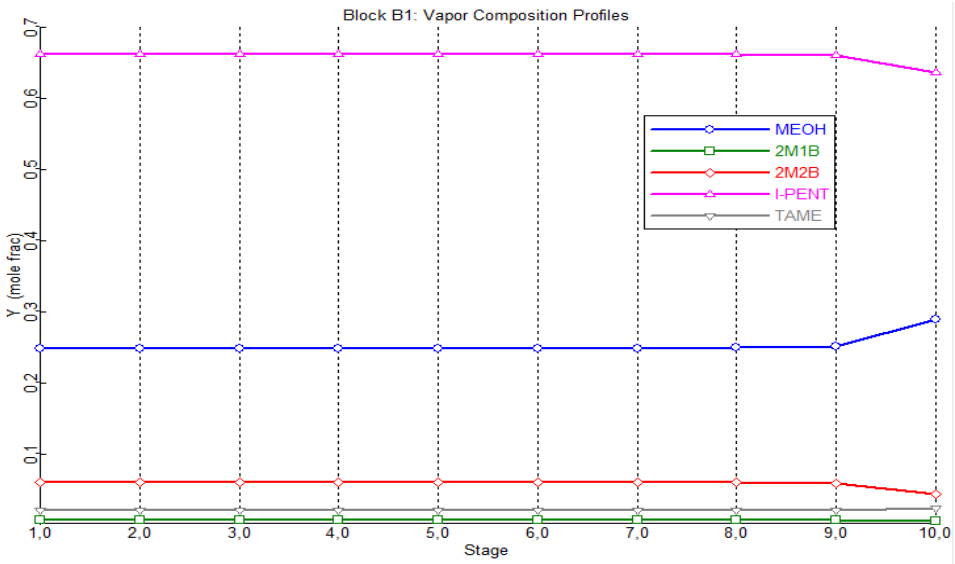
PERFLIES GENERALES COLUMNA DE DESTILACIÓN-REACTIVA C-1					
Stage	**Temperatura**	**Presión**	**Flujo de Calor**	**Flujo Liquido**	**Flujo Vapor**
	K	atm	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr
1	349,355643	4,4411547	0	1275,69175	43,4473865
2	349,355534	4,4411547	0	1275,69728	109,852777
3	349,355534	4,4411547	0	1275,69729	109,8558
4	349,355534	4,4411547	0	1275,69729	109,855802
5	349,355533	4,4411547	0	1275,69729	109,855802
6	349,355522	4,4411547	0	1275,69737	109,855804
7	349,355355	4,4411547	0	1275,6969	109,855793
8	349,35301	4,4411547	0	1275,64613	109,854261
9	349,326147	4,4411547	0	1273,6409	109,793869
10	349,566041	4,4411547	0	1397,48696	107,77646

CANTIDAD GENERADA DE CADA COMPONENTE (EN BASE MOL)					
Stage	**MEOH**	**2M1B**	**2M2B**	**I-PENT**	**TAME**
1	3,64636083	0,8852787	2,76108213	0	-3,6463608
2	0,00250785	0,00031258	0,00219526	0	-0,0025078
3	1,60E-06	1,12E-07	1,48E-06	0	-1,60E-06
4	2,19E-07	-2,67E-08	2,46E-07	0	-2,19E-07
5	5,50E-06	8,68E-07	4,63E-06	0	-5,50E-06
6	8,25E-05	1,45E-05	6,80E-05	0	-8,25E-05
7	0,00106826	0,00020636	0,0008619	0	-0,0010682
8	0,00961611	0,00245513	0,00716097	0	-0,0096161
9	0,01217797	0,02214126	-0,0099632	0	-0,0121779
10	-23,377502	-2,4452359	-20,932266	0	23,3775019

Stage	**COMPOSICIÓN DE VAPOR EN EL REACTOR**				
	MEOH	**2M1B**	**2M2B**	**I-PENT**	**TAME**
1	0,24915797	0,00817113	0,0604624	0,66139181	0,02081667
2	0,24915893	0,00817133	0,06046363	0,66138993	0,02081617
3	0,24915893	0,00817133	0,06046363	0,66138993	0,02081617
4	0,24915893	0,00817133	0,06046363	0,66138993	0,02081616
5	0,24915894	0,00817133	0,06046361	0,66138994	0,02081616
6	0,24915917	0,0081713	0,06046337	0,66139001	0,02081614
7	0,24916342	0,00817076	0,06045948	0,66139051	0,02081582
8	0,24924788	0,00816212	0,06039659	0,66137959	0,02081381
9	0,25100059	0,00802708	0,05940959	0,66069825	0,02086447
10	0,28990042	0,00592749	0,04386983	0,63582342	0,02447882

