



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA



Licenciatura en Ingeniería Química

TESIS

Título de Tesis:

**“SIMULACIÓN DE UN REACTOR PARA LA PRODUCCIÓN DE P-XILENO
BASADO EN EL SOFTWARE ASPEN HYSYS V.8.8.”**

que presenta:

EMILI LÓPEZ QUINTANA

Para obtener el Título de:

LICENCIATURA EN INGENIERÍA QUÍMICA

Asesor de tesis:

DR. FRANCISCO MANUEL PACHECO AGUIRRE

FAC. INGENIERÍA QUÍMICA

H. Puebla de Z. a 22 de abril de 2022

REGISTRO DE TESIS



Oficio No. FIQ/AC/010/2022
Asunto: Registro de Tema de Tesis

C. EMILI LÓPEZ QUINTANA
PASANTE DE LA LICENCIATURA EN
INGENIERÍA QUÍMICA
P R E S E N T E:

Por medio del presente me permito informarle, de la aprobación del Registro de Tema de Tesis de la Licenciatura en Ingeniería Química cuyo título es el siguiente:

“SIMULACIÓN DE UN REACTOR PARA LA PRODUCCIÓN DE P-XILENO BASADO EN EL SOFTWARE ASPEN HYSYS V.8.8.”

Con el siguiente contenido:

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO 1	ANTECEDENTES
CAPÍTULO 2	METODOLOGÍA
CAPÍTULO 3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES
BIBLIOGRAFÍA

Director de Tesis: Dr. Francisco Manuel Pacheco Aguirre.

Lo cual me permito comunicarle para su conocimiento y fines consiguientes aclarando que la vigencia de este tema será **UNICAMENTE POR UN AÑO**.

Atentamente
"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"
H. Puebla de Z., a 12 de enero de 2022

Dra. Valeria Jordana González Coronel
Secretaria Académica



C.c.p. Director de Tesis: Dr. Francisco Manuel Pacheco Aguirre
C.c.p. Archivo.

Facultad
de Ingeniería
Química

Av. San Claudio s/n, Col. San
Manuel, Ciudad Universitaria,
Puebla, Pue. C. P. 72590
01 (222) 229 55 00
Exts. 7250 y 7251

DEDICATORIA

A mis padres, el fruto de este trabajo también es de ellos.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente, a Dios porque gracias a Él son todos mis logros, en los momentos difíciles siempre estuvo conmigo y me permitió cumplir mis objetivos.

A mi padre el Ing. Néstor López Leyva y mi madre María de Jesús Quintana porque siempre dieron lo mejor para apoyarme en este camino del aprendizaje y me animaron para ser mejor cada día, los amo con todo mi corazón y les agradezco todo lo que me han enseñado.

A mi hermano el Ing. Luis Enrique Quintana porque sus consejos para concluir mi carrera.

A mi asesor el Dr. Francisco Manuel Pacheco por sus consejos de superarme y su gran paciencia para poder concluir satisfactoriamente mi trabajo de tesis.

A mi bisabuela Estela Ofelia García porque estuvo pendiente de mí y me permitió vivir en su casa mientras estudiaba la universidad, y me hubiera gustado que estuviera conmigo para celebrar este gran momento, siempre estaré agradecida por su apoyo, cuidado y amor. Q.E.P.D.

A mis tías Rosalinda Quintana y Jenisse Quintana porque siempre estuvieron apoyándome, cuidándome, aconsejándome y dándome amor cuando lo necesité mientras estuve lejos de casa, me acogieron como su hija y siempre estaré agradecida.

A mis abuelos Enrique Quintana y Evangelina Ávalos por apoyarme siempre que lo he necesitado, por orar por mí y animarme a seguir adelante.

A mi tía Clara Estela Quintana porque siempre me ha apoyado y aconsejado en los momentos más difíciles de mi vida.

A mi amiga Fátima Aranda por ser parte de este aprendizaje y por ser una persona sincera cuando lo necesité, a sus padres que también me brindaron apoyo, amor, ánimos; me siento muy feliz de haberlos conocido.

ÍNDICE

Resumen	1
Introducción.....	1
<i>CAPÍTULO 1</i>	<i>3</i>
1.1 Antecedentes del proyecto.....	3
1.2 Síntesis de Antecedentes	8
1.3 Planteamiento del problema	16
1.4 Justificación	16
1.5 Hipótesis	17
1.6 Objetivos generales y específicos.....	17
1.6.1 Objetivo general:	17
1.6.2 Objetivos específicos:.....	17
<i>CAPÍTULO 2</i>	<i>18</i>
2.1 Cinética.....	18
2.2 Balance de materia.....	19
2.3 Tipo de reactor.....	21
2.4 Dimensionamiento del reactor.....	22
2.5 Catalizador ZSM-5 modificado	23
2.6 Modelo termodinámico.....	23
2.7 Servicios auxiliares.....	25
2.8 Integración de calor	25
<i>METODOLOGÍA</i>	<i>27</i>
3.1 Metodología general y específica.....	27

3.1.1 Metodología general	27
3.1.2 Metodología específica.....	29
<i>RESULTADOS Y DISCUSIÓN</i>	39
4.1 Diagrama DFP del proceso propuesto	39
4.2 Diagrama DFP del reactor propuesto	41
4.3 Análisis de sensibilidad	44
4.4 Simulación del reactor	45
4.4.1 Selección de componentes.....	45
4.4.2 Selección de modelo.....	46
4.4.3 Cinética.....	46
4.5 Corriente de alimentación.....	50
4.6 Dimensiones del reactor	51
4.7 Catalizador.....	51
4.8 Productos	51
4.9 Validación de la propuesta	54
<i>CONCLUSIONES</i>	57
<i>REFERENCIAS</i>	58
<i>ANEXO A</i>	61
<i>ANEXO B</i>	63

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Estructura molecular de los isómeros del xileno (Sevilla, 2019).....	7
Figura 2. Diagrama de flujo del reactor (Quintana, 2022).	19
Figura 3. Zeolita ZSM-5 (Alibaba, 2021).....	23
Figura 4. Los primeros pasos para seleccionar métodos de propiedad física (Carlson, 1996)..	24
Figura 5. Metodología para la simulación de un reactor para la producción de p-Xileno basado en el software Aspen HYSYS V.8.8. (Quintana, 2022).	28
Figura 6. Metodología para sintetizar las operaciones unitarias involucradas en el proceso de producción de p-Xileno (Quintana, 2022).....	30
Figura 7. Metodología para desarrollar un diagrama DFP del proceso general para la producción de p-Xileno (Quintana, 2022).....	32
Figura 8. Metodología propuesta por Walas para el desarrollo del DFP (Quintana, 2022)	34
Figura 9. Propuesta del diseño de sistema de reacción basado en los antecedentes del proceso (Quintana, 2022).	36
Figura 10. Validación del proceso propuesto en el software Aspen HYSYS V.8.8 (Quintana, 2022).....	38
Figura 11. Diagrama DFP de producción de p-Xileno (Quintana, 2022).....	40
Figura 12. DFP del reactor PBR (Quintana, 2022).	43
Figura 13. Análisis de fracción molar de p-Xileno respecto al cambio de presión y temperatura (Quintana, 2022).....	45
Figura 14. Selección de componentes para la simulación del reactor (Quintana, 2022).....	46
Figura 15. Selección de modelo termodinámico (Quintana, 2022).....	46
Figura 16. Reacciones en el simulador (Quintana, 2022).....	47
Figura 17. Cinética de la reacción 1 (Quintana, 2022).....	47
Figura 18. Cinética de la reacción 2 (Quintana, 2022).....	48
Figura 19. Cinética de la reacción 3 (Quintana, 2022).....	48
Figura 20. Cinética de la reacción 4 (Quintana, 2022).....	49
Figura 21. Cinética de la reacción 5 (Quintana, 2022).....	49
Figura 22. Reactor PBR (Quintana, 2022).	50
Figura 23. Corriente de entrada al reactor (Quintana, 2022).....	50

Figura 24. Dimensionamiento del PBR (Quintana, 2022).....	51
Figura 25. Datos del catalizador (Quintana, 2022).....	51
Figura 26. Condiciones y flujos molares a la salida del reactor (Quintana, 2022).....	52
Figura 27. Composiciones de entrada y salida del reactor (Quintana, 2022).....	52
Figura 28. Flujo de las corrientes de entrada y salida (Quintana, 2022).	53
Figura 29. Corriente de energía en el reactor (Quintana, 2022).	53
Figura 30. Fracción másica de los reactivos y el p-Xileno (Quintana, 2022).	54

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Resultados comparativos de impactos económicos y ambientales para la propuesta del proceso y el proceso existente.	5
Tabla 2. Propiedades físicas y termodinámicas de los isómeros del xileno.	8
Tabla 3. Datos de diferentes artículos del proceso de producción de p-Xileno.	9
Tabla 4. Datos de reactores utilizados en el proceso de producción de p-Xileno.	11
Tabla 5. Datos de diferentes artículos sobre catalizadores usados en el reactor para el proceso de producción de p-Xileno.	12
Tabla 6. Datos de columnas de destilación utilizadas en el proceso de producción de p-Xileno.	13
Tabla 7. Datos del proceso de producción de p-Xileno de bibliografías especializadas.....	14
Tabla 8. Balance de materia de cada componente.....	20
Tabla 9. Número de grados de libertad.....	21
Tabla 10. Condiciones de temperatura, presión y flujo a la entrada del reactor de los 3 artículos más sobresalientes de la investigación.	44
Tabla 11. Temperatura, flujo y fracción molar de p-Xileno a 3 y 4 bar.....	44
Tabla 12. Síntesis de los resultados de los artículos sobresalientes.	54
Tabla 13. Comparación de espacio-tiempo, relación de alimentación, selectividad de p-Xileno, Conversión de tolueno y metanol.	56
Tabla 14. Número de identificación típico.	62
Tabla 15. Información de equipos.	63

Resumen

En este trabajo se propone el diseño y la validación por simulación de un reactor para una planta de producción de p-Xileno por metilación de tolueno con la ayuda del programa Aspen HYSYS V.8.8. El trabajo parte de una síntesis de datos teóricos y experimentales que permitan valorar y analizar los principales criterios de diseño y parámetros de operación del proceso, complementando un diagrama de flujo de proceso (DFP) estandarizado que permita analizar el proceso como un sistema total, sin embargo el objetivo prioritario establece el sistema de reacción, lo que finalmente será validado, comparado y discutido contra las referencias publicadas con la validación de la propuestas en el software antes mencionado.

Introducción

El xileno es un líquido incoloro de olor dulce que se inflama fácilmente, existen 3 isómeros de xileno y esto depende de la posición de los grupos metilo en el anillo del benceno: o-Xileno, m-Xileno y p-Xileno. El isómero más importante es el p-Xileno debido a la demanda creciente a nivel industrial, es necesario adquirir la pureza requerida para la obtención de sus productos. Este es la materia prima para producir Polietilentereftalato (PET).

Se produce por la alternativa económica, sus características de resistencia química lo hacen un material importante. La aplicación común es para botellas y bolsas de plástico, esto tiene criterios negativos, según (Fundación AQUAE, 2020) su desintegración puede tardar hasta 1000 años y las bolsas 150 años. Por otro lado, la mejor aplicación es en aparatos electrónicos que tienen películas de PET en sus capacitores, telas, refuerzo de llantas, cerdas de brochas, fabricación de maquinarias, artículos de iluminación y otros.

Según The observatory of Economic Complexity los mayores exportadores de p-Xileno a nivel mundial son: (1) Corea del Sur, (2) Japón, (3) India, (4) Singapur, (5) Taiwán, entre otros. Cabe destacar que México no ocupa ningún lugar ya que éste no produce p-Xileno en el país, los mayores importadores de p-Xileno a nivel mundial son: (1) China, (2) Taiwán, (3) Indonesia,

(4) India, (5) México y algunos países más. México importa alrededor de 590 millones de dólares lo que equivale al 2.58% de importación a nivel mundial. (Arias, 2020)

Para esto se requieren procesos de producción de p-Xileno lo cual existen diferentes tecnologías de separación e isomerización de xilenos, se pueden dividir en 3 grupos principales: (1) cristalización fraccionada, (2) adsorción y (3) cristalización/adsorción híbrida.

La cristalización fraccionada fue la primera y durante muchos años la única técnica comercial para separar p-Xileno, se han comercializado varios procesos de cristalización a lo largo de los años, por ejemplo, Chevron, Krupp, Amoco, ARCO.

La Adsorción constituye el segundo y más reciente método de separación y producción de alta pureza, se utiliza absorbentes como los tamices moleculares para producir p-Xileno por adsorción preferencial de una corriente mixta de xileno.

En 1994, IFP y Chevron anunciaron el desarrollo del proceso híbrido Eluxyl que combina las mejores características de adsorción y cristalización. En este proceso, una unidad de adsorción produce primero un alto concentrado para la corriente de xileno (90–95%), es decir, más purificado en un pequeño cristizador de una sola etapa, el filtrado se recicla de nuevo a la unidad de adsorción. Para ser ultrapuro (>99.9%) el p-Xileno se puede producir de manera fácil y económica con este esquema tanto para la modernización de las unidades de cristalización existentes como para las unidades de base. Este proceso se ha demostrado con éxito en el campo. (Daramola, *et. al.*, 2009).

En este trabajo se desarrolló el proceso de producción de p-Xileno por metilación de tolueno en lugar de la técnica convencional más costosa de separación basada en cristalización y adsorción.

CAPÍTULO 1

1.1 Antecedentes del proyecto

Las mezclas de xilenos, con contenido de p-Xileno es conocida desde hace más de 90 años, pero tomó importancia industrial sólo desde los años 60 del siglo pasado, cuando comenzó a ser comercializado por Unión Carbide Corporation (UCC) bajo el nombre genérico de "Parilenos" (Instituto Petroquímico Argentino, 2016)

En 1940 observaciones de Michael Mojzesz Szwarc arribaron a un producto proveniente de la descomposición térmica de disolventes comunes (toluenos y xilenos) a temperaturas superiores a 1000 °C.

En el año 1965, el trabajo desarrollado por William Franklin Gorham y Unión Carbide Corporation (UCC) alcanzó un punto de inflexión con el anuncio de la disponibilidad de un nuevo sistema de recubrimiento polimérico. 'Parilenos' era el término usado para describir tanto una nueva familia de polímeros más un método de vacío único para aplicarlas.

En 1989 Bhatia (*et. al.*) desarrollaron un modelo de simulación de estado estacionario de únicamente el reactor catalítico de isomerización de xileno, usando como catalizador de silica-alúmina y como modelo matemático, la técnica de Runge-Kutta, como resultado se obtienen las ecuaciones 1 y 2 para obtener perfiles de concentración, temperatura y presión (Bhatia, Chandra, & Das, 1989):

$$F(N) = f(X_P, X_O, X_H, X_{EBZ}, X_{TMB}, T, P, X_T) \quad (1)$$

$$\frac{dP}{dz} = f(x_P, x_O, x_H, x_{EBZ}, x_{TMB}, T, P, X_T) \quad (2)$$

Donde $N=1, \dots, 5$.

Las condiciones de frontera son: $z=0$, $x_P = 0$, $x_O = 0$, $x_H = 0$, $x_{EBZ} = 0$, $x_{TMB} = 0$, $x_T = 0$, $T = T_{in}$ y $P=P_{in}$, donde T_{in} y P_{in} son temperatura y presión a la entrada del reactor respectivamente.

Posteriormente en 1991 Cisneros realizó una simulación como la que desarrolló Bathia (*et. al.*) simulando un reactor catalítico para la isomerización de xileno, empleando datos de diseño de

dos reactores que PEMEX operaba en la planta petroquímica de la Cangrejera y Cosoleacaque, Veracruz; el catalizador utilizado fue silica-alúmina y platino, usando el simulador de procesos HySim consiguiendo mejores resultados que los que obtuvo Bathia, ya que no contempló el sistema reaccionante en su totalidad, y los datos obtenidos son significativamente irreales. (Martinez, 1991).

Minceva, Gomes, Meshko & Rodríguez (2008) prosiguieron con su investigación sobre un reactor de lecho móvil simulado (SMBR) para la isomerización y separación de p-Xileno, proponiendo la adsorción operando en fase líquida a temperaturas entre 453 y 573°K, se consideraron dos tipos de alimentación de xilenos: donde la composición de p-Xileno está por encima de su composición de equilibrio de reacción y la otra por debajo; teniendo como resultado usar reactores más pequeños de los que se propuso, trabajar con temperaturas más bajas. Cuando p-Xileno en la alimentación está por encima de su composición de equilibrio de reacción, el valor de la desviación de equilibrio podría alcanzar hasta 1.75 de lo contrario la desviación de equilibrio está por debajo de 1.

Daramola, *et. al.*, (2009) realizaron una investigación que se centra en el desarrollo de membranas de zeolita para la separación y producción de p-Xileno, el precursor para la producción de ácido tereftálico, para el cual la demanda mundial actual de p-Xileno es de alrededor del 86% de la producción.

Para el 2013 la revista de Industrial & Engineering Chemistry Research publicó una investigación que desarrollo Tahir (*et. al.*) la metilación de tolueno para producir p-Xileno que contiene una columna de destilación reactiva para la separación, la producción de p-Xileno aumenta al usar como catalizador la zeolita ZSM-05 modificado con Magnesio, simulando en Aspen Plus se obtiene como producto p-Xileno al 99.7% con una conversión total del 83% de tolueno a p-Xileno.

Goncalves & Rodríguez (2015) estudiaron un reactor de lecho móvil simulado (SMBR) para la producción de p-Xileno como parte de una propuesta para modificar un complejo aromático

existente con el fin de aumentar la producción de benceno y p-Xileno. El complejo propuesto incluye una unidad de cristalización de una sola etapa para purificar aún más las corrientes con alto contenido de p-Xileno a partir de una desproporción de tolueno y dichas unidades SMBR. Los resultados muestran aumentos significativos de benceno y p-Xileno en ambos casos.

Liu, *et. al.*, (2018) desarrollaron el proceso de producción intensificado de p-Xileno a través de la alquilación de tolueno y metanol. La conversión se propone y simula usando Aspen Plus V8.4. Se encuentra que la conversión de metanol podría alcanzar el 98% con una selectividad de p-Xileno del 92% a través del aumento de temperatura de reacción de 442.5 °C y la presión a 4 bar. Las evaluaciones comparativas demuestran que el proceso propuesto es más eficiente que el proceso existente basado en criterios económicos y métricos ambientales. El TAC total se reduce en un 4.71% y las emisiones de CO₂ se reducen, disminuyen en un 40.2% en comparación con el proceso existente sin integración de calor. En la Tabla 1 se reportan los resultados del mismo.

Tabla 1. Resultados comparativos de impactos económicos y ambientales para la propuesta del proceso y el proceso existente.

Tipo	Antes de la integración de calor		Después de la integración de calor		Ahorros
	Proceso existente	Proceso propuesto	Proceso existente	Proceso propuesto	
Inversión de Capital Total TCI (k\$)	15731.3	13013.8	16121.5	12668.2	-
Costo Operativo Total TOC (k\$/año)	25661.4	20068.8	23814.9	16945.0	
Costo Anual Total TAC (k\$/año)	206866.2	200367.7	205149.7	197128.7	4.71%

Energía de calefacción (kJ/h)	3.404x10e8	2.678x10e8	2.494x10e8	1.964x10e8	-
Energía de enfriamiento	3.305x10e8	2.616x10e8	2.396x10e8	1.902x10e8	-
Emisión de CO ₂ (t _{co2} /t p-Xileno)	1.54	1.25	1.15	0.92	40.2%
Pérdida de tolueno (%)	1.18	0.06	-	-	-

T son toneladas

Fuente: (Liu *et. al.*, 2018).

Mahdi, Abdullah, Toubia, Reza & Marjan (2018) realizaron una investigación donde se estudió numéricamente un reactor tubular de lecho fijo lleno de catalizador meso poroso Al-HMS-5. Se implementó un estudio cinético mecanicista tipo Longmuir-Hinshelwood en una red de reacción propuesta, parámetros cinéticos y energía de activación.

La red de reacción para la metilación del tolueno se evaluó mediante regresión no lineal y gráfico de Arrhenius, respectivamente. En ecuaciones de adición, transferencia de calor, flujo de fluido y reacción química que consisten en metilación de tolueno e isomerización de xileno se resolvieron utilizando el método de elementos finitos. Para optimizar el proceso de metilación del tolueno, la temperatura de reacción y el tiempo de residencia fueron investigados. Los resultados mostraron que existe una distribución uniforme de temperatura en el reactor. Solo hay desviación de la temperatura uniforme en la entrada del reactor, pero en otros lugares, la distribución de temperatura es uniforme. Como resultado, la temperatura del fluido se vuelve rápidamente la misma que la temperatura de la pared, lo que hace que la reacción de metilación del tolueno sea altamente eficiente.

Shi, Goncalves, Ferreira & Rodriguez (2021) desarrollaron una investigación que contiene una revisión de los avances en la producción y separación de isómeros de xileno, contiene una descripción general de los aromáticos, resume las mejoras de los catalizadores, adsorbentes, procesos que fortalecen las unidades existentes. Se presta atención a la tecnología de lecho móvil simulado para la separación, las estrategias y el modelado.

