





**Benemérita  
Universidad Autónoma de Puebla**

---

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**“SÍNTESIS Y OPTIMIZACIÓN, BASADO EN  
SIMULACIÓN, DEL SISTEMA DE REACCIÓN DEL  
PROCESO DE DESPROPORCIÓN DEL TOLUENO  
PARA LA OBTENCIÓN DE XILENOS.”**

**TESIS PROFESIONAL.**

**Que para obtener el Título de:**

**Licenciatura en Ingeniería Química.**

**Presenta:**

**Yasmin Carolina Acevedo Montelongo.**

**Director de Tesis:**

**Dra. Mayra Ruiz Reyes.**

**Puebla, Pue. Junio 2016.**



**BUAP**

Oficio No. FIQ/AC/220/2016  
Asunto: Registro de Tema de Tesis

**C. YASMIN CAROLINA ACEVEDO MONTELONGO**  
**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:

“SÍNTESIS Y OPTIMIZACIÓN, BASADO EN SIMULACIÓN, DEL SISTEMA DE REACCIÓN DEL PROCESO DE DESPROPORCIÓN DEL TOLUENO PARA LA OBTENCIÓN DE XILENOS”

Con el siguiente contenido:

**INTRODUCCIÓN**

<b>CAPÍTULO 1</b>	<b>ANTECEDENTES</b>
<b>CAPÍTULO 2</b>	<b>METODOLOGÍA</b>
<b>CAPÍTULO 3</b>	<b>RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b>

**CONCLUSIONES**  
**BIBLIOGRAFÍA**

Director de Tesis: Dra. Mayra Ruiz Reyes

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

**A T E N T A M E N T E**  
“Pensar Bien, Para Vivir Mejor”  
H. Puebla de Z., 25 de febrero del 2016

  
**M.I.C. MA. GPE. TILA XAZQUEZE DE LOS MONTEROS**  
**SECRETARIA ACADÉMICA**



C.c.p Director de Tesis: Dra. Mayra Ruiz Reyes  
Minutario Facultad de Ingeniería Química



Facultad  
de Ingeniería  
Química

Av. San Claudio s/n, Col. San  
Manuel, Ciudad Universitaria,  
Puebla, Pue. C.P. 72570  
01 (222) 229 55 00  
Ext. 7250 y 7251

## Agradecimientos.

El presente trabajo de investigación fue realizado bajo la supervisión de la Dra. Mayra Ruiz Reyes y del Dr. F. Manuel Pacheco Aguirre, a quienes me gustaría expresar mi más profundo agradecimiento, por hacer posible este trabajo de tesis. Además de agradecer su paciencia, tiempo y dedicación que tuvieron a lo largo de este proyecto.

Al mismo tiempo quiero agradecer a mis padres, por ser el apoyo más grande a lo largo de mi vida, debido a que sin ellos este sueño no hubiera sido posible. Por ser mi ejemplo a seguir y mi fortaleza cada vez que tropiezo.

A mi hermano por siempre impulsarme a ser mejor y por sus grandes consejos.

A Dios por permitirme la oportunidad de vivir, disfrutar varios momentos con mi familia, por guiarme por el camino que ha trazado para mí, y por permitirme lograr mis sueños.

A mis amigos por brindarme su amistad.