Stage	COMPOSICIÓN DE LIQUIDO EN EL REACTOR				
	MEOH	2M1B	2M2B	I-PENT	TAME
1	0,14371392	0,0086148	0,07119461	0,65371355	0,12276311
2	0,14371586	0,00861502	0,07119616	0,65371228	0,12276067
3	0,14371586	0,00861502	0,07119616	0,65371228	0,12276066
4	0,14371586	0,00861502	0,07119616	0,65371228	0,12276066
5	0,14371588	0,00861502	0,07119615	0,65371229	0,12276066
6	0,1437163	0,00861499	0,07119586	0,65371229	0,12276056
7	0,14372416	0,0086144	0,07119107	0,65371079	0,12275957
8	0,14387648	0,00860466	0,07111171	0,65364686	0,12276029
9	0,14700672	0,00844521	0,06980676	0,65152451	0,1232168
10	0,25699984	0,00556177	0,04589602	0,55095374	0,14058862





FLUJOS DEL PROCESO "DESTILACION-REACTOR LATERAL"				
Flujo Molar kmol/hr	**Flujo o corriente**			
	MEOH	**MEOH-ISO**	**PREFEED**	**TAME**
MEOH	205	335,834937	156	5,45971049
2M1B	0	7,93816127	9,55	0,07701342
2M2B	0	65,0543443	83,94	0,71480378
TAME	0	9,04261332	157	167,662621
IC5	0	783,064293	789,15	6,08585143
WATER	0	0	0	0
Fracción Mol				
MEOH	1	0,27964471	0,13047406	0,03033172
2M1B	0	0,00660998	0,00798735	0,00042785
2M2B	0	0,05416977	0,07020507	0,00397113
TAME	0	0,00752964	0,13131043	0,93145901
IC5	0	0,65204588	0,66002308	0,03381028
WATER	0	0	0	0
Propiedades Fisicoquímicas				
Total Flow kmol/hr	205	1200,93435	1195,64	180
Total Flow kg/hr	6568,6428	73302,4135	84534,5554	17800,7603
Total Flow l/min	157,55647	2024,94623	2309,73814	463,174797
Temperature K	377	344,578436	343	406,653253
Pressure atm	4,4411547	4,4411547	4,4411547	4,4411547
Vapor Frac	0	0	0	0
Liquid Frac	1	1	1	1
Solid Frac	0	0	0	0
Enthalpy cal/mol	-54902,183	-43366,83	-45512,092	-72689,744
Enthalpy cal/gm	-1713,4358	-710,49115	-643,71401	-735,03343
Enthalpy cal/sec	-3126374,3	-14466866	-15115577	-3634487,2
Entropy cal/mol-K	-51,618929	-102,64653	-117,85997	-153,17097
Entropy cal/gm-K	-1,6109691	-1,6816874	-1,6669881	-1,5488538
Density mol/cc	0,02168534	0,00988449	0,00862752	0,00647703
Density gm/cc	0,69484534	0,60332806	0,60998657	0,64053428
Average MW	32,04216	61,037819	70,702348	98,8931126
Liq Vol 60F l/min	137,809882	1885,64602	2138,50397	386,19377

11. Conclusiones y recomendaciones

Haciendo una comparación entre el proceso de Destilación-Reactiva (RD) de pág. 52 con el proceso de Reactor-Simple Acoplado a una Columna de Destilación (SR) de la pág. 85, observamos que se obtiene más producto terminado TAME en el SR (167.66 kmol/hr) que en el RD (87.46 kmol/hr), por lo que sería una opción en la gran industria del combustible a tomar en cuenta, por la reducción de equipos en este proceso.

Además del producto terminado TAME, se reducen áreas de fabricación por la disminución de equipos, es decir, se tendría más espacios en la industria y por lo tanto se aprovecharía para otras áreas.

Se recomienda que las cinéticas de reacción sean programadas en FORTRAN y no en ASPEN, crearlas como una subrutina para este último programa mencionado.