Se incluye la integración de reactor y calor, la intensificación e integración de procesos son prometedoras para ahorrar energía y costos, y también permite flexibilidad dentro de los alimentos y productos intermedios, maximizando las ventajas de cada proceso.

Nandana & Anand (2021) resumen los aspectos fundamentales de los mecanismos de reacción que ocurren en el proceso, para estudios de optimización del proceso y ampliación, con énfasis en el desarrollo reciente del diseño del catalizador, el mecanismo y el desarrollo del proceso. Con el fin de duplicar las cantidades de p-Xileno con alta selectividad.

Dongliang *et. al.*, (2021) propusieron mejorar el proceso de producción de p-Xileno por metilación de tolueno usando metanol por un proceso corto para mejorar la economía reduciendo la separación de alto consumo de energía de los isómeros de xileno en procesos existentes, usando el catalizador ZSM-5 y Si-Mg-P-La/ZSM-5. Teniendo como resultado una mayor calidad del producto, mostrando valores económicos en términos de inversión de capital y costos operativos.

En el presente trabajo se tiene como objetivo simular el reactor utilizado en el proceso de producción de p-Xileno, elaborar el DFP con normas de PEMEX y realizar comparativas de los procesos con este mismo objetivo para dar a conocer las deficiencias de los trabajos anteriores y la aportación de este proyecto.

En lo que respecta al producto también conocido como 1,4-dimetilbenceno, es un hidrocarburo aromático. En la Figura 1 se muestra los isómeros y sus posiciones en el anillo del benceno.

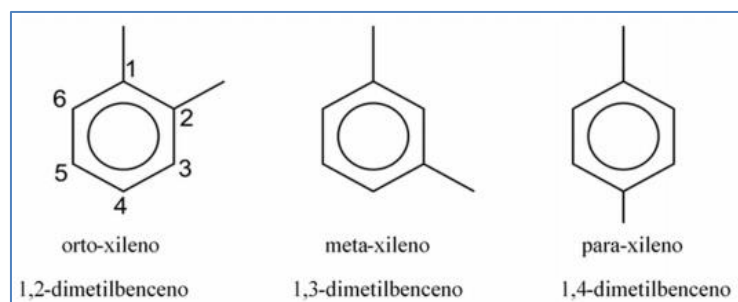


Figura 1. Estructura molecular de los isómeros del xileno (Sevilla, 2019).

Las propiedades físicas de los isómeros son parecidas en cuanto a condiciones atmosféricas; son incoloros y líquidos volátiles. En la Tabla 2 se reportan algunas de las propiedades físicas y termodinámicas más comunes de los isómeros del xileno.

Tabla 2. Propiedades físicas y termodinámicas de los isómeros del xileno.

Propiedad	o-Xileno	m-Xileno	p-Xileno
Punto de fusión (°C)	-25	-8	13.25
Punto de ebullición (°C)	144	139	138.2
Punto de inflamación (°C)	32	27	27
Densidad a 20 °C (kg/m ³)	880	864	860
Viscosidad a 20 °C (kg/m s)	8.09 x 10e-5	6.17 x 10e-5	6.44 x 10e-5

Fuente: Ficha de datos de seguridad ROTH. (Carlroth, 2015).

Para obtener una mayor selectividad en la reacción se utiliza un catalizador, que orienta la reacción para formar p-Xileno; en este caso se utiliza el catalizador zeolita ZSM-05 modificado con Mg por sus propiedades y características.

1.2 Síntesis de Antecedentes

A partir de los antecedentes antes mencionados se presenta en la Tabla 3 la información referente a la síntesis de diversos trabajos en los cuales se destaca los parámetros y especificaciones del proceso para producción de p-Xileno: autor, año, procedimiento, resultado, tipo de proceso, objetivo de producción (Alimentación, materias primas) y así como también, temperatura, presión, composición, flujo y recirculación del proceso.

Tabla 3. Datos de diferentes artículos del proceso de producción de p-Xileno.

Autor	Año	Procedimiento	Resultados	Tipo de proceso	Objetivo de producción kg/h (kmol/h)	Parámetros y Condiciones Operativas					
						Equipos	T (°C/°K)	P(bar/psia)	Conv %	F	Recirculación kg/h (kmol/h)
Tahir (et. al.,)	2013	Investigación sobre el proceso de producción de p-Xileno por metilación de tolueno	p-Xileno con una pureza del 99.7% y una conversión del 83% de tolueno	Metilación de tolueno	12,591.72 M y 19,810.1 T 393 M y 215 T	Planta completa	25-400	1-10.5	33.63	110549.16 kg/h	3,472.8 M y 72,786 T
							298.15-673.15	14.5-152.28			108.39 M y 789.95 T
Liu (et. al.,)	2018	Proceso de producción intensificado de p-Xileno a través de la alquilación de tolueno y metanol	La conversión de metanol podría alcanzar el 98%, selectividad de p-Xileno del 92% con temperatura de reacción de 442.5 °C y presión a 4 bar.	Metilación de tolueno	12,591.72 M y 19,810.1 T 393 M y 215 T	Planta completa	25-400	1-10.5	33.63	110549.16 kg/h	3,472.8 M y 72,786 T
							298.15-673.15	14.5-152.28			108.39 M y 789.95 T
Dongliang (et. al.,)	2021	Proceso corto para la producción de p-Xileno en la intensificación de la selectividad de metilación de tolueno con metanol	El proceso corto indico que el efluente del reactor podría purificarse en dos columnas de destilación eliminando la recuperación del metanol y la separación de isómeros del xileno	Metilación de tolueno	12,591.72 M y 19,810.1 T 393 M y 215 T	Planta completa	25-442.5	1-8.2	ND	80633.1 kg/h	47,175.68/512 T
							298.15-715.65	14.5-118.93			
				Metilación de tolueno	8,234.28 M y 19,072.98 T 257 M y 207 T	Planta completa	25-442.5	1-4.0	ND	9462.88 kmol/h	35.244 M y 315,585.02 T
							298.15-715.65	14.5-58.01			1.1 M y 3,425.06 T

* M metanol, T es tolueno. Algunos datos no están disponibles en la literatura y se representa con ND y cuando la información no aplica con NA.

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018) y (Dongliang, y otros, 2021).

Se observa que algunos datos son similares y otros tienen un rango de similitud, por este motivo se elaboraron 5 tablas que contienen información que será de base para el desarrollo del DFP general y específico del reactor y la simulación del reactor.

Cabe destacar que una de las similitudes importantes para este proyecto es el tipo de proceso con el que se trabajará. La cristalización fraccionada y adsorción están actualmente disponibles comercialmente y representan, respectivamente, alrededor del 40 y 60% de la producción mundial de p-Xileno. Aunque se ha demostrado con éxito en el campo, el proceso de cristalización / adsorción híbrida aún no se ha comercializado y se espera que la primera unidad comercial entre en servicio. (Daramola, *et. al.*, 2009).

Respecto a la información del reactor, se añadieron datos de los diferentes trabajos: temperatura, presión, alimentación al reactor y modelo cinético. En el modelo cinético intervienen las reacciones con su respectiva velocidad de reacción, y para ello se necesita la constante de velocidad y en este caso las presiones parciales.

La ecuación para calcular la constante de velocidad es la siguiente:

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (3)$$

Donde:

A: Factor pre exponencial

Ea= Energía de activación

R: constante de los gases ideales

T: temperatura en °K

La Tabla 4 contiene esta información.

Tabla 4. Datos de reactores utilizados en el proceso de producción de p-Xileno.

Autor	Tipo de reactor	T (°C/°K)	P(bar/psia)	Alimentación al reactor (kmol/h)/(kg/h)	Reacciones	Velocidad de reacción	Modelo cinético	
							Factor pre exponencial A mol/ (g h atm ²)	Energía de activación E (kJ/mol)
Tahir (et. al.) 2013	Lecho empacado isotérmico PBR	400	3	1,000 T y 500 M	Metilación de tolueno	$r_1=k_1p_Tp_M$	403 ± 5	45.7 ± 0.4
					Deshidratación del metanol	$r_2=k_2p_M^2$	1346 ± 64	50.6 ± 0.5
		673.15	43.51	92,140 T y 16,020 M	Desproporción del tolueno	$r_3=k_3p_T$	96.2 ± 1	59.0 ± 0.5
					Desalquilación de p-Xileno	$r_4=k_4p_{p-X}$	0.3815 ± 0.05	19.6 ± 0.7
					Isomerización de p-Xileno	$r_5=k_5p_{p-X}$	46.94 ± 0.5	48.9 ± 0.3
Liu (et. al.) 2018	Lecho fijo PBR	400	3	1,000 T y 500 M	Metilación de tolueno	$r_1=k_1p_Tp_M$	403 ± 5	45.7 ± 0.4
					Deshidratación del metanol	$r_2=k_2p_M^2$	1346 ± 64	50.6 ± 0.5
		673.15	43.51	92,140 T y 16,020 M	Desproporción del tolueno	$r_3=k_3p_T$	96.2 ± 1	59.0 ± 0.5
					Desalquilación de p-Xileno	$r_4=k_4p_{p-X}$	0.3815 ± 0.05	19.6 ± 0.7
					Isomerización de p-Xileno	$r_5=k_5p_{p-X}$	46.94 ± 0.5	48.9 ± 0.3
	Lecho fijo PBR	442.5	4	727 T y 393 M	Metilación de tolueno	$r_1=k_1p_Tp_M$	403 ± 5	45.7 ± 0.4
					Deshidratación del metanol	$r_2=k_2p_M^2$	1346 ± 64	50.6 ± 0.5
		715.65	58.01	66,985.78 T y 12,591.72 M	Desproporción del tolueno	$r_3=k_3p_T$	96.2 ± 1	59.0 ± 0.5
					Desalquilación de p-Xileno	$r_4=k_4p_{p-X}$	0.3815 ± 0.05	19.6 ± 0.7
					Isomerización de p-Xileno	$r_5=k_5p_{p-X}$	46.94 ± 0.5	48.9 ± 0.3
Dongliang (et. al.) 2021	Lecho empacado isotérmico PBR	442.5	4	3,633.74 T y 566 M	Metilación de tolueno	$r_1=k_1p_Tp_M$	403 ± 5	45.7 ± 0.4
					Deshidratación del metanol	$r_2=k_2p_M^2$	1346 ± 64	50.6 ± 0.5
		715	58.01	334,812.80 T y 18,134.64 M	Desproporción del tolueno	$r_3=k_3p_T$	96.2 ± 1	59.0 ± 0.5
					Desalquilación de p-Xileno	$r_4=k_4p_{p-X}$	0.3815 ± 0.05	19.6 ± 0.7
					Isomerización de p-Xileno	$r_5=k_5p_{p-X}$	46.94 ± 0.5	48.9 ± 0.3

* r es la velocidad de reacción (formación), k es la constante de velocidad, p_T es presión parcial del tolueno, p_M es presión parcial del metanol, p_{p-X} es presión parcial de p-Xileno.

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018) y (Dongliang, y otros, 2021).

La información de los reactores, específicamente del PBR se tomará en cuenta a la hora de ingresar los datos al simulador, es importante contar con todos los datos, uno de ellos es el tipo de catalizador que ayudará a la mayor selectividad del p-Xileno.

En la Tabla 5 se adjunta información de los catalizadores: autor, tipo de reacción, catalizador, tamaño, proceso, peso de catalizador por unidad caudal de alimentación de tolueno, temperatura, selectividad de p-Xileno, conversión de tolueno y factores de efectividad.

Tabla 5. Datos de diferentes artículos sobre catalizadores usados en el reactor para el proceso de producción de p-Xileno.

Autor	Tipo de reactor	Catalizador	Tamaño (mm)	Proceso	Espacio-tiempo W_{cat}/F_{t0} (g h/mol)	T (°C/°K)	Selectividad de p-X (%)	Conversión tolueno (%)	Factores de efectividad	
Tahir (et. al.) 2013	Lecho empacado isotérmico	ZSM-5 modificado con Mg	0.75	Metilación de tolueno	2.5	460	100	35	η3	0.7781 ± 0.117
						733.15				40
						500		40	η4	
						773.15				3.212 ± 0.59
Liu (et. al.) 2018	Lecho fijo	ZSM-5 modificado con Mg	0.75	Metilación de tolueno con el proceso existente y el propuesto	2.5	460	100	35	η3	0.7781 ± 0.117
						733.15				40
						500		40	η4	
						773.15				3.212 ± 0.59
Dongliang (et. al.) 2021	Lecho empacado isotérmico	ZSM-5 modificado con Mg	0.75	Metilación de tolueno	0.95	460	99.26	ND	ND	ND

* ± es una variación.

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018) y (Dongliang, y otros, 2021).

Para la sección de separación y purificación del proceso de producción, se integran columnas de destilación, éstas se mencionan de manera general ya que el objetivo de este trabajo no es el refinamiento de p-Xileno. La Tabla 6 muestra los datos de los parámetros y condiciones de operación de ciertas columnas.

Cabe destacar que hay una columna de destilación reactiva que hace posible que se lleve a cabo una reacción y al mismo tiempo una separación, se necesita reactivos, constantes de equilibrio y otros datos.

Tabla 6. Datos de columnas de destilación utilizadas en el proceso de producción de p-Xileno.

Autor	Proceso	Tipo de columna	T (°C/°K)	P (bar/psia)	X (x-P) kmol/h	F (kg/s)	Etapas	Reactivos	Constantes de equilibrio
Tahir (et. al.) 2013	Metilación de tolueno	Columna de destilación	49.46 322.61	10.5 152.28	0.13	2.677	NA	NA	NA
		Columna de destilación	44.38 317.53	8.5 123.28	200.91	27.15	NA	NA	NA
		Columna de destilación	212.83 485.98	8.2 118.93	200.91	26.24	NA	NA	NA
		Columna de destilación reactiva	187.37 460.52	3.2 46.41	187.55	5.67	40-60	DTBB TBB	K ^R =0.6 K ^R =0.16
		Columna de destilación	137 410.15	1 14.5	181.98	5.41	NA	NA	NA
Liu (et. al.) 2018	Metilación de tolueno	Columna de destilación	49.46 322.61	10.5 152.28	0.13	2.677	NA	NA	NA
		Columna de destilación	44.38 317.53	8.5 123.28	200.91	27.15	NA	NA	NA
		Columna de destilación	212.83 485.98	8.2 118.93	200.91	26.24	NA	NA	NA
		Columna de destilación reactiva	187.37 460.52	3.2 46.41	187.55	5.67	40-60	DTBB TBB	K ^R =0.6 K ^R =0.16
		Columna de destilación	137 410.15	1 14.5	181.98	5.41	NA	NA	NA
	Propuesta de metilación de tolueno	Columna de destilación	21.09 294.24	8.2 118.93	186.34	19.7	NA	NA	NA
		Columna de destilación	210.9 484.05	NA	NA	NA	NA	NA	NA
		Columna de destilación	184.25 457.4	3 43.51	189.4	6.04	NA	NA	NA
		Columna de destilación reactiva	133.9 407.05	NA	NA	NA	40-60	DTBB TBB	K ^R =0.6 K ^R =0.16
		Columna de destilación	89.87 363.02	3 43.511	0	ND	NA	NA	NA

Dongliang (et. al.) 2021	metilación de tolueno	Columna de destilación	1.05	2.2	179.2	ND	NA	NA	NA
			274.2	31.9					
	Columna de destilación	111.1	1	178.65	ND	NA	NA	NA	
		384.25	14.5						
	Columna de destilación	137.9	1	178.42	ND	NA	NA	NA	
		411.05	14.5						

* x-P es p-Xileno, DTBB es Di-tert-butil-benceno, TBB es Tert-butil-benceno.

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018) y (Dongliang, y otros, 2021).

Dependiendo del tipo de proceso, parámetros y condiciones de operación es el número de columnas que se ocupará.

Respecto a las bibliografías especializadas, se indagó en la literatura del autor Kirk Othmer, el cual detalla los diferentes procesos para la obtención de p-Xileno con sus respectivas condiciones de temperatura, presión, conversión, selectividad y catalizador utilizado para llevar a cabo la reacción.

En la Tabla 7 se muestran datos que aportaron al proceso.

Tabla 7. Datos del proceso de producción de p-Xileno de bibliografías especializadas.

Autor	Tipo de proceso	Adsorbente	# Etapas	Reactor de lecho fijo	T (°C/°K)	P(bar/psia)	Conversión (%)	Selectividad (%)	Catalizador
Kirk Othmer	Tranquilación de tolueno	NA	NA	Reactor de lecho fijo	350-530/ 623.15- 803.15	10-50/ 14,503.8- 72,518.87	40-50 T	80-90	zeolita ZSM-5
	Desproporción de tolueno	NA	NA		400-470/ 673.15- 743.15	20-34/ 29,007.55- 49,312.83	25-30 T	80-90	zeolita ZSM-5
	p-X-Plus (cristalización ARCO)	NA	NA	NA	390-495/ 663.15- 768.15	41/ 59,465.47	42-48 T	ND	NA
	Adsorción de p-X	Sólido y líquido	NA	ND	400-470/ 673.15- 743.15	20-34/ 29,007.55- 49,312.83	ND	ND	NA

Proceso de isomerización de baja presión	NA	NA	Reactor catalítico o de lecho fijo	290-380/ 563.15-653.15	2.73/ 3,959.63	25-40 EB	ND	zeolita ZSM-5 con alúmina
Proceso Isoleno II	NA	NA	ND	250-500/ 523.15-773.15	10-30/ 14,503.8-43,511.32	ND	ND	Pt sobre un soporte acidificado

* T es tolueno, EB es etilbenceno, Pt conocido como dióxido de platino.

Fuente: (Othmer, 1947).

De acuerdo a la síntesis de los artículos de investigación y la bibliografía, se encuentran similitud de datos respecto al proceso, reactor, parámetros, condiciones de operación y tipo de catalizador.

1.3 Planteamiento del problema

Entorno a estudios se han desarrollado diferentes trabajos que abordan la simulación de este proceso bajo diferentes plataformas de software como lo son ChemCAD, Aspen, HiSym, GPROMS, HTRY Xchanger suite, destacando una clara tendencia al uso de Aspen Suit y ChemCAD posiblemente asociado a la facilidad de las interfases y la precisión de los simuladores. Actualmente los trabajos presentados para la producción de p-Xileno incluyen DFP generales con simbología y normas no estandarizados que muchas veces combinan formatos lo que genera una interpretación imprecisa y no incluyen DFP de los reactores que operan en el proceso, por lo que el presente trabajo aborda una propuesta para generar un DFP completo y preciso del reactor y simular el reactor del proceso de producción de p-Xileno en el software Aspen HYSYS.

1.4 Justificación

El p-Xileno es un importante precursor químico en la síntesis del Polietilentereftalato (PET), el proceso está conformado por 3 etapas principales: 1. Reacción, 2. Destilación y 3. Purificación. Actualmente la mayor parte de los trabajos reportados en revistas científicas y bibliografía se enfocan casi primordialmente en simulaciones de sistemas aislados de reacción como es el caso de la *Isomerización de xilenos en reactores de membrana propuestos por* (Tarditi, 2007) además, de los estudios de (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Obregon, Elizondo, & Rodriguez, 2004), (Liu *et. al.*, 2018), (Martinez, 1991).

El PET a pesar de sus muchos criterios negativos como producto y como contaminante sigue siendo un componente importante para la fabricación de recipientes y contenedores principalmente para productos diversos, (ChemicalSafetyFacts.org, 2021). Contar con un diseño y validación de un reactor del proceso completo que incluya la ingeniería básica en DFP permite abordar y estudiar diferentes casos o escenarios de trabajo, bajo los esquemas de incrementos en la producción, desarrollo de plantas y equipo de precursor, especificaciones de diseño, análisis de sensibilidad y hasta reingeniería.

1.5 Hipótesis

Se podrán analizar y comparar los diferentes procesos actuales con la propuesta de este trabajo de tesis, considerando que uno de los objetivos permitiría evaluar, proponer o diseñar un reactor más eficiente basado en el sistema de reacción, en donde las reglas heurísticas, en conjunto con una sólida investigación en artículos y confirmada con datos de producción reales fundamentados a partir de la simulación del reactor para la planta de producción de p-Xileno a partir del programa desarrollado.

1.6 Objetivos generales y específicos

1.6.1 Objetivo general:

1.- Simulación de un reactor para la producción de p-Xileno basado en el software Aspen HYSYS V.8.8.

1.6.2 Objetivos específicos:

- 1.- Sintetizar las operaciones unitarias involucradas en el proceso de producción de p-Xileno a partir de referencias bibliográficas y artículos de investigación de calidad reconocida.
- 2.- Desarrollar un diagrama DFP del proceso general y un DFP del reactor propuesto para la producción de p-Xileno.
- 3.- Proponer el diseño de sistema de reacción basado en los antecedentes de proceso.
- 4.- Validar en el software Aspen HYSYS V.8.8 el reactor propuesto en estado estacionario.

CAPÍTULO 2

Diseño del proceso de p-Xileno

El proceso de p-Xileno utiliza principalmente la metilación de tolueno, en el cual se obtiene productos como p-Xileno y agua, dentro de este proceso se involucran 5 reacciones y la cinética se describe a continuación.