## INDICE GENERAL.

ÍNDICE DE FIGURAS.....	iii
ÍNDICE DE TABLAS.....	vii
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Planteamiento del problema.....	3
1.2. Justificación.....	4
1.3. Hipótesis.....	4
1.4. Objetivo general.....	5
1.4.1. Objetivos particulares.....	5
2. MARCO TEORICO.....	7
2.1. Ecuación de estado.....	8
2.2. Modelo cinético.....	9
2.3. Cinética química.....	10
2.3.1. Clasificación de reacciones.....	10
2.3.2. Tipo de reactores.....	12
2.4. Catálisis y reactores catalíticos.....	13
2.4.1. Difusión del seno del fluido a la superficie externa del catalizador.....	15
2.5 H-Mordenita.....	16
2.6. Antecedentes.....	17
2.6.1. Producción de Xilenos.....	17
2.6.2. Caracterización de materiales empleados en la producción de Xilenos.....	17
2.6.3. Aplicación de simuladores en la optimización del proceso de producción de Xilenos.....	19
3. METODOLOGÍA.....	21
3.1. Ecuación química.....	21
3.2. Selección de las ecuaciones de estado adecuada.....	21
3.3. Síntesis del sistema de reacción para la producción de Xilenos.....	24
3.4. Parámetros cinéticos.....	25
3.5. Análisis de la hidrodinámica del sistema de reacción.....	26
3.5.1. Corriente de alimentación.....	26
3.5.2. Condiciones en el intercambiador de calor.....	27

3.5.3. Dimensionamiento de los reactores.....	28
3.5.4. Porosidad del lecho. ....	29
3.5.5. Densidad de catalizador.....	30
3.6 Análisis paramétrico. ....	31
3.7. Reactor de lecho fluidizado. ....	44
3.7.1 Componentes que intervienen en el reactor de lecho fluidizado.....	44
3.7.2. Corriente de alimentación.....	45
3.7.3. Dimensionamiento del intercambiador de calor.....	46
3.7.4. Dimensionamiento del reactor de lecho fluidizado.....	46
3.7.5 Dimensionamiento del catalizador. ....	48
3.7.6 Análisis de sensibilidad para el Reactor de lecho fluidizado. ....	49
4. RESULTADOS. ....	55
4.1. Resultados de los Reactores de PFR y CSTR con respecto a la porosidad del lecho. .....	55
4.1.1. Fracción conversión del Tolueno, rendimiento con respecto al producto deseado y costo del Tolueno. ....	55
4.1.2. Fracción conversión del Tolueno, rendimiento y costo con respecto al Benceno.	58
4.1.3. Fracción conversión del Tolueno, rendimiento y costo con respecto al Xileno. ....	61
4.1.4 Efecto del catalizador en la fracción conversión y el rendimiento, y el costo del mismo. ....	64
4.1.5. Densidad del lecho.....	66
4.1.6. Dimensionamiento de los reactores CSTR y PFR. ....	67
4.1.7. Costo de los reactores PFR y CSTR. ....	73
4.1.8. Costo energético. ....	75
4.1.9. Costo y utilidad bruta.....	77
4.2. Resultados del reactor de lecho fluidizado. ....	80
5. CONCLUSIONES.....	87
6. BIBLIOGRAFÍA .....	90
ANEXO A .....	94
ANEXO B .....	102

## ÍNDICE DE FIGURAS.

Figura 2.1. Mordenita. ....	15
Figura 3. 1 Selección de los componentes para la TDP. ....	21
Figura 3.2 Primer paso para la selección del modelo (Carlson, 1996). ....	22
Figura 3.3 Diagrama de árbol para seleccción de método (Carlson, 1996). ....	23
Figura 3.4 Introducción del método en AP8.4. ....	23
Figura 3.5 Cinética de reacción. ....	26
Figura 3.6 PFR y CSTR en AP8.4. ....	26
Figura 3.7 Determinación de las condiciones en la corriente de alimentación (Walas,1990). .....	27
Figura 3.8 Condiciones del intercambiador de calor. ....	27
Figura 3.9 Dimensionamiento del PFR. ....	29
Figura 3.10 Dimensionamiento del CSTR. ....	29
Figura 3.11 Porosidad del lecho en un PFR y CSTR. ....	30
Figura 3.12 Densidad del catalizador en un PFR y CSTR. ....	31
Figura 3.13 Variables a analizar en el PFR. ....	32
Figura 3.14 Variables a analizar en el PFR (continuación). ....	32
Figura 3.15 Variables a analizar en el CSTR. ....	32
Figura 3.16 Definición de variables en el PFR. ....	33
Figura 3.17 .Definición de variables en el PFR (continuación 1). ....	33
Figura 3.18 Definición de variables en el PFR (continuación 2). ....	33
Figura 3.19 Definición de variables en el CSTR. ....	34
Figura 3.20 Definición de variables en el CSTR (continuación 1). ....	34
Figura 3.21 Definición de variables en el CSTR (continuación 2). ....	34
Figura 3.22 “Tabulate” en el CSTR. ....	34
Figura 3.23 “Tabulate” en el PFR. ....	35
Figura 3.24 Índice de costos del 2003-2010 (Chemical Engineering). ....	36
Figura 3.25 Índice de costos del 2006-2013 (Chemical Engineering). ....	37
Figura 3.26 Índice de costos del 2007-2014 (Chemical Engineering). ....	37
Figura 3.27 Propiedades físicas y químicas del vapor del agua (Perry, et al., 2008). ....	41
Figura 3.28 Gráfico para la obtencion del (Ulrich, et al., 2006). ....	42