12. Nomenclatura

Nomenclatura

- r_f = Factor de multiplicación, 1 para reactivo y 0 para no reactivo.
- k_{fm} = Constante de velocidad de la reacción, mol/eq. s
- $k_{f1,ref}$ = Constante de velocidad de la 1ª reacción en referencia a la temperatura.
- K_{a_m} = Constante de equilibrio de reacción de la *m* reacción.
- a_i = Actividad del componente *i.*
- V_k, L_k, F_k = Flujo molar de vapor, líquido y alimentación en la etapa *k* respectivamente, mol/s.
- *D, B* = Flujo molar de destilado y fondo.
- x_D, x_B = Fracción mol de destilado y fondo.
- S^V_k, S^L_k = Flujo molar de vapor y liquido en las corrientes laterales en el plato k.
- Q_k = Perdida de calor en el plato k, J/s
- Q_r, Q_c = *Calor de rehervidor y condensado, J/s*
- *R* = Relación de reflujo
- *W* = Masa del catalizador, kg o equivalente.
- F_{Total} = Suma de todas las corrientes de alimentación, mol/s.
- *T* = Temperatura, K

- $H^R_{m,k}$ = Calor de reacción, para la *m* reacción y *k* etapa, J/mol.

- H_k, h_k, h_{fk} = Entalpía molar de vapor, líquido y alimentación para k etapa, J/mol.
- $R_{m,k}$ = Tasa de *m* reacción y *k* etapa, mol/s.
- M_k = Embotellamiento molar de *k* etapa, mol.
- ϵ_k = volumen o peso del catalizador en cada etapa.
- γ_{im} = Coeficiente estequiométrico del componente *i* en la reacción *m.*
- $x_{i,k}$, $y_{i,k}$ = Fracción mol líquido y vapor del componente *i* en el plato *k.*
- $z_{i,k}$ = Fracción mol de alimentación del componente *i* en el plato *k*
- $K_{i,k}$ = Constante de equilibrio vapor-líquido del componente *i* en el plato *k*.
- *kt/km* = Relación constante de equilibrio de adsorción.
- *TAME* = Ter Amil Metil Éter
- *RD* = Destilación Reactiva
- *g = Energía libre de Gibbs*
- *γ = Coeficiente de Actividad*
- *R = constante de los gases ideales*

13. Referencias bibliográficas

- J. A. Ojeda Nava, R. Baur and R. Krishna. *Combining Distillation and Heterogeneous Catalytic Reactors*, 2004, *Chemical Engineering Research and Design*, 82(A2): 160-166.

- William L. Luyben. *Plantwide Control for TAME Production Using Reactive Distillation*, 2004, Wiley InterScience: 1462-1472.

- William L. Luyben. *Planwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control*, 2002, Marcel Dekker Inc. 421 pp.

- William L. Luyben. *Distillation Design and Control Using Aspen Simulation*, 2002, Chapter 9 in *"Reactive Distillation"*: 232-250.

- National Industrial Chemicals Notification and Assessment Scheme. *t-Amyl methyl ether*, 2001, NA/878:3/52.

- Amit M. Katariya, Kannan M. Moudgalya, and Sanjay M. Mahajani. *Nonlinear Dynamic Effects in Reactive Distillation for Synthesis of TAME*, Ind. *Eng. Chem. Res*. 2006, 45, 4233-4242.

- Carlos Castillo Caro. *Diagrama de Fase para dos y tres Componentes*, Universidad de Chile, *Departamento de Química.*

- Moore, C. F. Selection of controlled and Manipulated Variables, Chapter 8 in Practical Distillation Control W. L. Luyben, ed., Van Nostrand Reinhold, Ney York (1992).

14. Programa o cronograma.

Actividad	Semana															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
A) Investigar cinética de reacciones y EVL para TAME																
B) Implementar el esquema convencional de producción de TAME en un simulador																
C) Implementar la columna de destilación reactiva para la producción de TAME																
D) Implementar el uso de reactores laterales acoplados con columnas de destilación para la producción de TAME																

15. Anexos

Tabla G.1: Parámetros de subgrupo de EVL-UNIFAC

Grupo principal		Subgrupo	k	Rk	Qk	Ejemplos de moléculas y sus grupos constituyentes	
1	"CH2"	CH3	1	0.9011	0.848	n-Butano:	2CH3,2CH2
		CH2	2	0.6744	0.540	Isobutano:	3CH3,ICH
		CH	3	0.4469	0.228	2,2-Dimetil-Propano	4CH3,1C
		C	4	0.2195	0.000		