2.1 Cinética

Según (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013) para el proceso de metilación de tolueno en el cual se obtendrá p-Xileno se involucran 5 reacciones: metilación de tolueno, deshidratación del metanol, desproporción del tolueno, desalquilación de p-Xileno e isomerización de p-Xileno. Las reacciones se mencionan respectivamente con su velocidad de reacción (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013):



$$r_1 = k_1 p_T p_M \quad (5)$$



$$r_2 = k_2 p_M^2 \quad (7)$$



$$r_3 = k_3 p_T \quad (9)$$



$$r_4 = k_4 p_{p-x} \quad (11)$$



$$r_5 = k_5 p_{p-x} \quad (13)$$

Donde r es la velocidad de reacción (formación), k es la constante de velocidad, p_T es presión parcial del tolueno, p_M es presión parcial del metanol, p_{p-x} es presión parcial de p-Xileno.

Con respecto a la ley de la velocidad de las reacciones, el desarrollo tiene la siguiente forma (Turton, Bailie, Whiting, & Bhattacharyya, 2012):



$$r = k[A]^m[B]^n \quad (15)$$

Donde A y B son las concentraciones y m y n son el orden de reacción.

La constante de velocidad incluye parámetros, factor pre exponencial y energía de activación lo cual proporcionan los trabajos de investigación.

En la bibliografía especializada se tomará en cuenta los fundamentos teóricos de la cinética de reacción que este reportada.

2.2 Balance de materia

El uso del balance de materia permite conocer la cantidad de reactivos que se consumen para generar los productos, en esta sección se explica de manera general la resolución de este sistema.

Las 5 reacciones son las antes mencionadas, Tenemos datos conocidos como el flujo de entrada del reactor con sus respectivas composiciones al igual que el flujo de salida. La Figura 2 muestra el diagrama de flujo del proceso.

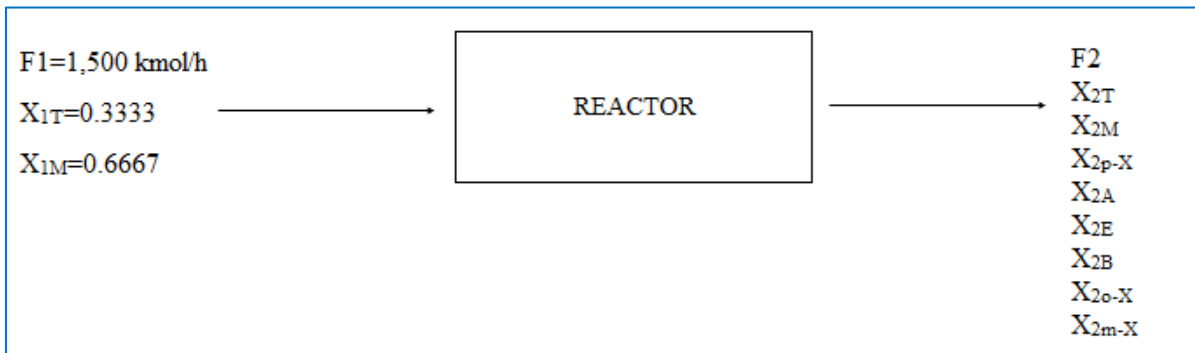


Figura 2. Diagrama de flujo del reactor (Quintana, 2022).

Cada componente se identificará con una letra para evitar los nombres largos, tolueno (T), metanol (M), p-Xileno (p-X), agua (A), etileno (E), benceno (B), o-Xileno (o-X) y m-Xileno (m-X).

El balance de materia se rige por el principio de la conservación de la masa (Turton, Bailie, Whiting, & Bhattacharyya, 2012):

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} \quad (16)$$

Las reacciones químicas dependen directamente de la velocidad de reacción, únicamente se representa por la letra “R” en esta sección de balance de materia. Las abreviaciones de la velocidad de reacción de cada componente vendrán dadas por esta letra seguida del subíndice del componente y el número de reacción. Las siguientes ecuaciones son para las 5 reacciones (Quintana 2022):

$$R_1 = \frac{R_{1T}}{-1} = \frac{R_{1M}}{-1} = \frac{R_{1p-X}}{+1} = \frac{R_{1A}}{+1} \quad (17)$$

$$R_2 = \frac{R_{2M}}{-2} = \frac{R_{2E}}{+1} = \frac{R_{2A}}{+2} \quad (18)$$

$$R_3 = \frac{R_{3T}}{-1} = \frac{R_{3p-X}}{+\frac{1}{2}} = \frac{R_{3B}}{+\frac{1}{2}} \quad (19)$$

$$R_4 = \frac{R_{4p-X}}{-1} = \frac{R_{4T}}{+1} = \frac{R_{4E}}{+\frac{1}{2}} \quad (20)$$

$$R_5 = \frac{R_{5p-X}}{-1} = \frac{R_{5o-X}}{+\frac{1}{2}} = \frac{R_{5m-X}}{+\frac{1}{2}} \quad (21)$$

A continuación, se muestra la Tabla 8 que especifica el balance de materia de cada componente.

Tabla 8. Balance de materia de cada componente.

Componentes	Balances de materia	R _{comp} =F(R)	Identificación
C ₇ H ₈ (T)	F ₁ X _{1T} - F ₂ X _{2T} +R _{1T} +R _{3T} +R _{4T} =0	R _{1T} = -1*R ₁ R _{3T} = -1*R ₃ R _{4T} = +1*R ₄	F ₁ X _{1T} -F ₂ X _{2T} -R ₁ - R ₃ +R ₄ =0
CH ₃ OH (M)	F ₁ X _{1M} - F ₂ X _{2M} +R _{1M} +R _{2M} =0	R _{1M} = -1*R ₁ R _{2M} = -2*R ₂	F ₁ X _{1M} -F ₂ X _{2M} -R ₁ - 2R ₂ =0
p-C ₈ H ₁₀ (p-X)	-F ₂ X _{2p-X} +R _{1p-X} +R _{3p-X} - X+R _{4p-X} +R _{5p-X} =0	R _{1p-X} = +1*R ₁ R _{3p-X} = +1/2*R ₃ R _{4p-X} = -1*R ₄ R _{5p-X} = -1*R ₅	-F ₂ X _{2p-X} +R ₁ +1/2R ₃ - R ₄ -R ₅ =0
H ₂ O (A)	-F ₂ X _{2A} +R _{1A} +R _{2A} =0	R _{1A} = +1*R ₁ R _{2A} = +2*R ₂	-F ₂ X _{2A} +R ₁ +2R ₂ =0
C ₂ H ₄ (E)	-F ₂ X _{2E} +R _{2E} +R _{4E} =0	R _{2E} = +1*R ₂ R _{4E} = +1/2*R ₄	-F ₂ X _{2E} +R ₂ +1/2R ₄ =0
C ₆ H ₆ (B)	-F ₂ X _{2B} +R _{3B} =0	R _{3B} = +1/2*R ₃	-F ₂ X _{2B} +1/2R ₃ =0
o-C ₈ H ₁₀ (o-X)	-F ₂ X _{2o-X} +R _{5o-X} =0	R _{5o-X} = +1/2*R ₅	-F ₂ X _{2o-X} +1/2R ₅ =0
m-C ₈ H ₁₀ (m-X)	-F ₂ X _{2m-X} +R _{5m-X} =0	R _{5m-X} = +1/2*R ₅	-F ₂ X _{2m-X} +1/2R ₅ =0

Fuente: Propia.

Con el resumen de las ecuaciones de balance de materia se calculó el número de grados de libertad. (GDL), la Tabla 9 muestra los resultados.

Tabla 9. Número de grados de libertad.

	Número	Identificación
VARIABLES INDEPENDIENTES	10	X _{1T} , X _{1M} , X _{2T} , X _{2M} , X _{2p-X} , X _{2A} , X _{2E} , X _{2B} , X _{2o-X} , X _{2m-X}
Ecuaciones de Balance de materia independientes	8	Véase Tabla 8
VARIABLES INDEPENDIENTES especificadas	3	F ₁ , X _{1T} , X _{1M}
Relaciones adicionales	0	
GDL	-1	Se puede resolver mediante simulación

Fuente: Propia.

El reactor se puede resolver mediante simulación, se adjuntan los datos que correspondan en cada sección.

2.3 Tipo de reactor

Los reactivos se alimentan al reactor en fase gas debido a las condiciones de temperatura, en este tipo de reacciones se ocupan reactores tubulares, estos consisten en un tubo cilíndrico y normalmente opera en estado estacionario, la reacción sucede en una fase (homogénea). La reacción se lleva a cabo en un PBR o reactor de lecho empacado (los reactivos se consumen continuamente a medida que fluyen a lo largo del reactor) ya que la velocidad de reacción incluye la masa del catalizador sólido y no el volumen del reactor.

Para el reactor de lecho empacado se expresa la siguiente ecuación de velocidad de reacción, que es el número de moles de A que reaccionaron por unidad de tiempo por unidad de masa de catalizador (mol/s* g de catalizador) (Turton, Bailie, Whiting, & Bhattacharyya, 2012):

$$F_{A0} \frac{dX}{dW} = -r'_A \quad (22)$$

Donde F_{A0} es velocidad de flujo molar de la especie A alimentada a un sistema, X es la conversión lo cual es el número de moles de A que han reaccionado por mol de A alimentado al sistema y W la masa del catalizador. Con la ecuación 23 se determina el peso de catalizador W que se necesita para lograr una conversión de X cuando la presión total permanece constante.

$$W = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r'_A} \quad (23)$$

2.4 Dimensionamiento del reactor

Para el dimensionamiento se tomó como base un volumen de 1m^3 , se tomó en cuenta la heurística mencionada por Walas (1990) con relación a la longitud con el diámetro (L/D), para el dimensionamiento de un recipiente con una presión de 1-17.0115 atm, se emplea la ecuación 24.

$$\frac{L}{D} = 3 \quad (24)$$

El volumen del reactor se calcula con la ecuación 24:

$$V = \pi r^2 L \quad (25)$$

Donde:

L= longitud

r=Radio

V=Volumen

D=Diámetro

El diámetro se define por 2 veces el radio, representado con la ecuación 26:

$$D = 2r \quad (26)$$

Para calcular la longitud y el diámetro del reactor se sustituyen las ecuaciones anteriores.

2.5 Catalizador ZSM-5 modificado

Los catalizadores más utilizados actualmente en plantas de isomerización de xileno se basan hasta la fecha en zeolitas ácidas HMOR y ZSM-5. Otros catalizadores que se han estudiado para esta reacción incluyen zirconia modificada con óxido de tungsteno, sílice amorfa, y zeolitas HY, beta, ITQ-13, UZM-5 y UZM-6, y HFER. (Daramola, *et. al.*, 2009).

El uso del tipo de catalizador influye en la selectividad de nuestro producto. De acuerdo a (Liu *et. al.*, 2018), (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013) y (Othmer, 1947) el catalizador más usado es Zeolita ZSM-05 modificado con magnesio. A continuación se muestra la Figura 3 del catalizador ZSM-05.



Figura 3. Zeolita ZSM-5 (Alibaba, 2021).

El catalizador contiene 1.09% en peso de Mg, 35% en peso de montmorillonita de sodio, también llamada bentonita sódica como aglutinante y tiene un tamaño medio de partícula de 0.75 mm con una densidad de 2.5 g/cm³. El peso del catalizador que se ocupará es de 1,000 kg e ingresará al reactor a 460°C de acuerdo a lo estudiado en los artículos. El tipo de catálisis en este proceso es heterogéneo ya que se encuentra en una fase diferente con respecto a los reactivos.

2.6 Modelo termodinámico

Para que la simulación sea lo más precisa, se selecciona el modelo apropiado según los criterios: tipo de proceso, temperatura, presión, tipo de componente; la elección puede afectar fuertemente la predicción de la simulación por lo cual se consideró la literatura de Don't Gamble With Physical Properties For Simulations para la elección de este modelo.

Según (Carlson, Don't Gamble With Physical Properties For Simulations, October 1996) indica que los cuatro factores que se consideran al elegir el método son:

- La naturaleza de las propiedades de interés
- La composición de la mezcla
- El rango de presión y temperatura
- La disponibilidad de los parámetros

En la Figura 4 se muestra un árbol de decisión para seleccionar el método apropiado.

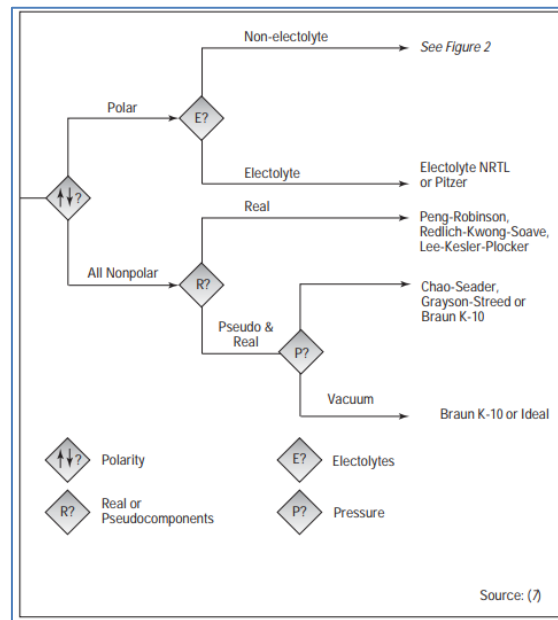


Figura 4. Los primeros pasos para seleccionar métodos de propiedad física (Carlson, 1996).

La mayoría de nuestros componentes son No polares y reales, y de acuerdo al árbol de decisiones, nos da 3 opciones, *Peng-Robinson (PR)*, *Redlich-Kwong-Soave (RKS)*, *Lee-Kesler-Plöcker (LKP)*.

Según (Lozano, 2017):

Los modelos de ecuación de estado pueden representar fases líquidas y vapor. Los criterios de selección se basan en el grado de no idealidad del sistema en estudio y de las condiciones de operación.

Existen ciertos criterios sencillos a seguir:

Los modelos de coeficiente de actividad se usan en sistemas que contienen sustancias polares a presiones bajas (<10 bar). Se utilizan para la fase líquida y se complementan con EOS para la fase de

vapor. Si la presión es menor a 5 bar, se emplea la ecuación de los gases ideales; en cambio, si la presión está entre 5 y 10 bar, se suele preferir Peng-Robinson.

Para petróleo, gas y aplicaciones petroquímicas, la ecuación de estado de PR es generalmente la recomendada. Aspen actualmente ofrece las ecuaciones de estado de PR, Chao-Seader y SRK como los métodos más adecuados en el tratamiento de hidrocarburos.

La ecuación de estado de PR soporta un amplio rango de condiciones de operación y una gran variedad de sistema. Las ecuaciones de estado de PR y SRK generan directamente todas las propiedades de equilibrio y termodinámicas.

2.7 Servicios auxiliares

En todo el proceso se incluyen servicios auxiliares como agua de refrigeración, agua caliente, electricidad, vapor de baja presión, agua de proceso, agua de enfriamiento, agua contraincendios, aire comprimido, combustible.

En el caso específico del reactor, se utiliza energía eléctrica, zeolitas, agua de enfriamiento e integración de calor. El cálculo de costos de servicios auxiliares y las cantidades no se incluyen en este trabajo ya que no es parte de los objetivos de la misma.

2.8 Integración de calor

El servicio para calentar el reactor es por integración de calor, ya que este método se utilizó en los 3 trabajos bases de nuestra investigación. La integración de calor es por el análisis Pinch; es un método que se centra en el aprovechamiento de los flujos de calor de un proceso que normalmente son desperdiciados, se logra intercambiando calor entre las líneas calientes y frías de un proceso mediante intercambiadores de calor. El objetivo principal es el mínimo consumo de energía o servicios lo que lleva a un ahorro económico en el proceso.

El calor de enfriamiento o servicio de enfriamiento (Q_c) es una forma de retirar calor del proceso para disminuir las temperaturas de las corrientes, uno de los servicios es el agua de enfriamiento.

El calor de calentamiento (Q_h) suministra calor al sistema para elevar la temperatura de las corrientes, uno de los servicios es el vapor de agua.

Según (Dongliang, *et. al.*, 2021) el ΔT mínima es la diferencia de temperatura mínima que debe existir entre las corrientes de los intercambiadores para que se pueda realizar la transferencia de calor, en este caso la mínima es 10°C .

Si ΔT tiene un valor grande, disminuye el tamaño de los intercambiadores de calor, pero aumenta la cantidad de servicios.

Si ΔT tiene un valor pequeño, aumenta el tamaño de los intercambiadores de calor aumentando los costos, pero disminuye los servicios.

La elección de la ΔT mínima debe estar acompañado de un análisis económico.

METODOLOGÍA

3.1 Metodología general y específica

3.1.1 Metodología general

1.- Simulación de un reactor para la producción de p-Xileno basado en el software Aspen HYSYS V.8.8.

La metodología general que se propone para desarrollar la simulación de un reactor y su validación en Aspen HYSYS V.8.8 (Se eligió este programa debido a que las licencias de Aspen Suit se encuentran en la Facultad de Ingeniería Química de la BUAP, siendo una herramienta versátil y precisa, la cual utilicé en mi formación académica) se abordó inicialmente sintetizando las operaciones unitarias involucradas en el proceso en el cual se buscó información en referencias bibliográficas y artículos de investigación y se elaboró una síntesis de las áreas de proceso. Posteriormente se concentró la información en un DFP que incluya tales características en el cual se dibujará en AutoCAD 2019 tomando como base las normas de ANSI, ISA y PEMEX, se propuso el diseño de un sistema de reacción basado en los antecedentes del proceso tomando en cuenta los datos cinéticos y modelado de reactores; finalmente se validó la propuesta con alguna referencia bibliográfica comprobada en el software Aspen HYSYS V.8.8 de acuerdo al DFP.

En la Figura 5 se propone la metodología.

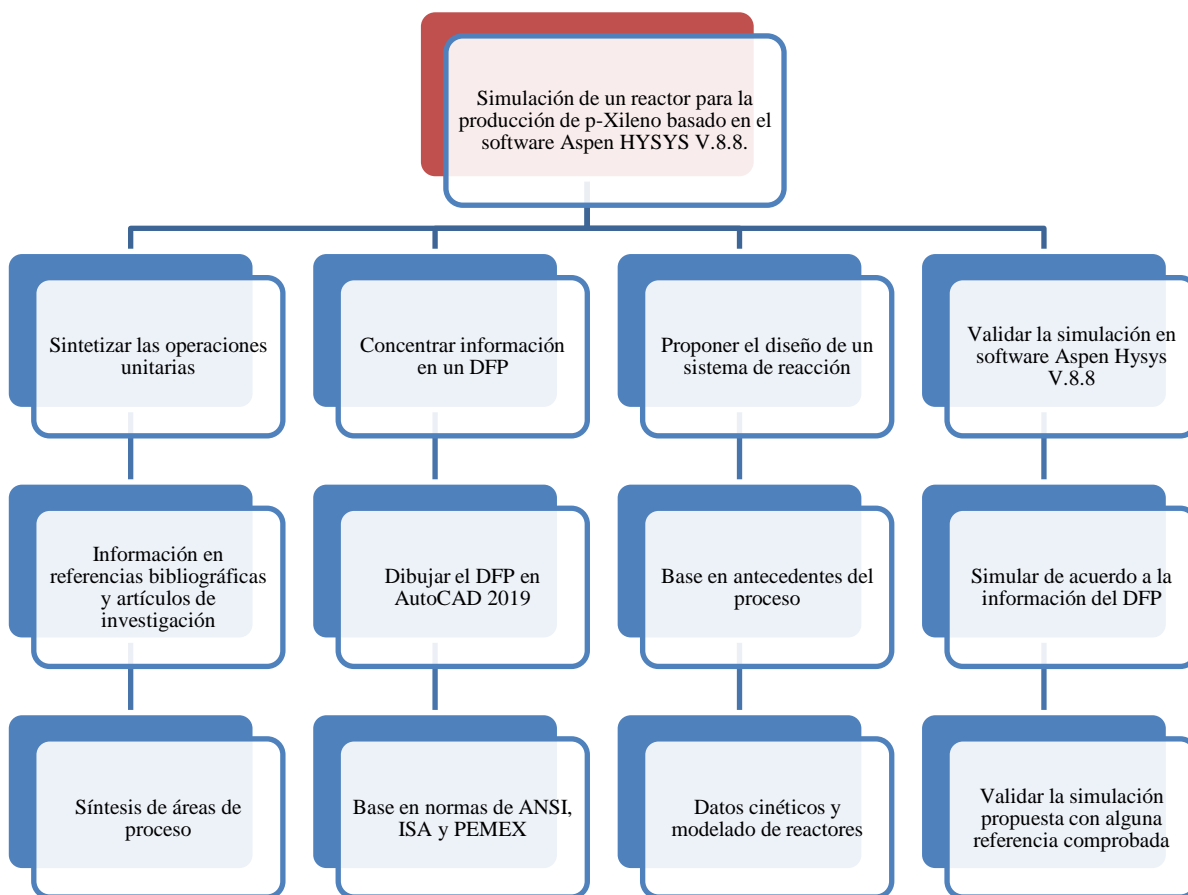


Figura 5. Metodología para la simulación de un reactor para la producción de p-Xileno basado en el software Aspen HYSYS V.8.8. (Quintana, 2022).

En el siguiente apartado se detalla la metodología específica que se utilizó para desarrollar el presente trabajo, donde se aborda la síntesis de información del proceso de producción de p-Xileno, el desarrollo del DFP y la simulación del reactor utilizado en este proceso. Cada apartado describe a detalle cada uno de ellos.