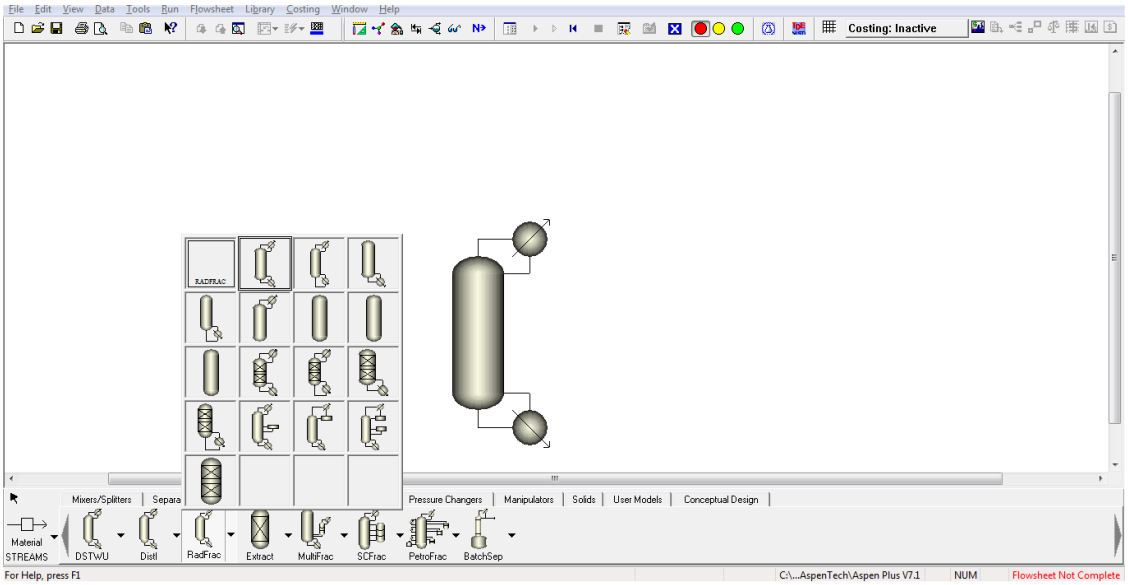
Tabla G.2: Parámetros de interacción de EVL-UNIFAC, a_{mk}, en kelvins.

		1	3	4	5	7	9	13	15	19
1	CH_2	0.00	61.13	76.50	986.50	1318.00	476.40	251.50	255.70	597.00
3	ACH	-11.12	0.00	167.00	636.10	903.80	25.77	32.14	122.80	212.50
4	$ACCH_2$	-69.70	-146.8	0.00	803.20	695.00	-52.10	213.10	-49.29	6096.0
5	OH	156.40	89.60	25.82	0.00	353.50	84.00	28.06	42.70	6.712
7	H_2O	300.00	362.30	377.60	-229.10	0.00	-195.40	540.50	168.00	112.60
9	CH_2CO	26.76	140.10	365.80	164.50	472.50	0.00	-103.6	-174.2	481.7
13	CH_2O	83.36	52.13	65.69	237.7	-314.7	191.10	0.00	251.50	-18.51
15	CNH	65.33	-22.31	223.00	-150.00	-448.20	394.60	-56.80	0.00	147.10
19	CCN	24.82	-22.97	-138.4	185.40	242.80	-287.5	38.81	-108.5	0.00