3.1.2 Metodología específica

Objetivo 1.- Síntesis de las operaciones unitarias involucradas en el proceso de producción de p-Xileno a partir de referencias bibliográficas y artículos de investigación de calidad reconocida.

Para la síntesis de las operaciones unitarias involucradas en el proceso de producción de p-Xileno. La información de referencia Liu, *et. al.*, 2018 fue seleccionado de entre diferentes revistas dado que cuenta con mayor definición y detalle del proceso en cuanto al sistema de reacción y el proceso de refinamiento posterior a este; al igual que Dongliang, *et. al.*, 2021, que cuenta con una comparativa del trabajo de Liu con un proceso propuesto.

La síntesis de las operaciones unitarias se lleva a cabo considerando las distintas áreas del proceso: (1) almacenamiento de reactivos, (2) preparación de reactivos, (3) reacción, (4) separación y (5) purificación. Es importante destacar que algunos autores se enfocan en el proceso completo, otros en el reactor, columnas de destilación, catalizador, o el tipo de proceso con el que se trabaja.

En la Figura 6 se muestra la metodología para sintetizar los parámetros y condiciones operativas del sistema de reacción como Temperatura, Presión, Flujo y Composición (T, P, F, X) propuestas por diferentes autores para las operaciones unitarias involucradas en este proceso.

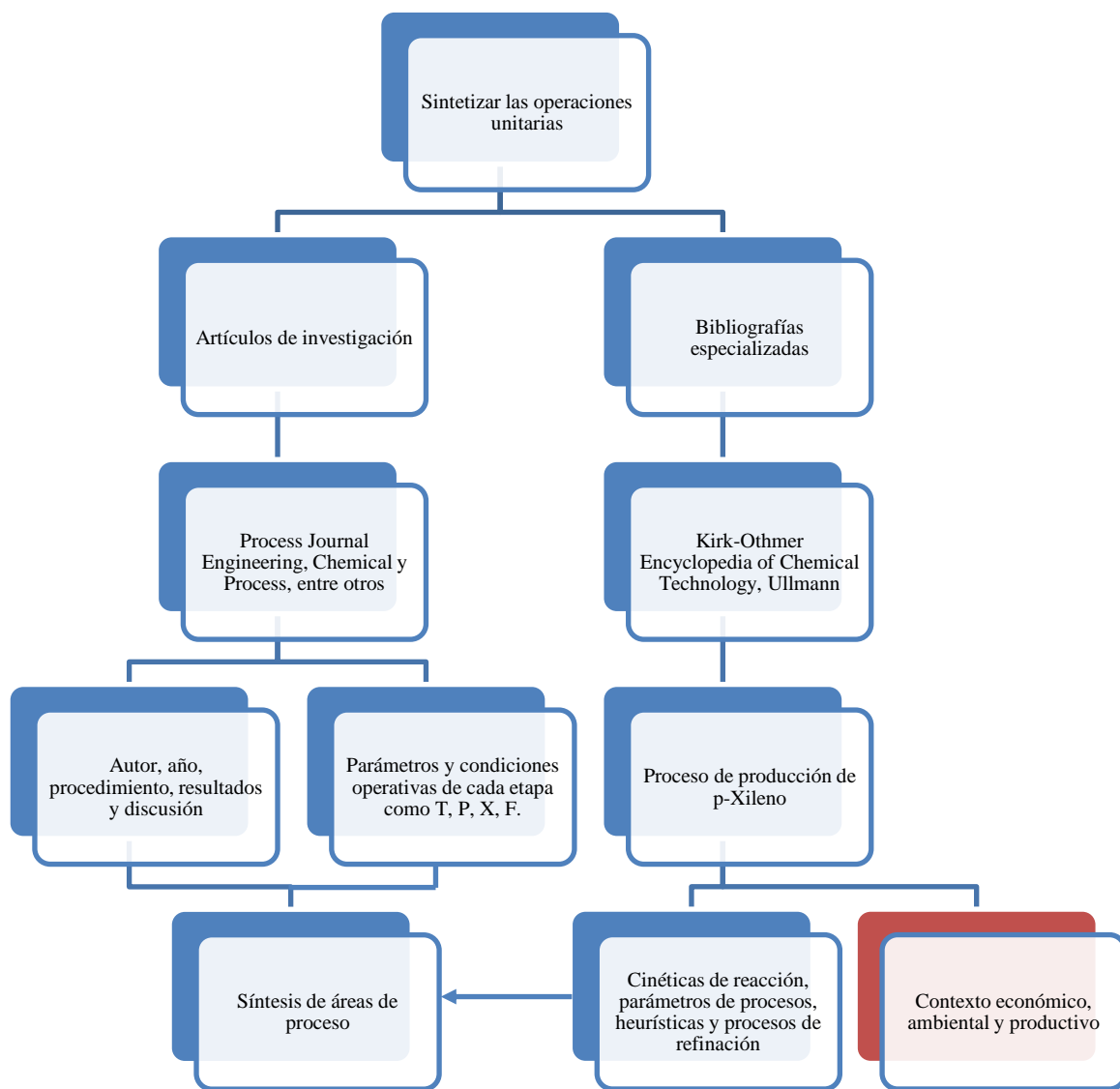


Figura 6. Metodología para sintetizar las operaciones unitarias involucradas en el proceso de producción de p-Xileno (Quintana, 2022).

La búsqueda de información se divide en dos secciones: artículos de investigación y bibliografías especializadas.

Los artículos utilizados en este trabajo son de revistas como Process Journal Engineering, Chemical y Process, entre otros. Posteriormente se elaboró una Tabla de síntesis con información respecto al autor, año, procedimiento, resultados y discusión; de igual manera los parámetros y condiciones operativas de cada etapa del proceso: temperatura, presión, flujo, composición, etc. Teniendo los datos requeridos, se elaboró la síntesis de las áreas de proceso.

Lo que respecta al uso de bibliografías especializadas se sintetizó la información técnica y teórica del proceso de p-Xileno empleando autores como Kirk- Othmer (Encyclopedia of Chemical Technology en platinum-group metals, vol 19) y Ulmann's (Encyclopedia of Industrial Chemistry) en el cual se detalla información respecto a fundamentos teóricos (tipo de proceso, parámetros, condiciones y tipo de catalizador) del proceso de producción de p-Xileno: parámetros de procesos, heurísticas y procesos de refinación, teniendo dicha información se elaboró una síntesis de las áreas de proceso.

Por otro lado, en las referencias: The Observatory of Economic Complexity, Independent Commodity Intelligence Service (ICIS), Methanol Institute y Fundación AQUAE del contexto ambiental, económico y productivo se abordan como parte general de este trabajo.

Objetivo 2.- Desarrollar un diagrama DFP del proceso general y un DFP del reactor propuesto para la producción de p-Xileno.

El DFP se desarrolla implementando elementos gráficos en secuencia lógica que permite reconocer los diferentes equipos que lo integran.

Para el desarrollo del DFP se necesita información del proceso químico (producción de p-Xileno) que incluya las operaciones y procesos unitarios. Se considera que las materias primas ya pasaron por un proceso de refinamiento previo a su alimentación.

Los diagramas están contruidos con un conjunto consistente de simbología, equipos de proceso, tuberías y condiciones de operación. En la actualidad, no existe algún estándar específico para el diseño del DFP, cada empresa o compañía ingenieril decide las normas en las que se basará el proyecto. Respecto a la información utilizada como instrumentación y simbología aparece en las publicaciones de ANSI y estándares británicos, particularmente símbolos de tuberías. (Walas, 1990). A continuación, se muestra en la Figura 7 la metodología para el desarrollo del DFP.

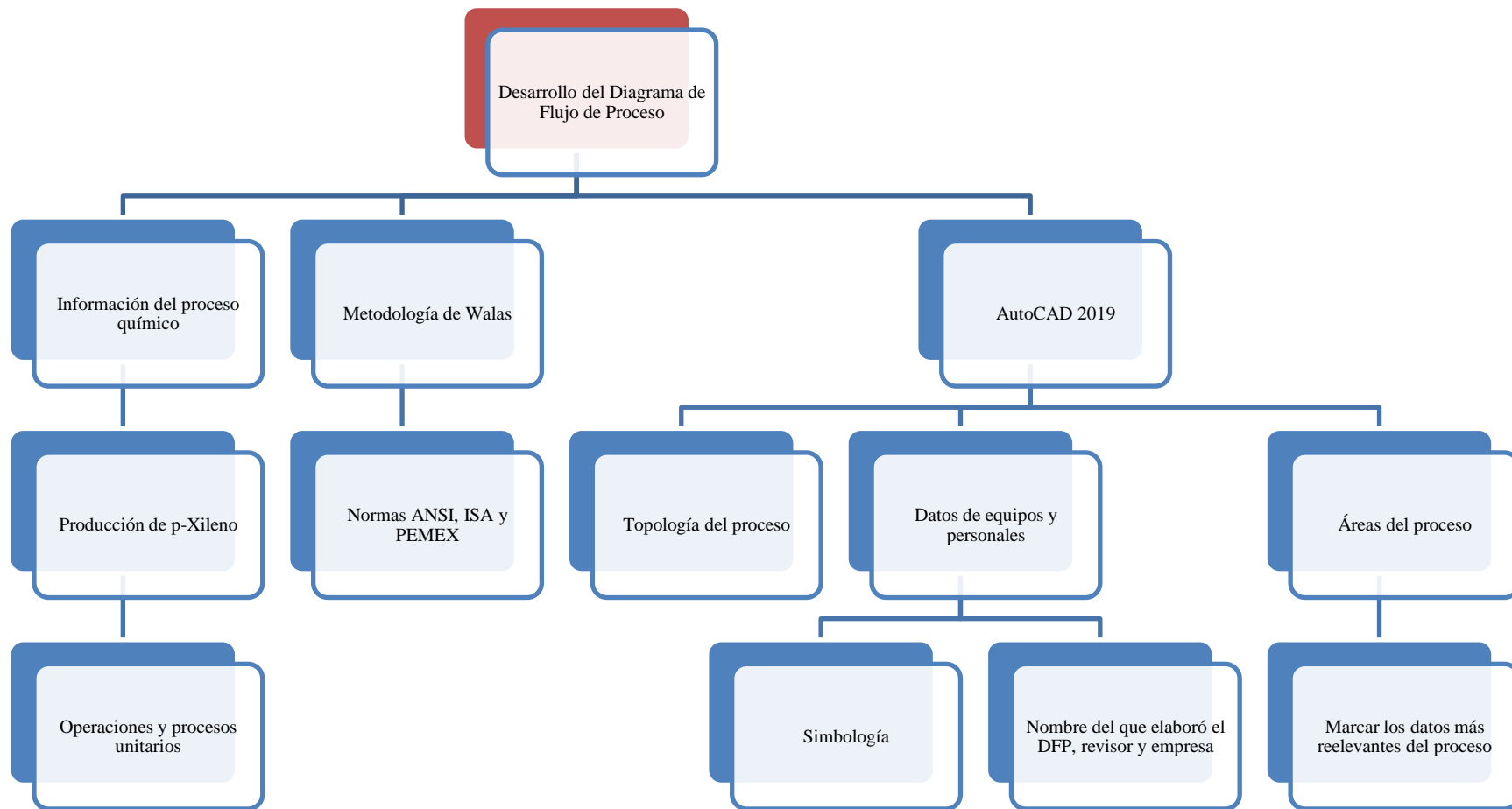


Figura 7. Metodología para desarrollar un diagrama DFP del proceso general para la producción de p-Xileno (Quintana, 2022).

Para el desarrollo del diagrama de flujo de proceso se tomó en cuenta la información investigada en el objetivo anterior. Para este diagrama se propuso la metodología de Walas con base en las normas ANSI, ISA y PEMEX. Teniendo dicha información se dibujó en el software AutoCAD 2019; se consideró como prioridad la topología del proceso, después se integraron los datos de los equipos y simbología, y se incluyeron datos personales como el nombre que elaboró el diagrama, el revisor, la empresa, entre otros datos. Se añadió el balance de masa del reactor, algunos autores adjuntan el balance en el diagrama cuando es un proceso chico y cuando es un proceso grande el balance de masa se añade en otra sección.

Metodología propuesta por Walas para el desarrollo del DFP.

Se consideró la metodología propuesta por Walas, ya que abarca información necesaria. La información básica proporcionada por un DFP se puede clasificar en una de las siguientes categorías:

1. Topología de procesos

El inicio del diagrama es importante ya que abarca el orden y la estructura del diagrama, la forma que adoptará el proceso y su geometría característica. Todos los equipos principales del proceso se representan en el diagrama junto con una descripción del equipo. A cada equipo se le asigna un número de equipo único y un nombre descriptivo.

2. Información de la corriente

Todos los flujos del proceso se muestran e identifican con un número. Se incluye una descripción de las condiciones del proceso y la composición química de cada corriente. Estos datos se muestran directamente en el DFP o se incluyen en una Tabla de resumen de flujo adjunta. Se muestran todos los flujos de servicios auxiliares suministrados a los equipos principales que proporcionan una función de proceso.

3. Información sobre el equipo

Se muestran los lazos de control básicos, que ilustran la estrategia de control utilizada para operar el proceso durante las operaciones normales.

A continuación se muestra la Figura 8 de la metodología propuesta por Walas para el desarrollo del DFP.

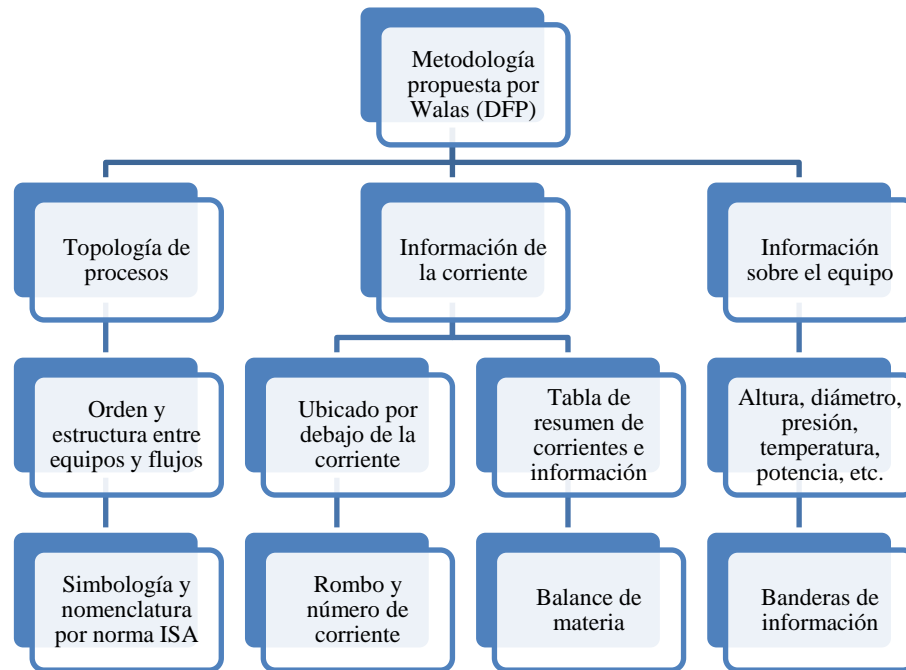


Figura 8. Metodología propuesta por Walas para el desarrollo del DFP (Quintana, 2022)

Objetivo 3.- Proponer el diseño de sistema de reacción basado en los antecedentes de proceso

Para el desarrollo del sistema de reacción se tomó en cuenta por una parte la información típica del reactor, así como los parámetros operativos del mismo, posteriormente se analizaron las diferentes cinéticas propuestas por diversos autores, tanto de artículos de investigación particularmente Process of p-Xylene Production by highly selective methylation of tolueno (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013) que incluye información respecto al proceso completo con datos cinéticos y simulación de proceso; por otro lado la información de Intensified p-Xylene Production Process through Toluene and methanol Alkylation (Liu *et. al.*, 2018) el cual explica el proceso reducido y con mejores resultados respecto al producto y de libros especializados como Kirk Othmer en los cuales se determinó que en promedio el sistema de reacción cuenta con 5 reacciones diferentes: (1) metilación de tolueno, (2) deshidratación del metanol, (3) desproporción del tolueno, (4) desalquilación de p-Xileno e (5) isomerización de

p-Xileno siendo reacciones en paralelo, la 1ra, 3ra, 4ta y 5ta de primer orden y la 2da reacción es de segundo orden.

Las cinéticas descritas para este sistema de reacción incluyen la velocidad de reacción, constante de velocidad y composición obtenidos de las investigaciones antes mencionadas y evaluados en un rango de 442 °C y 4 bar, por lo que se define que el sistema de reacción es polar y de sistema homogéneo ya que las variables son la temperatura, presión y composición, se excluye el caso de ser heterogéneo debido a que los materiales están siempre en fase vapor a lo largo del reactor. Para este tipo de sistemas de reacción el reactor propuesto es de lecho empacado ya que se toma en cuenta el catalizador, se reportan algunos catalizadores para la obtención de p-Xileno como Zeolitas ácidas HMOR y ZMS-5 (Daramola *et. al.*, 2009) reporta que el más usado es la zeolita ZMS-5 modificado con magnesio.

A continuación, se muestra la Figura 9 que detalla la metodología de la propuesta de diseño del reactor.

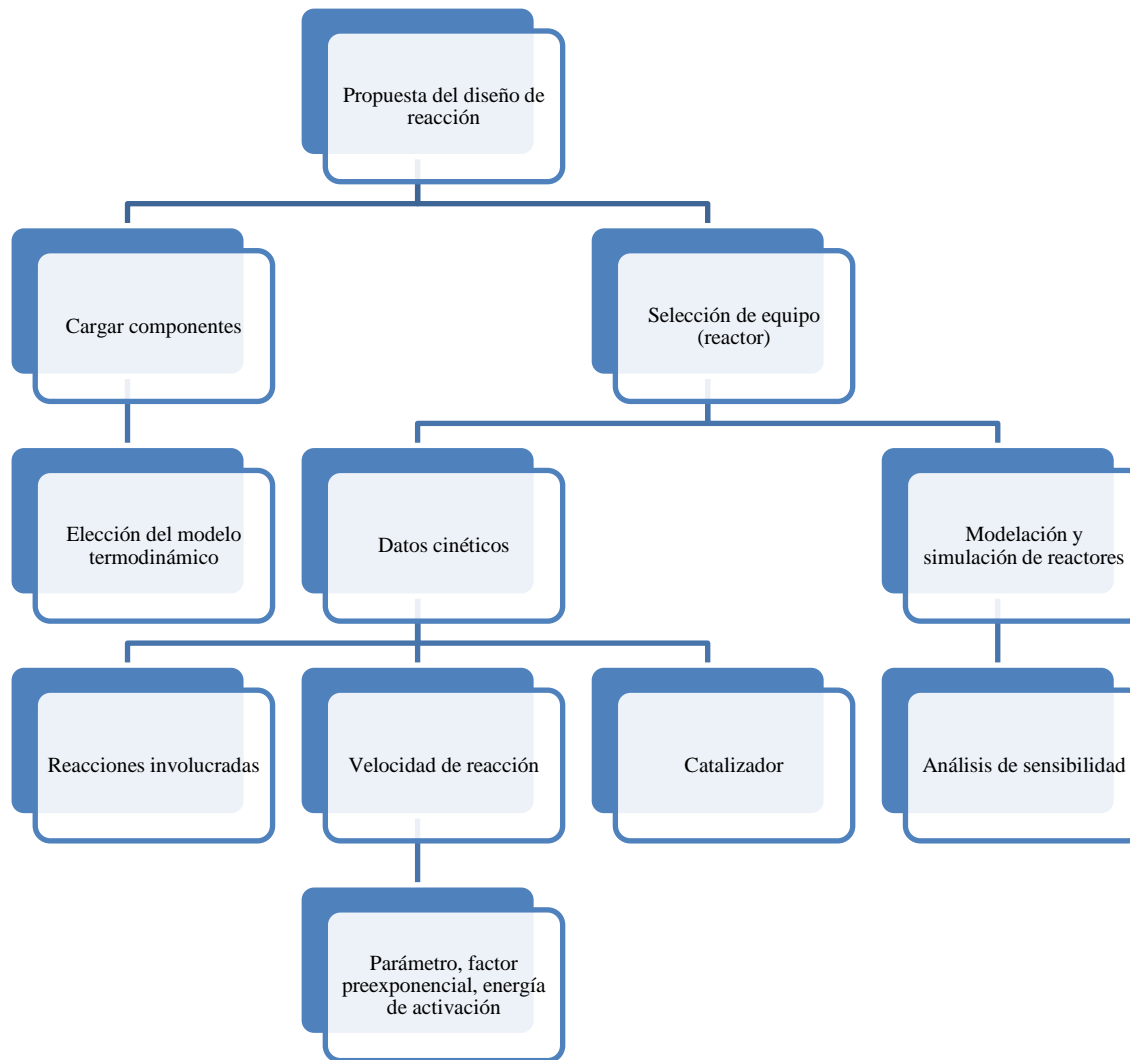


Figura 9. Propuesta del diseño de sistema de reacción basado en los antecedentes del proceso (Quintana, 2022).

Objetivo 4.- Validar en el software Aspen HYSYS V.8.8 el reactor propuesto en estado estacionario.

Para desarrollar la simulación, se inició con la selección de los componentes que se requieren en el reactor.

Posteriormente se selecciona el paquete o modelo termodinámico.

Respecto a la simulación, se carga el sistema de reacciones: sets individuales o se programan como un conjunto de reacciones, está directamente relacionado si es reacción en paralelo, en serie, espontáneamente, simultáneamente y del tipo de reacciones.

La información estructural del proceso se tomará del diagrama resultante de los objetivos 1 y 2 del DFP antes elaborado, agregando los datos obtenidos de materia prima, flujo másico, temperatura y presión.

Pruebas específicas:

- Verificar que la simulación converja en estado estacionario.
- Correr una simulación de prueba con datos base para observar la congruencia de la simulación.
- Efectuar o desarrollar una simulación a partir de los datos reportados en un caso de estudio.
- Caso de estudio propuesto.

Las herramientas a considerar: análisis estadísticos y discusión de resultados.

El régimen del proceso es en estado estacionario, con reacciones en paralelo, ya que los reactivos se consumen por dos caminos de reacción diferentes.

En la Figura 10 se muestra la metodología anteriormente descrita.

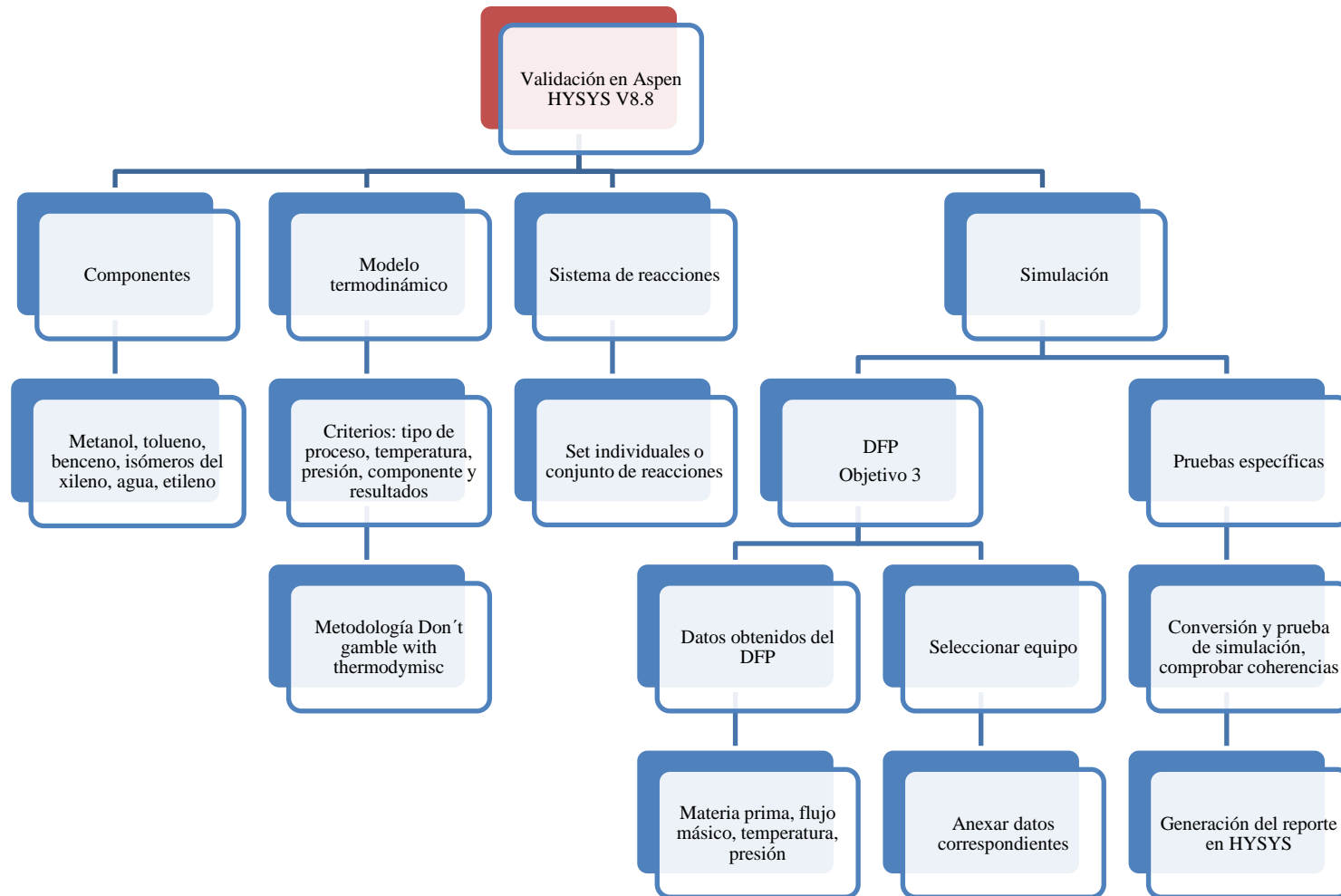


Figura 10. Validación del proceso propuesto en el software Aspen HYSYS V.8.8 (Quintana, 2022).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Diagrama DFP del proceso propuesto

Se desarrollaron dos diagramas, uno del proceso y otro específico del reactor.

La materia prima (metanol y tolueno) entra a condiciones de presión atmosférica y temperatura ambiental, pasan por una serie de bombas en paralelo (esto debido a que si alguna bomba se manda a mantenimiento, la otra podrá funcionar y así no se detiene el proceso), entran a un mezclador y después a una serie de intercambiadores de calor para elevarlo a la temperatura deseada previa al reactor, esto es porque la potencia de un solo intercambiador utilizada en este proceso no podría aumentar $417.5\text{ }^{\circ}\text{C}$ aproximadamente, ya que se necesitan condiciones de 442.5°C y 4 bar a la entrada del reactor. Posteriormente sale del reactor y entra a dos intercambiadores de calor en serie para enfriar el producto e ingresar a una columna flash, donde sale etileno, agua y metanol en la parte del domo y por la parte del destilado sale en mayor proporción el tolueno, agua y metanol, y todos los demás productos (benceno, etileno, y los isómeros del xileno) en menores proporciones. El destilado entra a un decantador en el cual separa la fase más densa con la menos densa, en la corriente más densa sale en mayor proporción el agua y el metanol, en la menos densa metanol, tolueno y p-Xileno, cabe mencionar que en varias corrientes se presenta la mayoría de los productos, pero en diferentes proporciones, conforme pases por las diferentes columnas de destilación, los productos se irán purificando.

El diagrama del proceso completo y el diagrama del reactor se encuentra en el Anexo B, en la Figura 11 se muestra el proceso de producción de p-Xileno.

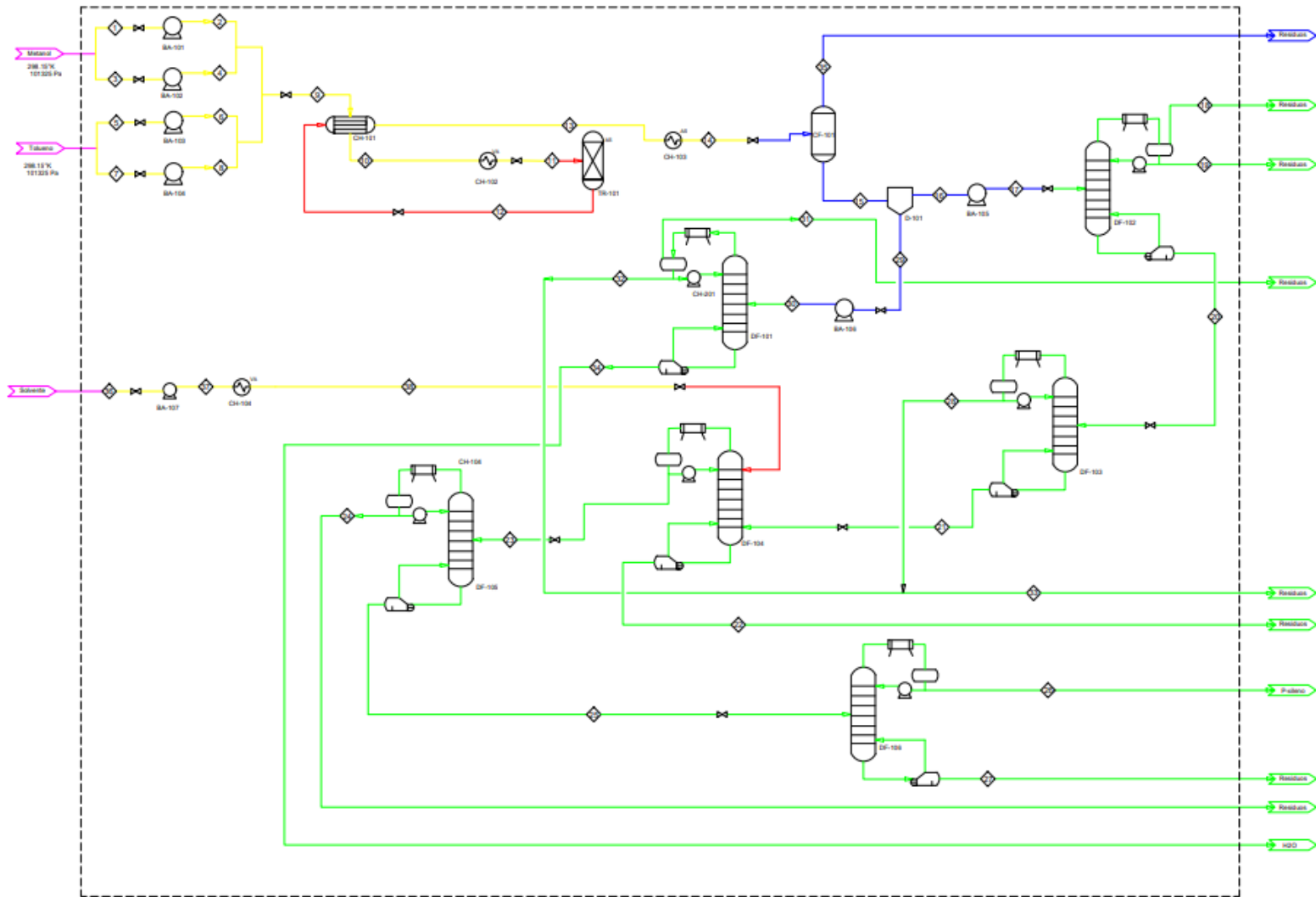


Figura 11. Diagrama DFP de producción de p-Xileno (Quintana, 2022).

4.2 Diagrama DFP del reactor propuesto

En la corriente 11 los reactivos pasan por la tubería, antes de ingresar al reactor pasa por una válvula automática HV-101 y aun lado está posicionado una Figura 8, esta sirve para cuando se necesite cerrar el paso del flujo y se le de mantenimiento al reactor, cabe destacar que alrededor del reactor se encuentran varias conexiones bridadas con el fin de desmontar el reactor en un futuro para limpieza, mantenimiento o cambio. Los reactivos que ingresan al reactor son tolueno y metanol. El reactor contiene en su interior el catalizador Zeolita ZSM-5 modificado con Mg que permite la selectividad del p-Xileno que es nuestro producto deseado.

Los reactivos ingresan a 442.5°C y 4 bar, para calentar el reactor se utiliza integración de calor, se simboliza con HI, la integración de calor no se calcula en este trabajo ya que el objetivo no cuenta con el cálculo de todos los equipos del proceso, por esta razón no se especifica cuánto calor entra, sin embargo, en la simulación se hace referencia al calor que se requiere para que se lleve a cabo la reacción.

Respecto a los servicios auxiliares tenemos el agua de enfriamiento, entra por la tubería que contiene una serie de válvulas; en una de las conexiones bridadas hay un transmisor de temperatura y manda una señal eléctrica hacia una alarma de baja y alta temperatura, y a su vez manda una señal a un indicador de control de temperatura, se manda una señal neumática hacia la válvula de control que está en la serie de válvulas de la tubería que controla la entrada del agua de enfriamiento al reactor. La instrumentación en esa sección consta de dos válvulas manuales, reducción y ampliación de tubería, en caso de mantenimiento, hay una tubería secundaria con una válvula manual para controlar el agua de enfriamiento. Después de pasar por la válvula manual consecutivamente hay una válvula de retención, con el fin de que el agua de enfriamiento no se regrese a la tubería. Por el otro lado se encuentra la salida del agua de enfriamiento con una válvula automática, se emplea para cortar el suministro de agua en caso de una rotura de la conducción aguas abajo. Así se evita la pérdida de importantes cantidades de agua.

Alrededor del reactor se cuenta con un indicador de temperatura, este instrumento es de control compartido accesible al operador, también una válvula de switch de presión que es un instrumento discreto accesible para el operador, conecta con una válvula de alivio de presión y

una válvula de retención para que el vapor no retorne, junto a este hay un indicador de presión accesible para el operador.

A un costado del reactor se encuentra un indicador de control de nivel que manda una señal eléctrica hacia una válvula de control en la salida del producto. La tubería de salida de los productos cuenta con la misma instrumentación a la entrada del reactor y una serie de válvulas similares a las que se utilizan en la tubería de la entrada de agua de enfriamiento.

En la siguiente sección se hace mención específicamente de la simulación del reactor.

En el caso específico del reactor, la Figura 12 muestra el diagrama del reactor PBR

4.3 Análisis de sensibilidad

Se retomaron los 3 trabajos más completos de los artículos y se elaboró un análisis de sensibilidad.

Las condiciones de temperatura, presión y flujo a la entrada del reactor se muestran en la Tabla 10.

Tabla 10. Condiciones de temperatura, presión y flujo a la entrada del reactor de los 3 artículos más sobresalientes de la investigación.

Autor	T (°C)	P (bar)	F (kmol/h)
Tahir (<i>et. al.</i> ,) 2013	400	3	1,500
Liu (<i>et. al.</i> ,) 2018	442.5	4	1,500
Dongliang (<i>et. al.</i> ,) 2021	442.5	4	4,199.74

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018) y (Dongliang, y otros, 2021).

La siguiente Tabla 11 muestra los datos simulados a diferentes temperaturas y presiones de las condiciones de los artículos sobresalientes.

Tabla 11. Temperatura, flujo y fracción molar de p-Xileno a 3 y 4 bar.

Temperatura del reactor	Flujo mol P-x (kgmol/h) a 3 bar	Fracción mol p-X a la salida a 3 bar	Flujo mol P-x (kgmol/h) a 4 bar	Fracción mol p-X a la salida a 4 bar
400	109.3279	0.0668	152.1008	0.0905
402.5	111.3786	0.068	154.9612	0.092
405	113.265	0.069	156.8861	0.0931
407.5	115.312	0.0701	159.1197	0.0942
410	117.3781	0.0713	161.6522	0.0956
412.5	119.4026	0.0724	163.7262	0.0967
415	121.4446	0.0735	165.8549	0.0978
417.5	123.4836	0.0746	168.1706	0.099
420	125.7506	0.0759	170.5038	0.1002
422.5	127.1377	0.0766	172.6727	0.1013
425	129.1545	0.0777	174.5514	0.1023
427.5	131.1656	0.0788	176.7994	0.1035
430	133.1704	0.0799	179.0647	0.1046

432.5	135.1683	0.081	181.1562	0.1057
435	137.1592	0.0821	182.8255	0.1066
437.5	139.1408	0.0831	184.7331	0.1076
440	141.115	0.0842	186.756	0.1086
442.5	143.0788	0.0852	188.7594	0.1096

Fuente. Propia.

Existe una diferencia de aproximadamente 40 a 50 kmol/h entre 3 y 4 bar. Los resultados son paralelos entre sí.

Teniendo dichos datos, se seleccionó la temperatura óptima de 442.5 °C a la entrada del reactor y una presión de 4 bar, el flujo es de 1,500 kmol/h (1,000 T y 500 M).

A continuación, se muestra la Figura 13 del análisis de fracción molar de p-Xileno respecto al cambio de presión y temperatura.

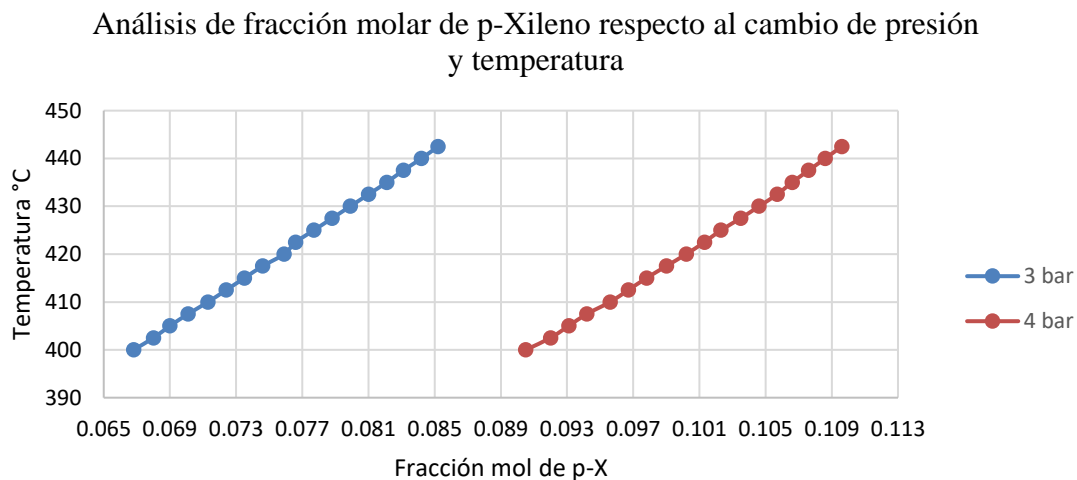


Figura 13. Análisis de fracción molar de p-Xileno respecto al cambio de presión y temperatura (Quintana, 2022).

4.4 Simulación del reactor

4.4.1 Selección de componentes

Primero se selecciona los componentes, en este caso los reactivos y productos que se esperan: tolueno, benceno, p-Xileno, m-Xileno, o-Xileno, agua, etileno y metanol. La Figura 14 muestra la selección.

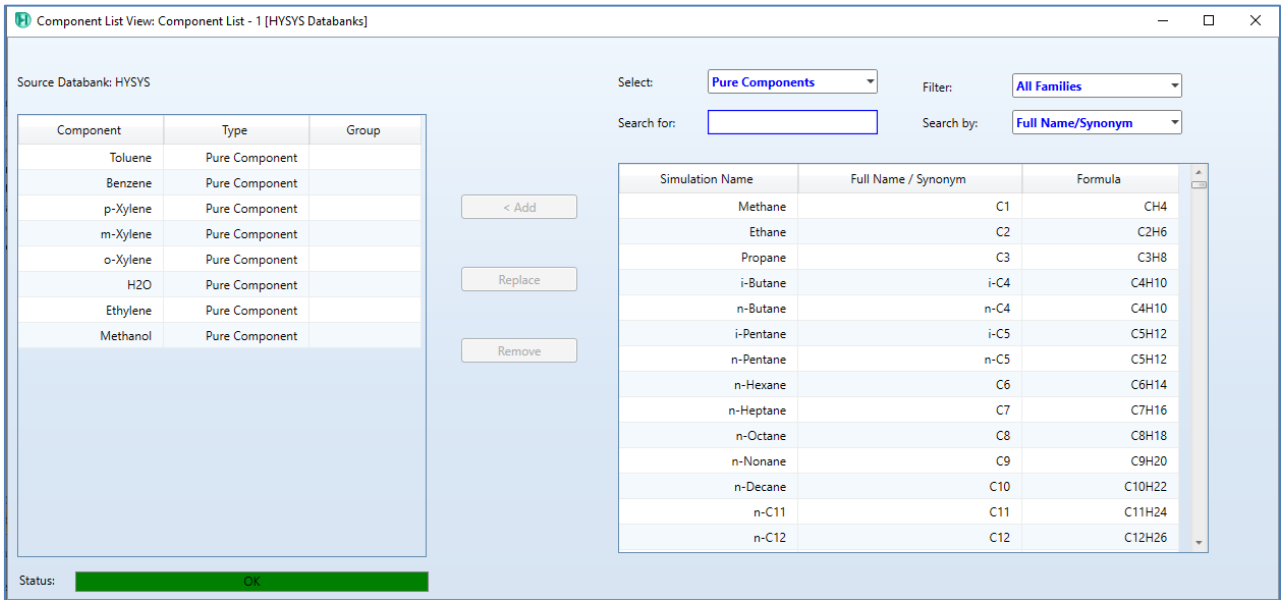


Figura 14. Selección de componentes para la simulación del reactor (Quintana, 2022).

4.4.2 Selección de modelo

La selección del modelo termodinámico usado en esta simulación fue Peng-Robinson, éste se añade después de los componentes. La Figura 15 muestra la selección.

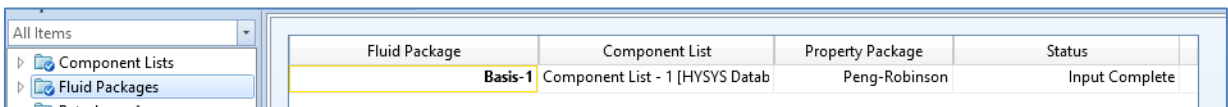


Figura 15. Selección de modelo termodinámico (Quintana, 2022).

4.4.3 Cinética

Se incorporan las cinéticas de reacción antes mencionadas en el Capítulo 2, sección de cinética. La Figura 16 muestra que se añadieron 5 reacciones en el simulador.