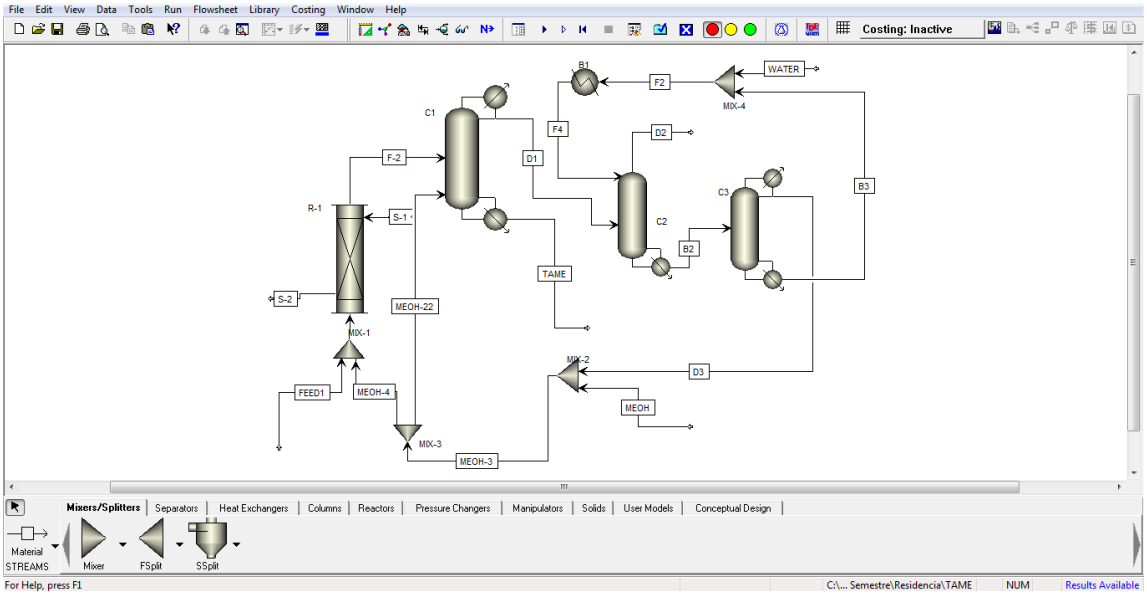
H.K. Hansen, P. Rasmussen, Aa. Fredenslund, M. Schiller y J. Gmehling, IEC Research, vol. 30, pp. 2352-2355, 1991.

16. Algoritmo ASPEN

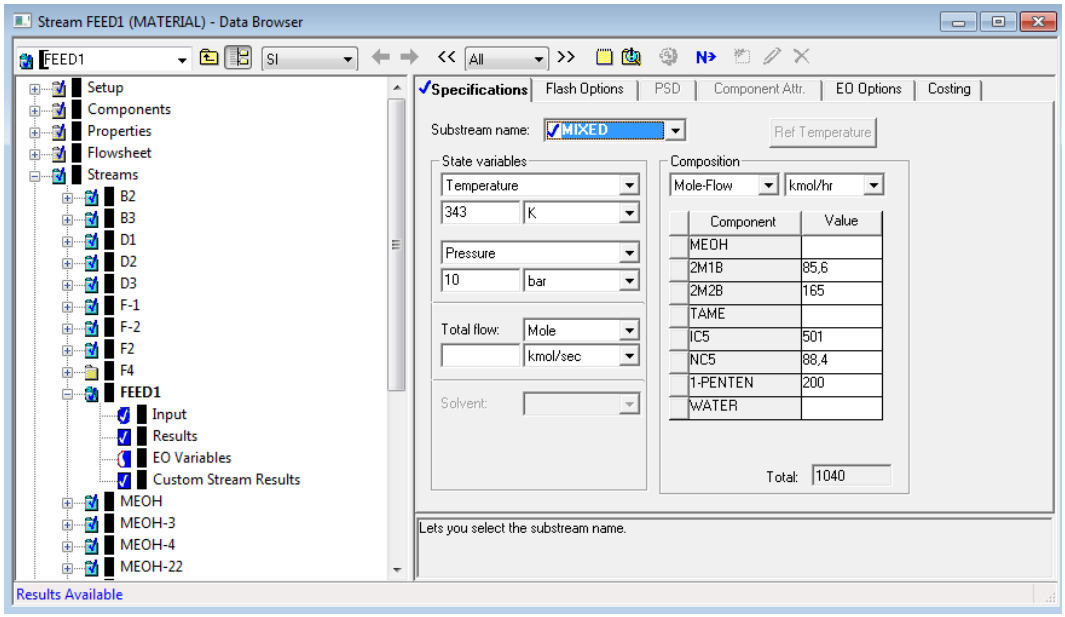
Al abrir el ASPEN, seleccionar en las pestañas de abajo **Columns** y la pestaña **RedFrac** e insertarlo.