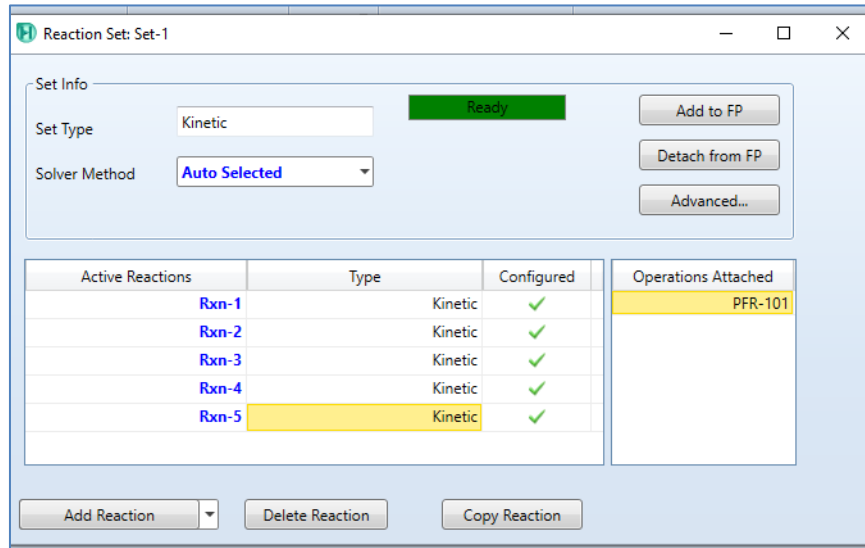


Figura 16. Reacciones en el simulador (Quintana, 2022).

En las siguientes Figuras (17-21) se muestran las cinéticas de las 5 reacciones con sus respectivos reactivos y productos, y ley de velocidad de cada uno.

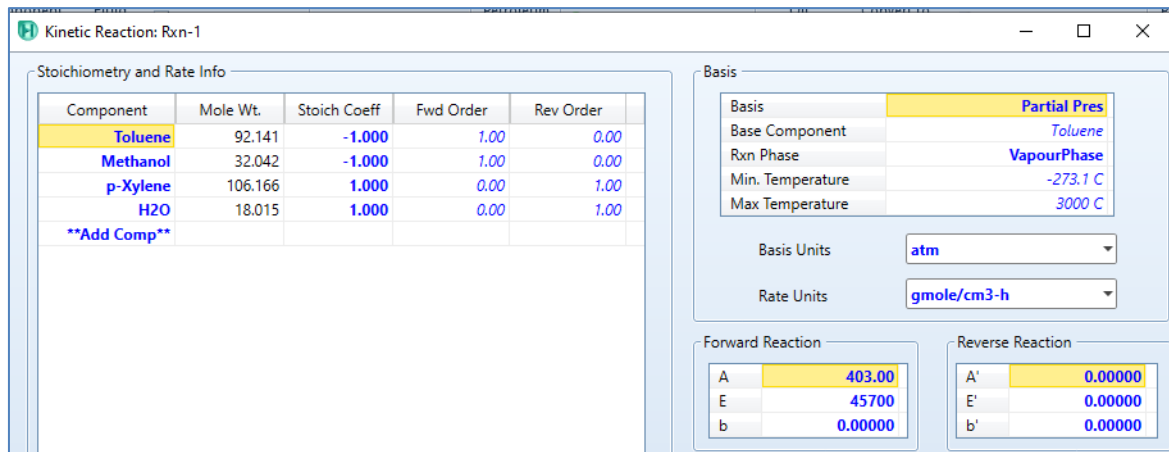


Figura 17. Cinética de la reacción 1 (Quintana, 2022).

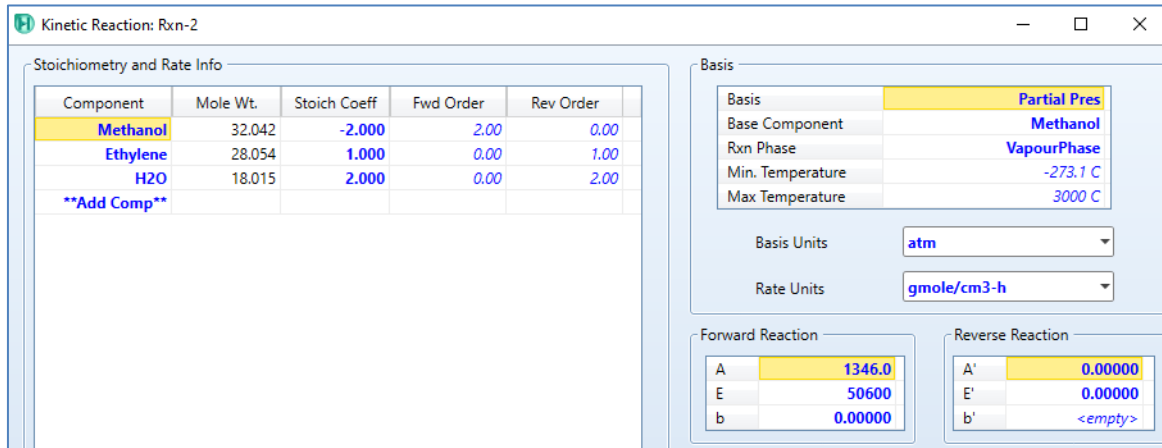


Figura 18. Cinética de la reacción 2 (Quintana, 2022).

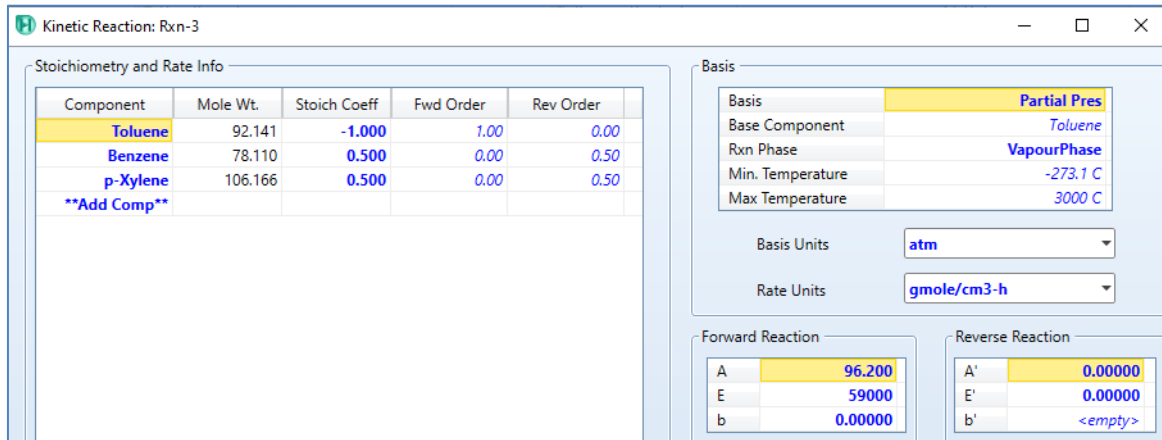


Figura 19. Cinética de la reacción 3 (Quintana, 2022).

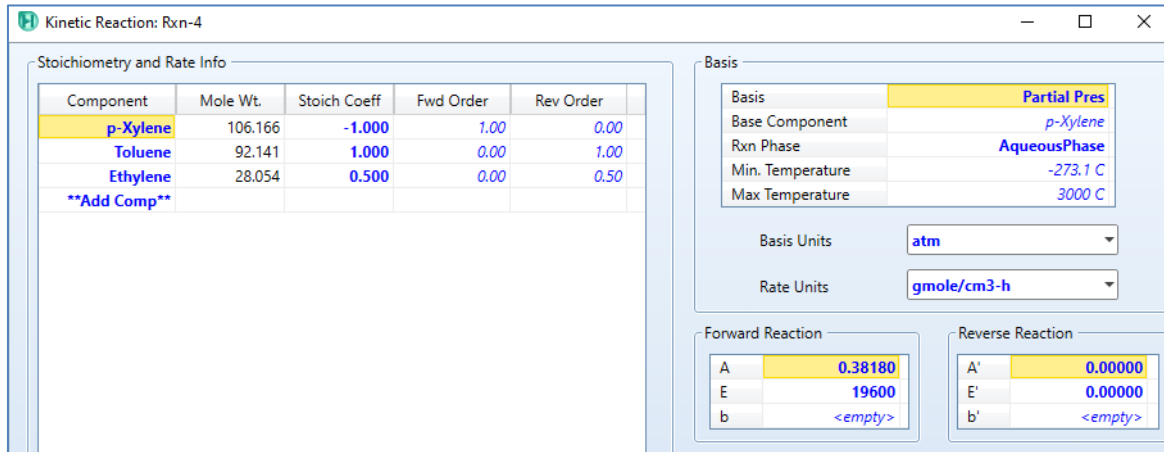


Figura 20. Cinética de la reacción 4 (Quintana, 2022).

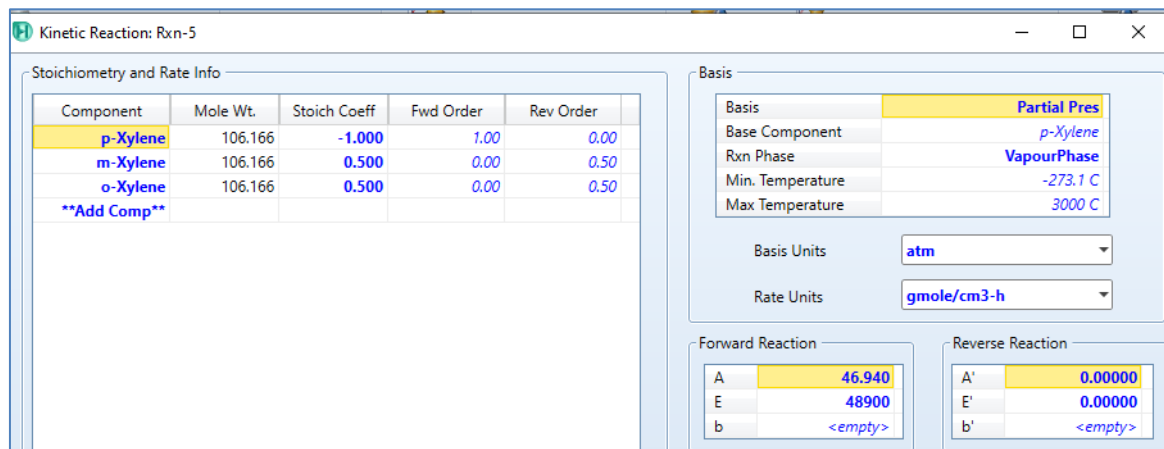


Figura 21. Cinética de la reacción 5 (Quintana, 2022).

Se utilizó el reactor PBR para esta simulación en el cual se muestra en la Figura 22.

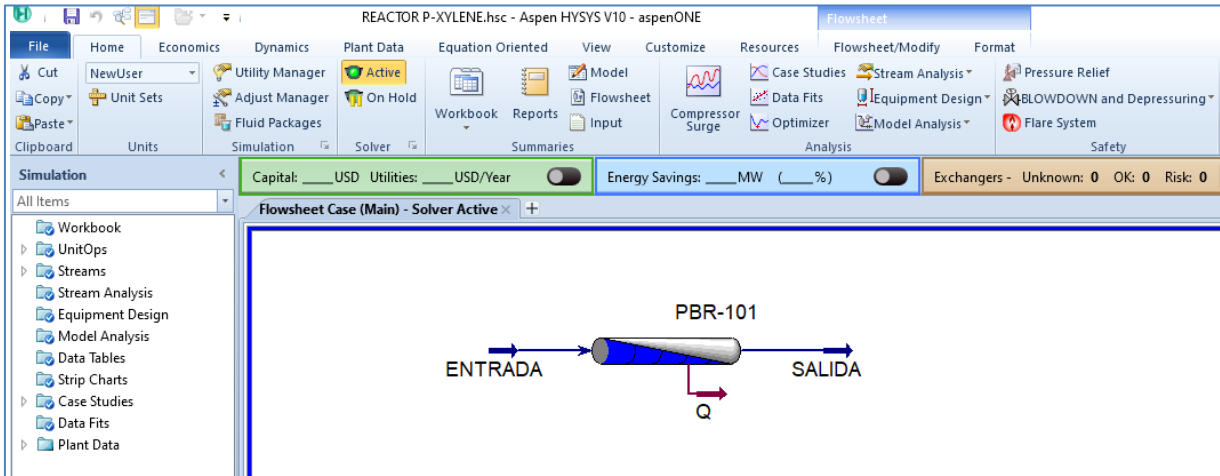


Figura 22. Reactor PBR (Quintana, 2022).

4.5 Corriente de alimentación

En el flujo de alimentación a la entrada del reactor son 1500 kmol/h (1000 tolueno y 500 metanol) con una composición de 0.3333 y 0.6667 respectivamente, a 442 °C y 4 bar.

La Figura 23 muestra la corriente de entrada al reactor.

Material Stream: ENTRADA			
Worksheet	Stream Name	ENTRADA	Vapour Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	442.5	442.5
Composition	Pressure [bar]	4.000	4.000
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	1500	1500
Petroleum Assay			

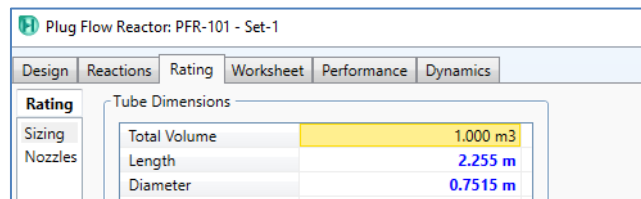
Figura 23. Corriente de entrada al reactor (Quintana, 2022).

4.6 Dimensiones del reactor

De acuerdo a las ecuaciones 24, 25 y 26 mencionadas en la sección de la metodología para el dimensionamiento del reactor, tomando en cuenta el volumen base de 1 m³, tenemos como resultado la ecuación 27:

$$r = \sqrt[3]{\frac{1\text{m}^3}{6\pi}} = 0.3757\text{m} \quad (27)$$

Como resultado D=0.7515m y L=2.255m, a continuación, se muestra la Figura 24 del dimensionamiento del reactor PBR.

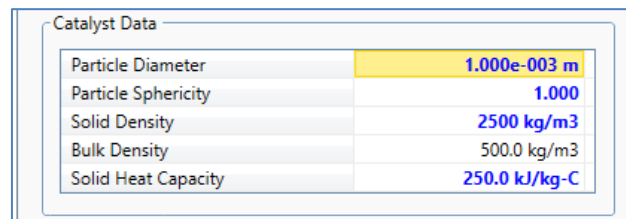


Plug Flow Reactor: PFR-101 - Set-1	
Rating	
Tube Dimensions	
Total Volume	1.000 m3
Length	2.255 m
Diameter	0.7515 m

Figura 24. Dimensionamiento del PBR (Quintana, 2022).

4.7 Catalizador

La información y datos del catalizador se tomaron de los artículos antes mencionados en los antecedentes, los datos se muestran en la Figura 25:



Catalyst Data	
Particle Diameter	1.000e-003 m
Particle Sphericity	1.000
Solid Density	2500 kg/m3
Bulk Density	500.0 kg/m3
Solid Heat Capacity	250.0 kJ/kg-C

Figura 25. Datos del catalizador (Quintana, 2022).

4.8 Productos

El resultado de las reacciones y condiciones antes mencionadas a la salida se muestran en la Figura 26, se menciona los flujos molares a la salida de todos los productos.

SALIDA		
Temperature	442.5	C
Pressure	3.990	bar
Molar Flow	1722	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (Toluene)	306.5045	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (p-Xylene)	188.7594	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (Benzene)	1.6943	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (m-Xylene)	1.4963	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (o-Xylene)	1.4963	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (H2O)	633.6543	kgmole/h
Master Comp Molar Flow (Ethylene)	221.7981	kgmole/h

Figura 26. Condiciones y flujos molares a la salida del reactor (Quintana, 2022).

En la Figura 27 se hace mención de las composiciones de entrada y salida del reactor.

Compositions		
	SALIDA	ENTRADA
Comp Mole Frac (Toluene)	0.1780	0.3333
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0010	0.0000
Comp Mole Frac (p-Xylene)	0.1096	0.0000
Comp Mole Frac (m-Xylene)	0.0009	0.0000
Comp Mole Frac (o-Xylene)	0.0009	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.3680	0.0000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.1288	0.0000
Comp Mole Frac (Methanol)	0.2128	0.6667

Figura 27. Composiciones de entrada y salida del reactor (Quintana, 2022).

Los flujos de la corriente de entrada y salida del reactor se muestran en la Figura 28.

Material Streams			
		SALIDA	ENTRADA
Vapour Fraction		1.0000	1.0000
Temperature	C	442.5	442.5
Pressure	bar	3.990	4.000
Molar Flow	kgmole/h	1722	1500
Mass Flow	kg/h	7.811e+004	7.811e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	98.59	93.22
Heat Flow	kJ/h	-1.349e+008	-1.166e+008

Figura 28. Flujo de las corrientes de entrada y salida (Quintana, 2022).

La corriente de energía para el reactor se muestra en la Figura 29

Energy Streams		
		Q
Heat Flow	kJ/h	1.828e+007

Figura 29. Corriente de energía en el reactor (Quintana, 2022).

En la Figura 30 se muestra la fracción másica de los reactivos y el p-Xileno respecto a lo largo del reactor.

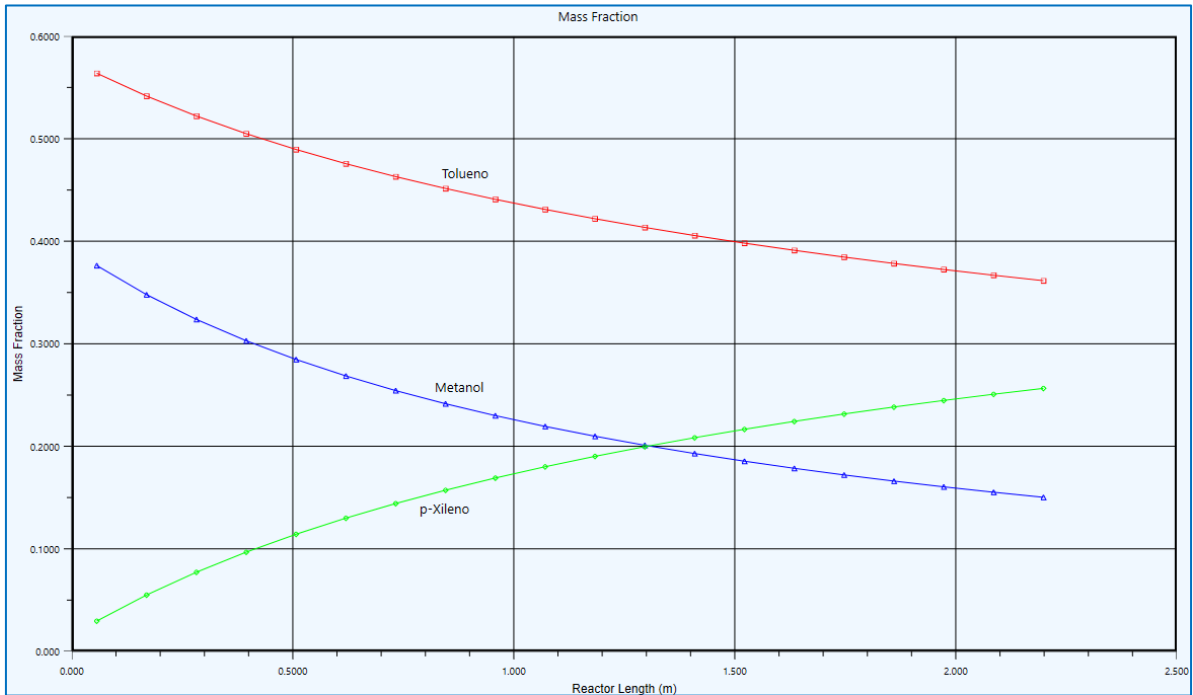


Figura 30. Fracción másica de los reactivos y el p-Xileno (Quintana, 2022).

En esta gráfica se comprueba que, a lo largo del reactor, la fracción másica de los reactivos tolueno y metanol disminuyen ya que están reaccionando y el p-Xileno que es nuestro producto deseado va aumentando a lo largo del reactor.

4.9 Validación de la propuesta

Se compara los resultados del reactor PBR simulado en este proceso con los 3 artículos sobresalientes mencionados en la sección de análisis de sensibilidad. En la Tabla 12 se sintetiza los resultados de los artículos y los de este trabajo.

Tabla 12. Síntesis de los resultados de los artículos sobresalientes.