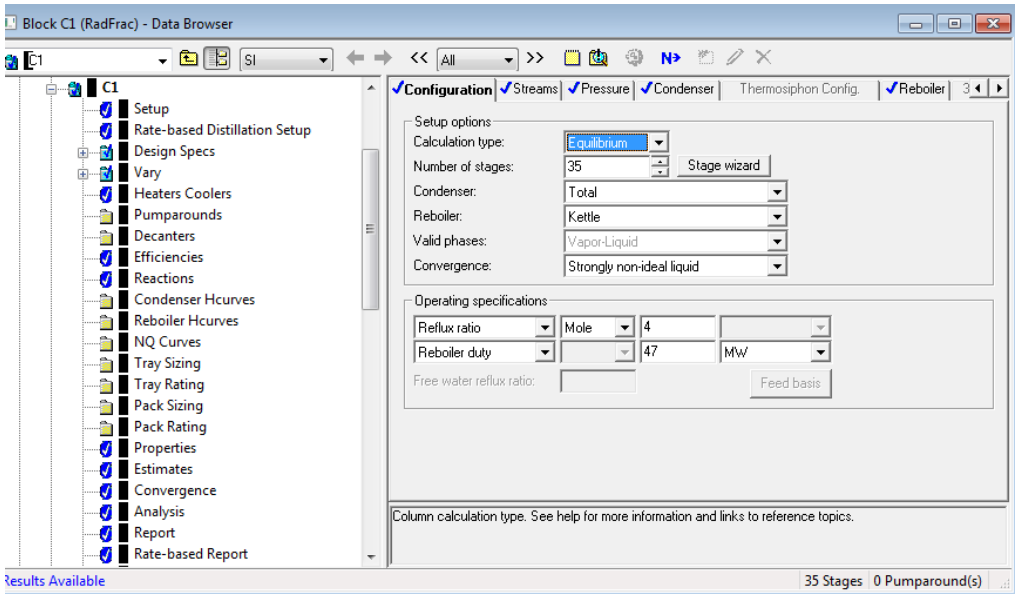
Los **Streams** sirven de conectores de flujos para unirlos con los **Blocks** que son los equipos y así, formar todo el diagrama de proceso. Formar el diagrama de proceso de la figura de abajo.



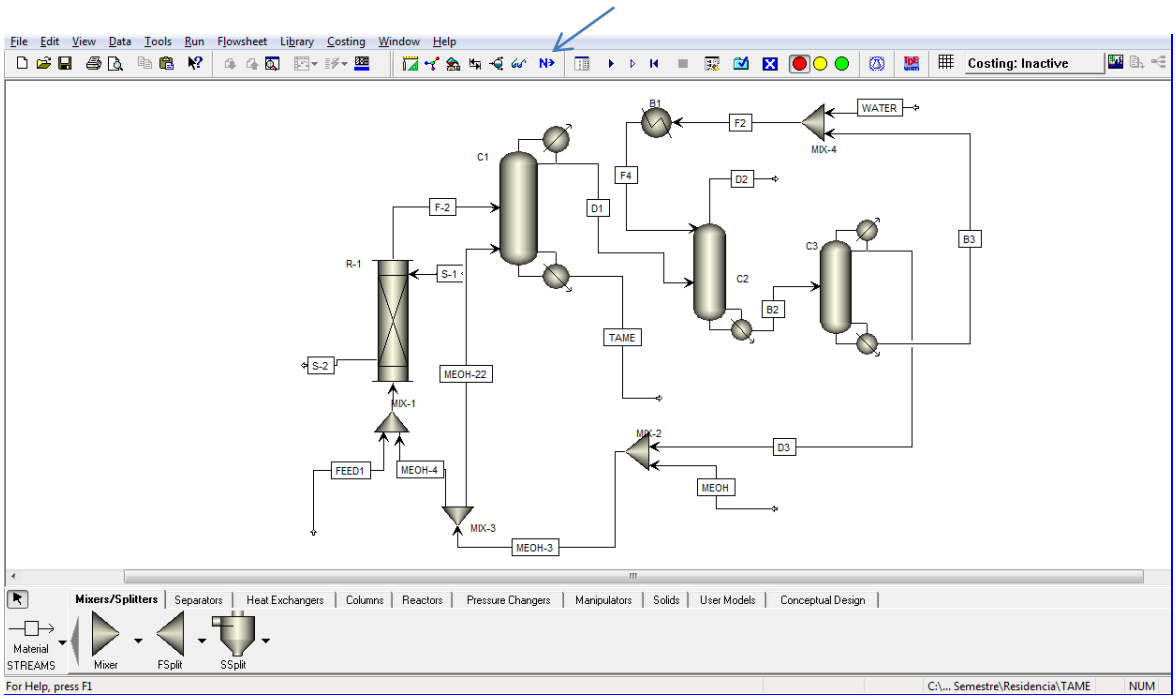
En los **Streams** de alimentación, **FEED1** y **MEOH4**, introducir la cantidad de reactivo que entrara al proceso, dando doble click en el nombre del **Stream** para que se abra la siguiente ventana.