Condiciones	Unidades	Autores							
		Tahir (<i>et. al.</i>) 2013		Liu (<i>et. al.</i>) 2018		Dongliang (<i>et. al.</i>) 2021		Quintana 2022	
		Entrada	Salida	Entrada	Salida	Entrada	Salida	Entrada	Salida
Flujo molar	kmol/h	1,538.89	1,609.77	1,132.74	1,226.93	9,462.88	9,495.24	1,500	1,722
flujo másico	kg/h	110,549.50	110,549.50	80,633.10	80,633.10			78,110	78,110

Fracción vapor		1	1	1	1	1	1	1	1
Temperatura	°C	399.95	400	442.5	442.5	442.5	442.5	442.5	442.5
Presión	bar	3	2.99	4	4	4	4	4	3.99
Flujo molar del componente									
Tolueno	kmol/h	1,000	804.05	727.29	515.56	3,633.74	3,442.59	1,000	306.5
Metanol	kmol/h	500	172.29	393	8.4	566.17	334.05	500	366.44
p-Xileno	kmol/h	18.31	204.52	1.9	189.58	1.17	179.22	0	188.75
Agua	kmol/h	16.86	344.57	0	384.6	5,248.20	5480.31	0	633.65
Benceno	kmol/h	0.33	5.33	10.49	18.24	12.35	24.23	0	1.69
Etileno	kmol/h	3.14	74.02	0	94.19	1	33.37	0	221.79
m-Xileno	kmol/h	0.2	2.57	0.06	8.21	0.24	0.86	0	1.49
o-Xileno	kmol/h	0.05	2.42	0.01	8.16	0	0.61	0	1.49

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018), (Dongliang, y otros, 2021) y (Quintana 2022).

De acuerdo a los resultados obtenidos en la simulación del reactor, calculamos la selectividad del p-Xileno (S_{p-x}). A continuación, se muestra la ecuación 28 con el resultado:

$$S_{p-x} = \frac{F_{p-x}^{out}}{F_{m-x}^{out} + F_{p-x}^{out} + F_{o-x}^{out}} * 100 = \frac{188.75}{1.49 + 188.75 + 1.49} * 100 = 98.44\% \quad (28)$$

La selectividad del p-Xileno es de 98.44%.

Para el cálculo de la conversión del metanol se utiliza la ecuación 29 con el resultado:

$$X_M = \frac{F_M^{in} - F_M^{out}}{F_M^{in}} = \frac{500 - 366.44}{500} * 100 = 26.71\% \quad (29)$$

Para el cálculo de la conversión del tolueno se utiliza la ecuación 30 con el resultado.

$$X_T = \frac{F_T^{in} - F_T^{out}}{F_T^{in}} = \frac{1000 - 306.5}{1000} * 100 = 69.35\% \quad (30)$$

Para la relación de alimentación se utiliza la ecuación 31 con su resultado.

$$\frac{F_T}{F_M} = \frac{1,000}{500} = 2 \quad (31)$$

Tomando en cuenta el peso del catalizador antes mencionado en la sección del catalizador, se calcula el espacio-tiempo. La ecuación 32 hace referencia a éste.

$$\frac{W_{cat}}{F_T} = \frac{1,000}{1,000} = 1 \quad (32)$$

Respecto a los cálculos y la información de los artículos, se muestra la Tabla 13 donde se compara el espacio-tiempo, la relación de alimentación, la selectividad del p-Xileno, la conversión del tolueno y el metanol.

Tabla 13. Comparación de espacio-tiempo, relación de alimentación, selectividad de p-Xileno, Conversión de tolueno y metanol.

Condiciones	Unidades	Autores			
		Tahir (<i>et. al.</i>),2013	Liu (<i>et. al.</i>),2018	Dongliang (<i>et. al.</i>),2021	Emili 2022
W_{cat}/F_T	$g \cdot h \cdot mol^{-1}$	2.5	3.4	0.95	1
F_T/F_M		2	1.9	6.43	2
S_{p-X}	%	97.7	92	99.26	98.44
X_T	%	23	28.2	5.37	69.35
X_M	%	65.5	98	41.89	26.71

Fuente: (Tahir Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013), (Liu et. al., 2018), (Dongliang, y otros, 2021) y (Quintana 2022).

De acuerdo al resultado de este trabajo, se encontraron algunas similitudes con los otros como se esperaba, en el caso de W_{cat} y F_T/F_M , se calcularon y están dentro del rango que se ha trabajado respecto a los autores. La selectividad del p-X se calculó y también está dentro del rango. La diferencia significativa es la conversión del tolueno que esta por arriba de las reportadas y la conversión del metanol por debajo.

CONCLUSIONES

En la mayoría de los trabajos que se reportan en este proceso, se trabaja con rangos de 442°C y 4 bar, si aumenta la temperatura y la presión el efecto que se tiene en la conversión de p-Xileno aumenta, la razón por la que no se trabaja a más de 450°C es debido a que la conversión no es significativamente mayor respecto a la inversión que debe hacerse para aumentar el calor y la presión; no es rentable económicamente.

La conversión de T y M no fueron las esperadas de acuerdo a lo reportado en los trabajos. Se tomó como referencia los resultados de Liu que fueron los más altos (28.2% y 98%), Tahir obtuvo 18.43% y 33.17% menor respectivamente, Dongliang obtuvo 80.95% y 57.26% menor respectivamente y Emili obtuvo 145.92% mayor y 72.75% menor respectivamente. Sin embargo, el flujo de p-Xileno está dentro del rango reportado a la salida del reactor, según Tahir reportó 186.21 kmol/h de p-Xileno y Emili reportó 188.75 kmol/h, hay una diferencia de 2.54 kmol/h (se compara con este autor ya que ambos tienen 1000 kmol/h de T a la entrada y 500 kmol/h de M) y aunque las conversiones de tolueno y metanol no son las esperadas, el producto de p-Xileno es aceptable.

El producto que se podría obtener al final del proceso se estima en torno a una pureza del 99.7% sin embargo esta cantidad se alcanza si consideramos el diseño eficiente de las demás operaciones unitarias, depende del producto del reactor y de las columnas de destilación.

En los antecedentes incluyeron 11 referencias en artículos científicos de los cuales se tomaron como base los 3 artículos más completos.

El DFP del reactor incluyó instrumentación, simbología y condiciones operativas basado en las normas ANSI, ISA y PEMEX.

El sistema de reacción es polar y de sistema homogéneo ya que las variables son la temperatura, presión y composición. Se incluyeron 5 reacciones en paralelo: la 1ra, 3ra, 4ta y 5ta de primer orden y la 2da reacción de segundo orden.

La validación en Aspen HYSYS V.8.8 dio resultado la cantidad de p-Xileno dentro del rango esperado y de los propuestos por los autores.

REFERENCIAS

- Alaloul, W. S. (2020). Mechanical and Thermal Properties of Interlocking Bricks Utilizing Wasted Polyethylene Terephthalate. *International Journal of Concrete Structures and Materials*, 1-11.
- Arias, A. (2020). *Repositorio UTEC*. Obtenido de https://repositorio.utec.edu.pe/bitstream/20.500.12815/141/1/Arias%20Aguilar_TI.pdf
- Bhatia, S., Chandra, S., & Das, T. (1989). Simulation of the Xylene Isomerization Catalytic Reactor. *American Chemical Society*, 1185-1190.
- Bragas, A. B., Broggi Lloret, G. A., Cabrera, S. F., & Perticarolli, G. (2019). *UTN*. Obtenido de https://ria.utn.edu.ar/bitstream/handle/20.500.12272/4270/Obtencion%20de%20p%20xileno%20a%20partir%20de%20la%20desproporci%C3%B3n%20selectiva%20de%20tolueno_Bragas_Broggi%20Lloret_Cabrera_Perticarolli.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Carlroth. (11 de 05 de 2015). *ROTH*. Obtenido de <https://www.carlroth.com/medias/SDB-8817-ES-ES.pdf?context=bWFzdGVyfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0c3wyODQ3MDB8YXBwbGljYXRpb24vcGRmfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0cy9oM2IvaDc2Lzg5NTA5MjQwNTA0NjJucGRmfGYyZGFhZGE2ZDVkNTczMjk3NDU4ZDk2ZDEyMTBiZDk2OWU3ZDZjOTkxOGU3MGY1Y2FkMjQ4>
- Carlson, E. C. (October 1996). Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. *Chemical Engineering Progress*, 35-46.
- ChemicalSafetyFacts.org. (2021). *ChemicalSafetyFacts.org*. Obtenido de <https://www.chemicalsafetyfacts.org/es/paraxileno/#content>
- Daramola, M., Burger, A., Pera-Titus, M., Giroir-Fendler, A., Miachon, S., Dalmon, J., & Lorenzen, L. (2009). Separation and isomerization of xylenes using zeolite membranes: a short overview. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 815-837 (5).
- Fundación AQUAE. (2020). *Fundación AQUAE*. Obtenido de <https://www.fundacionaquae.org/cuanto-tiempo-tardan-degradarse-desechos/#:~:text=Hemos%20hablado%20sobre%20cu%C3%A1nto%20tiempo,tardar%201.000%20a%C3%B1os%20en%20desaparecer.>

- Goncalves, J., & Rodríguez, A. (2015). Revamping an existing aromatics complex with simulated moving-bed reactor for p-Xylene production. *Chemical Engineering Technology*, 2340-2344.
- Instituto Petroquímico Argentino. (2016). *Boletín informativo*. Argentina.
- Liu *et. al.* (2018). Intensified p-Xylene Production Process through Toluene and Methanol Alkylation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1-36.
- Liu, J., Yang, Y., Wei, S., Shen, W., Rakovitis, N., & Li, J. (2018). Intensified p-Xylene Production Process through Toluene and Methanol Alkylation. *I&EC research*, 1-36.
- Machado, D. (2009). Simulacao da Producao de Paraxileno. *Repositorio Cientifico del Instituto Politécnico de Oporto*.
- Mahdi, A.-k., Abdullah, A., Toubia, H., Reza, B., & Marjan, G. (2018). Toluene methylation to para-xylene. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 1-10.
- Martinez, A. C. (Julio de 1991). *Tesis IPN*. Obtenido de <https://tesis.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/17081/25-1-11482.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- Minceva, M., & Rodríguez, A. E. (2005). UOP'S PAREX: Modeling, Simulation and optimization. *ENPROMER*.
- Minceva, M., Gomes, P., Meshko, V., & Rodríguez, A. (2008). Simulated moving bed reactor for isomerization and separation of p-xylene. *Chemical Engineering Journal*, 305-323.
- Obregon, R., Elizondo, N., & Rodriguez, C. (2004). Obtención selectiva de para-xileno sobre una zeolita sintética ZSM-5. *Ciencia UANL*, 169-174.
- Shi, Q., Goncalves, J., Ferreira, A., & Rodriguez, A. (2021). A review of advances in production and separation of xylene isomers. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 1-16 .
- Sociedad de Instrumentistas de América. (1992). Obtenido de pdfcoffee: <https://pdfcoffee.com/qdownload/norma-ansi-isa-s51-1984r-1992-5-pdf-free.html>
- Tahir Ashraf, M., Chebbi, R., & Darwish, N. (2013). Process of p-Xylene production by Highly Selective Methylation of Toluene. *I&EC research*, 13730-13737.

- Tarditi, A. M. (2007). *Biblioteca virtual unl*. Obtenido de <https://bibliotecavirtual.unl.edu.ar:8443/bitstream/handle/11185/61/Tesis.pdf?sequence=13&isAllowed=y>
- Turton, R., Bailie, R., Whiting, W., & Bhattacharyya, D. (2012). *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. USA: Copyright Pearson Education.
- UNAM. (2015). *depa.fquim.unam*. Obtenido de http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/apuntesparte7_10181.pdf
- Walas, S. M. (1990). *Chemical Process Equipment*. Massachusetts: Copyright.

ANEXO A

Topología de procesos

Es un diagrama de flujo del proceso esquemático para la producción de p-Xileno. Este diagrama ilustra la ubicación de las principales piezas de equipo y las conexiones que hacen las corrientes de proceso entre los equipos. La ubicación y la interacción entre el equipo y los flujos de proceso se denominan topología de proceso.

El equipo está representado simbólicamente por "iconos" que identifican operaciones específicas de la unidad. Cualquiera que sea el conjunto de símbolos que se utilice (simbología), rara vez hay problemas para identificar la operación representada por cada icono. Cada pieza principal del equipo de proceso se identifica con un número en el diagrama. En la parte superior del diagrama se imprime una lista de los números de equipo junto con un breve nombre descriptivo del equipo. La ubicación de estos números y nombres de equipo corresponde aproximadamente a la ubicación horizontal del equipo correspondiente.

Para escribir la nomenclatura de los equipos se proporciona la información necesaria para la identificación de los iconos del equipo de proceso que se muestran en un DFP. Por ejemplo:

PAG-101A / B identifica el equipo como una bomba.

PAG-101A / B indica que la bomba está ubicada en el área 100 de la planta. P-101

A / B indica que esta bomba específica es la número 01 en la unidad 100.

P-101A / **B** indica que hay una bomba de respaldo instalada. Por lo tanto, hay dos bombas idénticas, P-101A y P-101B. Una bomba estará funcionando mientras que la otra estará inactiva.

Las letras de los equipos dependen de la nomenclatura que se utilice, en este trabajo se utiliza las normas ISA.

Número de identificación típico (números TAG)

Cada instrumento o función para ser designada está diseñada por un código alfanumérico o etiquetas con números. La parte de identificación del lazo del número de etiqueta generalmente es común a todos los instrumentos o funciones del lazo. Un sufijo o prefijo puede ser agregado para completar la identificación. La Tabla 14 muestra el número TAG.

Tabla 14. Número de identificación típico.

Número de identificación típico (Número TAG)	
TIC 103	Identificación del instrumento o número de etiqueta
T 103	Identificación de lazo
103	Número de lazo
TIC	Identificación de funciones
T	Primera letra
IC	Letras Sucesivas

Fuente: Normas ISA (Sociedad de Instrumentistas de América, 1992).

Información de la corriente

Cada uno de los flujos de proceso se identifica con un número en un cuadro de diamante ubicado en el flujo. La dirección de la corriente se identifica con una o más puntas de flecha. Los números de flujo de proceso se utilizan para identificar flujos en el DFP y el tipo de información que normalmente se proporciona para cada flujo.

Para pequeños diagramas que contienen solo unas pocas operaciones, las características de las corrientes como temperaturas, presiones, composiciones y caudales se pueden mostrar directamente en la Figura, adyacente a la corriente. Esto no es práctico para un diagrama más complejo. En este caso, solo se proporciona el número de flujo en el diagrama. Esto indexa el flujo de información en un resumen de flujo o Tabla de flujo, que a menudo se proporciona debajo del diagrama de flujo del proceso. En este texto, el resumen de flujo se proporciona como un anexo separado del DFP. Con información del DFP y el de resumen de flujo, los problemas relacionados con los balances de materiales y otros problemas se analizan fácilmente.

Información del equipo

El elemento final del DFP es el resumen del equipo. La Tabla 15 proporciona la información necesaria para estimar los costos del equipo y proporcionar la base para el diseño detallado del equipo.

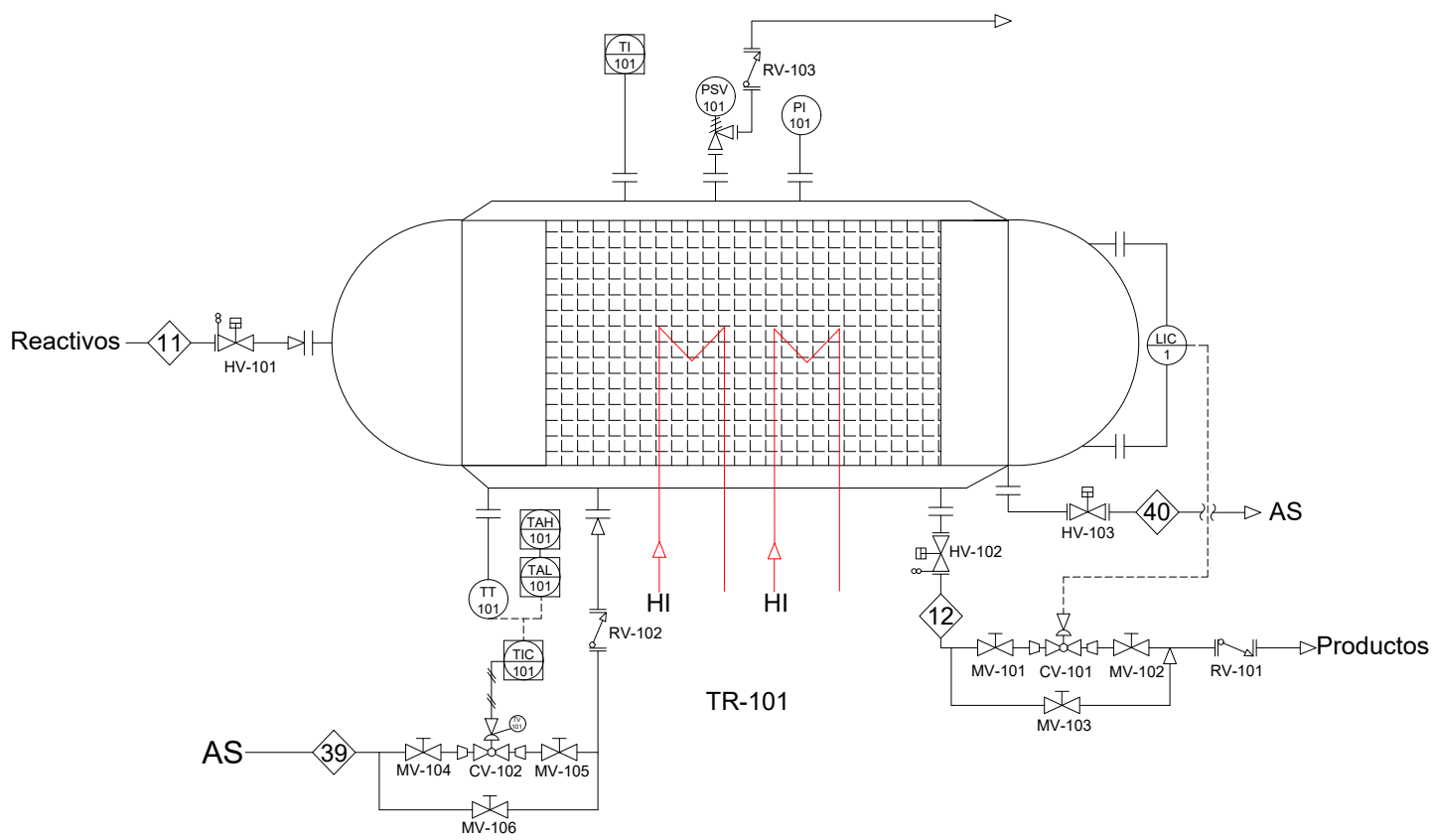
Tabla 15. Información de equipos.

Información de equipos
Torres
Tamaño (altura y diámetro), presión temperatura, número y tipo de platos, altura y tipo de embalaje, materiales de construcción.
Intercambiadores de calor
Tipo: gas-gas, gas-liq, liq-liq, condensador, vaporizador, Proceso: duty, área, temperatura y presión para ambas corrientes, numero de tubos y carcaza, materiales de construcción: tubos y carcaza.
Tanques y vessels
Altura, diámetro, orientación, presión, temperatura, materiales de construcción.
Bombas
Flujo, presión de descarga, temperatura, dif de presión, tipo de controlador, potencia en el eje, materiales de construcción.
compresores
Caudal de entrada, temperatura, presión, tipo de controlador, potencia en el eje, materiales de construcción.
calentadores
Tipo, presión de tubo, temperatura de tubo, duty, combustible, material de construcción.

Fuente: Analysis, synthesis, and design of chemical processes. (Turton, Bailie, Whiting, & Bhattacharyya, 2012)

ANEXO B

TR-101
 REACTOR PBR
 P=4bar =400000Pa
 T=442.5°C=715.65°K
 Orientación= horizontal



SIMBOLOGÍA

- Válvula manual
- Válvula de control
- Válvula de compuerta
- Válvula automática
- Válvula de alivio de presión
- Válvula de retención
- Figura 8
- Reducción
- Ampliación
- Conexión bridada
- Instrumento discreto accesible para el operador
- Instrumento de control compartido accesible al operador
- PIC
- LIC
- FC
- TIC
- PI
- PSV
- TT
- TI
- TAH
- TAL

LEYENDAS

- Tubería principal
- Señal eléctrica
- Señal neumática
- AS

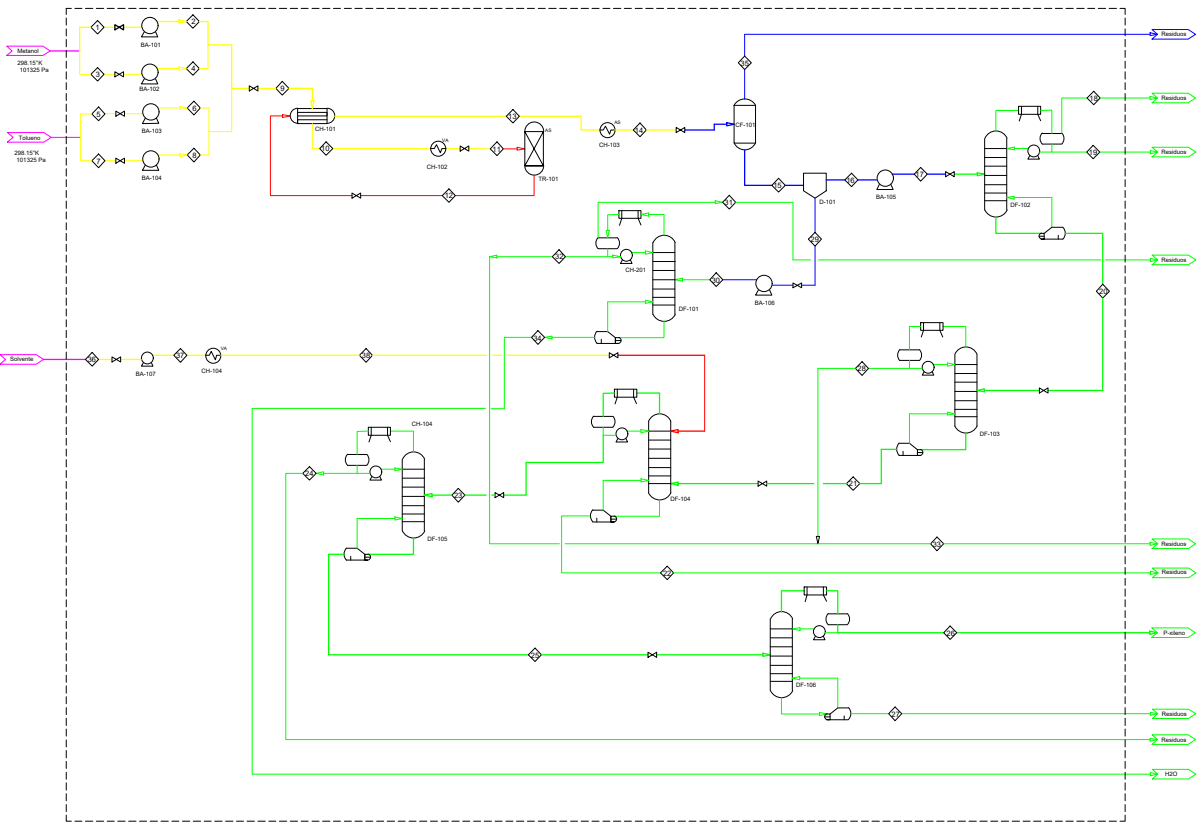
OP	FECHA	REVISORES	FECHA	POE	VAL	NUM	DEBIDO DE REFERENCIA	APROBADO POR
		MECA				0001	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA REACTOR	ESPECIALISTA
						0002	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA REACTOR	SUBGERENCIA
						0003	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA REACTOR	GERENCIA

PEMEX EXPLORACIÓN Y PRODUCCIÓN		PROYECTO	FECHA	ESCALA	HOJA	TOTAL
DE DISEÑO	DE REVISIÓN	FECHA	FECHA	FECHA	FECHA	FECHA
DRACILLOS TAMBOCO	LOPEZ	10/01/2011	10/01/2011	10/01/2011	10/01/2011	10/01/2011

DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO DEL REACTOR PBR PARA LA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE P-BLENDO A PARTIR DE LA METILACIÓN DE TOLUENO
 BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

A-100 al A-199

BA-101 BOMBA CENTRIFUGA AP= 27000 Pa=2.7 bar AT=273.15 K	BA-102 BOMBA CENTRIFUGA AP= 27000 Pa=2.7 bar AT=273.15 K	BA-103 BOMBA CENTRIFUGA AP= 27000 Pa=2.7 bar AT=273.15 K	BA-104 BOMBA CENTRIFUGA AP= 27000 Pa=2.7 bar AT=273.15 K	BA-105 BOMBA CENTRIFUGA AP= 27000 Pa=2.7 bar AT=273.15 K	BA-106 BOMBA CENTRIFUGA AP= 27000 Pa=2.7 bar AT=273.15 K	BA-107 BOMBA CENTRIFUGA AP= 28000 Pa=2.8 bar AT=273.15 K	CH-101 INTERCAMBIADOR DE CALOR AP= 3 bar=3000 Pa AT= 142.2°C=415.4 K ΔT= 4.46 cal/m²K	CH-102 INTERCAMBIADOR DE CALOR AP= 0.3 bar=3000 Pa AT=267°C=539.15 K	CH-103 INTERCAMBIADOR DE CALOR AP= 1.8 bar=18000 Pa AT=48.5°C=321.65 K ΔT=2 cal/m²K	CH-104 INTERCAMBIADOR DE CALOR AP= 0.3 bar=300 Pa AT= 120°C=393.15 K ΔT=2 cal/m²K	TR-101 REACTOR AP= 0.3 bar=300 Pa AT= 180°C=453.15 K Orientación Horizontal	DF-101 COLUMNA FLASH T= 80°C=353.15 K P= 1 bar=10000 Pa	DF-102 COLUMNA DE DESTILACIÓN Alte= 15.0 m Diametro= 0.3 m Alte= 1.5 m T= 80°C=353.15 K P= 1 bar=10000 Pa	DF-103 COLUMNA DE DESTILACIÓN Alte= 2.0 m Diametro= 0.3 m Alte= 1.5 m T= 80°C=353.15 K P= 1 bar=10000 Pa	DF-104 COLUMNA DE DESTILACIÓN Alte= 3.0 m Diametro= 0.3 m Alte= 1.5 m T= 80°C=353.15 K P= 1 bar=10000 Pa	DF-105 COLUMNA DE DESTILACIÓN Alte= 4.0 m Diametro= 0.3 m Alte= 1.5 m T= 80°C=353.15 K P= 1 bar=10000 Pa	DF-106 COLUMNA DE DESTILACIÓN Alte= 5.0 m Diametro= 0.3 m Alte= 1.5 m T= 80°C=353.15 K P= 1 bar=10000 Pa	D-101 DECANTADOR AP= 1 bar=10000 Pa AT= 60°C=333.15 K
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	--	---	--	--	--	--	--




SIMBOLOGÍA	
	Válvula
	Bomba centrífuga
	Intercambiador de calor de tubo y coraza
	Intercambiador de calor
	Reactor
	Columna flash
	Decantador
	Columna de destilación
LEYENDAS	
	Tubería principal
	Limite de batería
	Agua de enfriamiento
	Vapor y condensado
	Almacenamiento
	Preparación
	Reacción
	Separación
	Purificación

OP	FECHA	REVISOR	FECHA	POE	VL	VL	REVISOR	FECHA	POE	VL	VL	REVISOR	FECHA	POE	VL	VL

DEBIDO DE REFERENCIA		APROBACION POR	
3004	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA REACCION	ESPECIALISTA	
3005	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA DESTILACION	SUBGERENCIA	
3006	DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA PURIFICACION	GERENCIA	

PEMEX EXPLORACION Y PRODUCCION	PROYECTO	PROYECTO	PROYECTO	PROYECTO	PROYECTO
--------------------------------	----------	----------	----------	----------	----------

DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO PARA LA PLANTA DE PRODUCCION DE P-XILENO A PARTIR DE LA METILACION DE TOLUENO	BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA	PROYECTO	PROYECTO	PROYECTO	PROYECTO
--	---	----------	----------	----------	----------

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: REACTOR P-XYLENE - Analysis.hsc
2		Unit Set: NewUser
3		Date/Time: Fri Apr 22 08:40:33 2022
4		
5		


6	Material Stream: SALIDA	Fluid Package: Basis-1
7		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

	Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
11			
12	Vapour / Phase Fraction	1.0000	0.0000
13	Temperature: (C)	442.5 *	442.5
14	Pressure: (bar)	3.990	3.990
15	Molar Flow (kgmole/h)	1722	0.0000
16	Mass Flow (kg/h)	7.811e+004	0.0000
17	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	98.59	0.0000
18	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-7.835e+004	-7.833e+004
19	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	202.8	202.8
20	Heat Flow (kJ/h)	-1.349e+008	0.0000
21	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	92.13 *	0.0000

PROPERTIES

	Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
22			
23			
24			
25	Molecular Weight	45.36	45.37
26	Molar Density (kgmole/m3)	6.746e-002	6.746e-002
27	Mass Density (kg/m3)	3.060	3.061
28	Act. Volume Flow (m3/h)	2.552e+004	0.0000
29	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-1727	-1727
30	Mass Entropy (kJ/kg-C)	4.471	4.471
31	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	108.5	108.5
32	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.391	2.391
33	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	1.469e+006	1.469e+006
34	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	1.564e+006	1.564e+006
35	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	3.447e+004	3.448e+004
36	CO2 Loading	---	---
37	CO2 App ML Con (kgmole/m3)	---	---
38	CO2 App WT Con (kgmol/kg)	---	---
39	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	3.237e+004	3.238e+004
40	Phase Fraction [Vol. Basis]	1.000	---
41	Phase Fraction [Mass Basis]	1.000	0.0000
42	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	1.000	0.0000
43	Mass Exergy (kJ/kg)	499.6	---
44	Partial Pressure of CO2 (bar)	0.0000	---
45	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000
46	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	2.552e+004	---
47	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	17.46	17.46
48	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	108.5	108.5
49	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	4.071e+004	0.0000
50	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	792.3	792.3
51	Act. Liq. Flow (m3/s)	---	---
52	Z Factor	---	0.9940
53	Watson K	10.98	10.98
54	User Property	---	---
55	Partial Pressure of H2S (bar)	0.0000	---
56	Cp/(Cp - R)	1.083	1.083
57	Cp/Cv	1.087	1.087
58	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	5.275e+004	---
59	Kinematic Viscosity (cSt)	6.501	0.7241
60	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	847.8	847.8
61	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	92.13	0.0000
62	Liquid Fraction	0.0000	1.000

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: REACTOR P-XYLENE - Analysis.hsc
2		Unit Set: NewUser
3		Date/Time: Fri Apr 22 08:40:33 2022
4		
5		

Material Stream: SALIDA (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

	Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
12	Molar Volume (m3/kgmole)	14.82	14.82
13	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	1163	---
14	Phase Fraction [Molar Basis]	1.0000	0.0000
15	Surface Tension (dyne/cm)	---	0.0000
16	Thermal Conductivity (W/m-K)	5.635e-002	5.301e-002
17	Viscosity (cP)	1.990e-002	2.216e-003
18	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	100.2	100.2
19	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.208	2.208
20	Cv (kJ/kgmole-C)	99.84	99.85
21	Mass Cv (kJ/kg-C)	2.201	2.201
22	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---
23	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---
24	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---
25	Reid VP at 37.8 C (bar)	9.753	9.752
26	True VP at 37.8 C (bar)	22.99	22.99
27	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	92.13	0.0000
28	Viscosity Index	-1.585	---
29	Ideal Gas Cp/Cv	1.083	1.083
30	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	108.1	108.1
31	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	2.382	2.382
32	Bubble Point Pressure (bar)	---	---


COMPOSITION

Overall Phase Vapour Fraction 1.0000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
39	Toluene	306.5045	0.1780	28241.5664	0.3616	32.4599
40	Benzene	1.6943	0.0010	132.3391	0.0017	0.1500
41	p-Xylene	188.7594	0.1096	20039.8341	0.2566	23.1881
42	m-Xylene	1.4963	0.0009	158.8519	0.0020	0.1832
43	o-Xylene	1.4963	0.0009	158.8519	0.0020	0.1799
44	H2O	633.6543	0.3680	11415.3464	0.1461	11.4384
45	Ethylene	221.7981	0.1288	6222.2806	0.0797	16.2366
46	Methanol	366.3981	0.2128	11740.0914	0.1503	14.7540
47	Total	1721.8012	1.0000	78109.1617	1.0000	98.5902

Vapour Phase Phase Fraction 1.000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
52	Toluene	306.5045	0.1780	28241.5664	0.3616	32.4599
53	Benzene	1.6943	0.0010	132.3391	0.0017	0.1500
54	p-Xylene	188.7594	0.1096	20039.8341	0.2566	23.1881
55	m-Xylene	1.4963	0.0009	158.8519	0.0020	0.1832
56	o-Xylene	1.4963	0.0009	158.8519	0.0020	0.1799
57	H2O	633.6543	0.3680	11415.3464	0.1461	11.4384
58	Ethylene	221.7981	0.1288	6222.2806	0.0797	16.2366
59	Methanol	366.3981	0.2128	11740.0914	0.1503	14.7540
60	Total	1721.8012	1.0000	78109.1617	1.0000	98.5902

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: REACTOR P-XYLENE - Analisis.hsc
2		Unit Set: NewUser
3		Date/Time: Fri Apr 22 08:40:33 2022
4		
5		

Material Stream: SALIDA (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

COMPOSITION

Liquid Phase Phase Fraction 0.0000

13	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
15	Toluene	0.0000	0.1780	0.0000	0.3616	0.0000	0.3293
16	Benzene	0.0000	0.0010	0.0000	0.0017	0.0000	0.0015
17	p-Xylene	0.0000	0.1096	0.0000	0.2566	0.0000	0.2352
18	m-Xylene	0.0000	0.0009	0.0000	0.0020	0.0000	0.0019
19	o-Xylene	0.0000	0.0009	0.0000	0.0020	0.0000	0.0018
20	H2O	0.0000	0.3680	0.0000	0.1461	0.0000	0.1160
21	Ethylene	0.0000	0.1288	0.0000	0.0797	0.0000	0.1647
22	Methanol	0.0000	0.2128	0.0000	0.1503	0.0000	0.1496
23	Total	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000

K VALUE

26	COMPONENTS	MIXED	LIGHT	HEAVY
27	Toluene	0.9999	0.9999	---
28	Benzene	0.9999	0.9999	---
29	p-Xylene	0.9998	0.9998	---
30	m-Xylene	0.9998	0.9998	---
31	o-Xylene	0.9998	0.9998	---
32	H2O	1.000	1.000	---
33	Ethylene	1.000	1.000	---
34	Methanol	1.000	1.000	---

UNIT OPERATIONS

37	FEED TO	PRODUCT FROM	LOGICAL CONNECTION
38		Plug Flow Reactor: PFR-101	

UTILITIES

Property Table: Analisis de sensibilidad -SALIDA

PROCESS UTILITY


DYNAMICS

47	Pressure Specification (Inactive)	3.990 bar
48	Flow Specification (Inactive)	Molar: 1722 kgmole/h Mass: 7.811e+004 kg/h Std Ideal Liq Volume: 98.59 m3/h

User Variables

NOTES

Description

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: REACTOR P-XYLENE - Analysis.hsc
2		Unit Set: NewUser
3		Date/Time: Fri Apr 22 08:40:33 2022
4		
5		


6	Material Stream: ENTRADA	Fluid Package: Basis-1
7		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

	Overall	Vapour Phase
Vapour / Phase Fraction	1.0000 *	1.0000
Temperature: (C)	442.5 *	442.5
Pressure: (bar)	4.000 *	4.000
Molar Flow (kgmole/h)	1500 *	1500
Mass Flow (kg/h)	7.811e+004	7.811e+004
Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	93.22	93.22
Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-7.774e+004	-7.774e+004
Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	161.2	161.2
Heat Flow (kJ/h)	-1.166e+008	-1.166e+008
Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	90.83 *	90.83

PROPERTIES

	Overall	Vapour Phase
Molecular Weight	52.07	52.07
Molar Density (kgmole/m3)	6.781e-002	6.781e-002
Mass Density (kg/m3)	3.531	3.531
Act. Volume Flow (m3/h)	2.212e+004	2.212e+004
Mass Enthalpy (kJ/kg)	-1493	-1493
Mass Entropy (kJ/kg-C)	3.096	3.096
Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	123.4	123.4
Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.370	2.370
LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	1.683e+006	1.683e+006
HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	1.793e+006	1.793e+006
HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	3.442e+004	3.442e+004
CO2 Loading	---	---
CO2 App ML Con (kgmole/m3)	---	---
CO2 App WT Con (kgmol/kg)	---	---
LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	3.232e+004	3.232e+004
Phase Fraction [Vol. Basis]	1.000	1.000
Phase Fraction [Mass Basis]	1.000	1.000
Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	1.000	1.000
Mass Exergy (kJ/kg)	476.1	---
Partial Pressure of CO2 (bar)	0.0000	---
Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000
Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	2.212e+004	2.212e+004
Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	16.09	16.09
Specific Heat (kJ/kgmole-C)	123.4	123.4
Std. Gas Flow (STD_m3/h)	3.547e+004	3.547e+004
Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	837.9	837.9
Act. Liq. Flow (m3/s)	---	---
Z Factor	0.9913	0.9913
Watson K	10.29	10.29
User Property	---	---
Partial Pressure of H2S (bar)	0.0000	---
Cp/(Cp - R)	1.072	1.072
Cp/Cv	1.077	1.077
Heat of Vap. (kJ/kgmole)	3.331e+004	---
Kinematic Viscosity (cSt)	4.914	4.914
Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	859.9	859.9
Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	90.83	90.83
Liquid Fraction	0.0000	0.0000

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: REACTOR P-XYLENE - Analysis.hsc
2		Unit Set: NewUser
3		Date/Time: Fri Apr 22 08:40:33 2022
4		
5		

Material Stream: ENTRADA (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

	Overall	Vapour Phase
12	Molar Volume (m3/kgmole) 14.75	14.75
13	Mass Heat of Vap. (kJ/kg) 639.8	---
14	Phase Fraction [Molar Basis] 1.0000	1.0000
15	Surface Tension (dyne/cm) ---	---
16	Thermal Conductivity (W/m-K) 5.117e-002	5.117e-002
17	Viscosity (cP) 1.735e-002	1.735e-002
18	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C) 115.1	115.1
19	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C) 2.210	2.210
20	Cv (kJ/kgmole-C) 114.6	114.6
21	Mass Cv (kJ/kg-C) 2.200	2.200
22	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C) ---	---
23	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C) ---	---
24	Cp/Cv (Ent. Method) ---	---
25	Reid VP at 37.8 C (bar) 0.2425	0.2424
26	True VP at 37.8 C (bar) 0.2425	0.2425
27	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h) 90.83	90.83
28	Viscosity Index -4.177	---
29	Ideal Gas Cp/Cv 1.073	1.073
30	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C) 122.7	122.7
31	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C) 2.357	2.357
32	Bubble Point Pressure (bar) ---	---


COMPOSITION

Overall Phase Vapour Fraction 1.0000 *

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
39	Toluene 499.9500 *	0.3333 *	46065.7932 *	0.5898 *	52.9465 *	0.5680 *
40	Benzene 0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
41	p-Xylene 0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
42	m-Xylene 0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
43	o-Xylene 0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
44	H2O 0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
45	Ethylene 0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
46	Methanol 1000.0500 *	0.6667 *	32043.5027 *	0.4102 *	40.2698 *	0.4320 *
47	Total 1500.0000	1.0000	78109.2959	1.0000	93.2163	1.0000

Vapour Phase Phase Fraction 1.000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
52	Toluene 499.9500	0.3333	46065.7932	0.5898	52.9465	0.5680
53	Benzene 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
54	p-Xylene 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
55	m-Xylene 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
56	o-Xylene 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
57	H2O 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
58	Ethylene 0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
59	Methanol 1000.0500	0.6667	32043.5027	0.4102	40.2698	0.4320
60	Total 1500.0000	1.0000	78109.2959	1.0000	93.2163	1.0000

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: REACTOR P-XYLENE - Analisis.hsc
2		Unit Set: NewUser
3		Date/Time: Fri Apr 22 08:40:33 2022
4		
5		

6	Material Stream: ENTRADA (continued)	Fluid Package: Basis-1
7		Property Package: Peng-Robinson

8	K VALUE			
9				
10				
11	COMPONENTS	MIXED	LIGHT	HEAVY
12	Toluene	---	---	---
13	Benzene	---	---	---
14	p-Xylene	---	---	---
15	m-Xylene	---	---	---
16	o-Xylene	---	---	---
17	H2O	---	---	---
18	Ethylene	---	---	---
19	Methanol	---	---	---

20	UNIT OPERATIONS		
21			
22	FEED TO	PRODUCT FROM	LOGICAL CONNECTION
23	Plug Flow Reactor: PFR-101		

24	UTILITIES		
25	(No utilities reference this stream)		

26	PROCESS UTILITY		
27			
28			
29			

30	DYNAMICS			
31				
32	Pressure Specification (Active):	4.000 bar *		
33	Flow Specification (Active)	Molar: 1500 kgmole/h *	Mass: 7.811e+004 kg/h	Std Ideal Liq Volume: 93.22 m3/h

34	User Variables			
35				

36	NOTES			
37				
38				

39	Description			
40				
41				

42	Energy Stream: Q	Fluid Package: Basis-1
43		Property Package: Peng-Robinson


44	CONDITIONS			
45				
46				
47	Duty Type: Direct Q	Duty Calculation Operation: PFR-101		
48	Duty SP: 1.828e+007 kJ/h	Minimum Available Duty: 0.0000 kJ/h	Maximum Available Duty:	---

49	COMPOSITION			
50	(Not a material stream - No compositions exist)			

51	UNIT OPERATIONS		
52			
53	FEED TO	PRODUCT FROM	LOGICAL CONNECTION
54		Plug Flow Reactor: PFR-101	

55	UTILITIES		
56	(No utilities reference this stream)		

57	PROCESS UTILITY		
58			
59			
60			
61			
62			

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name:	REACTOR P-XYLENE - Analysis.hsc
2		Unit Set:	NewUser
3		Date/Time:	Fri Apr 22 08:40:33 2022
4			
5			

6	Energy Stream: Q (continued)	Fluid Package:	Basis-1
7		Property Package:	Peng-Robinson

8	DYNAMICS		
---	-----------------	--	--

9	Pressure Specification	(Inactive)	---
10	Flow Specification	(Inactive)	Molar: --- Mass: --- Std Ideal Liq Volume: ---

11	User Variables		
----	-----------------------	--	--

12	NOTES		
----	--------------	--	--

13	Description		
----	--------------------	--	--

14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62