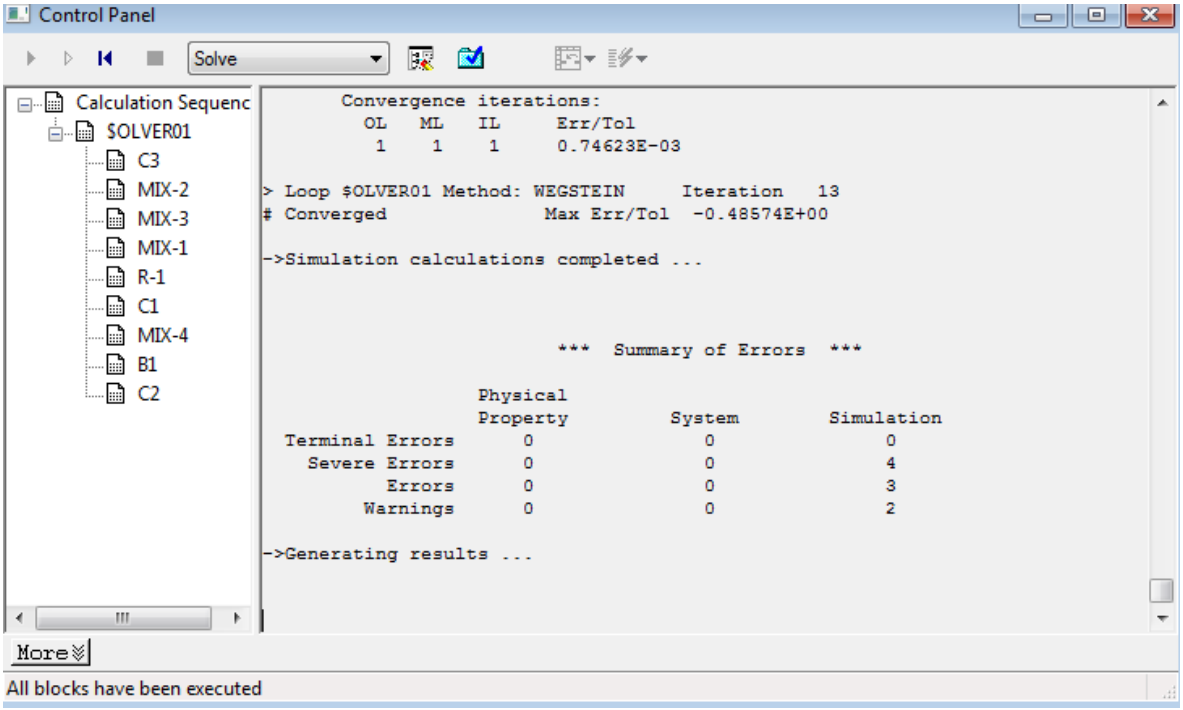


Dar doble click a cada uno de los **Blocks** y luego, introducir cada uno de las variables que requiera cada uno de los equipos, por ejemplo presión, temperatura. En el caso de destilador-reactivo las variables que se añadirán son masa de catalizador, cinética de reacción, reflujo, destilado, etapas, etc.

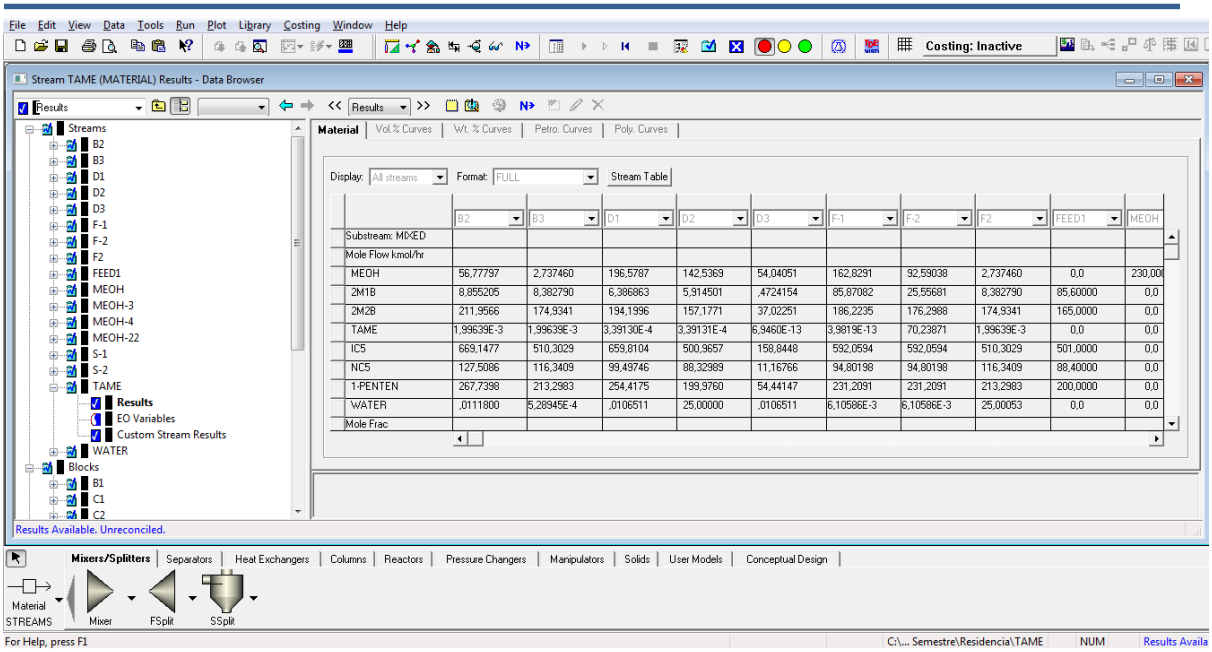


Por último se corre el programa con el comando **Run**:





Por último, se ven los resultados en **Check Results** y se pueden analizar todos lo resultados y perfiles en cada etapa del proceso, con todsas las variables del simulador.


File Edit View Data Tools Run Plot Library Costing Window Help
Costing: Inactive
Stream TAME (MATERIAL) Results - Data Browser
Results
Streams
B2
B3
D1
D2
D3
F-1
F-2
F2
FEED1
MEOH
MEOH-3
MEOH-4
MEOH-22
S-1
S-2
TAME
Results
EO Variables
Custom Stream Results
WATER
Blocks
B1
C1
C2
Material
Vol.% Curves
Wt. % Curves
Petro. Curves
Poly. Curves
Display: All streams
Format: FULL
Stream Table
Substream: MIXED
Mole Flow kmol/hr
MEOH 56,77797 2,737460 196,5787 142,5369 54,04051 162,8291 92,59038 2,737460 0,0 230,000
2M1B 8,855205 8,382790 6,386863 5,914501 ,4724154 85,87082 25,55681 8,382790 85,60000 0,0
2M2B 211,9566 174,9341 194,1996 157,1771 37,02251 186,2235 176,2988 174,9341 165,0000 0,0
TAME 1,99639E-3 1,99639E-3 3,39130E-4 3,39131E-4 6,9460E-13 3,9819E-13 70,23871 1,99639E-3 0,0 0,0
IC5 669,1477 510,3029 659,8104 500,9657 158,8448 592,0594 592,0594 510,3029 501,0000 0,0
NC5 127,5086 116,3409 99,49746 88,32989 11,16766 94,80198 94,80198 116,3409 88,40000 0,0
1-PENTEN 267,7398 213,2983 254,4175 199,9760 54,44147 231,2091 231,2091 213,2983 200,0000 0,0
WATER ,0111800 5,28945E-4 ,0106511 25,00000 ,0106511 6,10586E-3 6,10586E-3 25,00053 0,0 0,0
Mole Frac
Results Available. Unreconciled.
Mixers/Splitters
Separators
Heat Exchangers
Columns
Reactors
Pressure Changers
Manipulators
Solids
User Models
Conceptual Design
Material STREAMS
Mixer
FSplit
SSplit
For Help, press F1
C:\... Semestre\Residencia\TAME
NUM
Results Availa