Figura 3.29 Variación con respecto a la temperatura en el reactor PFR. ....	42
Figura 3.30 Variación de la localización del análisis con respecto a la temperatura. ....	43
Figura 3.31 Cálculo del interés compuesto(Perry, et al., 2008). ....	44
Figura 3.32 Reactor de lecho fluidizado.....	45
Figura 3. 33 Componentes que intervienen el reactor de lecho fluidizado. ....	45
Figura 3.34 Corriente de alimentación al reactor de lecho fluidizado.....	46
Figura 3.35 Dimensionamiento del intercambiador de calor. ....	47
Figura 3.36 Recirculación.....	47
Figura 3.37 Masa del catalizador.....	48
Figura 3.38 Temperatura en la que opera el reactor. ....	48
Figura 3.39 Dimensionamiento del reactor de lecho fluidizado.....	49
Figura 3.40 Distribución de partículas para la H-M (Choudhury, et al.,1997). ....	49
Figura 3.41 Distribución de partículas en AP8.4. ....	50
Figura 3.42 Modulo de deformación para acero inoxidable (Walas,1990). ....	52
Figura 3.43 Regresión logarítmica. ....	53
Figura 3.44 Diagrama de flujo de la metodología de trabajo. ....	54
Figura 4.1 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor. PFR.....	57
Figura 4.2 Relación entre el rendimiento del Xileno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR. ....	57
Figura 4.3 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.....	58
Figura 4.4 Relación entre el rendimiento del Tolueno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.....	59
Figura 4.5 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.....	60
Figura 4.6 Relación entre el rendimiento del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.....	60
Figura 4.7 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.....	61

Figura 4.8 Relación entre el rendimiento del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.....	62
Figura 4.9 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.....	63
Figura 4.10 Relación entre el rendimiento y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.....	63
Figura 4.11 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.....	64
Figura 4.12 Relación entre el rendimiento y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.....	65
Figura 4.13 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del catalizador, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR. ....	66
Figura 4.14 Relación entre el rendimiento del Xileno y el costo del catalizador, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.....	66
Figura 4.15 Relación entre la fracción conversión, con la densidad del catalizador y la temperatura en un reactor PFR. ....	67
Figura 4.16 Relación entre la rentabilidad, con la densidad del catalizador y la temperatura en un reactor PFR. ....	68
Figura 4.17 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y la longitud del reactor PFR.....	69
Figura 4.18 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y la longitud del reactor PFR. ....	70
Figura 4.19 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el diámetro del reactor PFR.....	70
Figura 4.20 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y el diámetro longitud del reactor PFR.....	71
Figura 4.21 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el diámetro del reactor CSTR.....	71
Figura 4.22 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y el diámetro del reactor CSTR.....	72

Figura 4.23 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y la longitud del reactor CSTR.....	72
Figura 4.24 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y la longitud del reactor CSTR. ....	73
Figura 4.25 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el volumen del reactor PFR. ....	73
Figura 4.26 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el volumen del reactor CSTR. ....	74
Figura 4.27 Relación entre el precio del reactor, el costo del producto, con la temperatura y el flujo másico de alimentación, en un reactor PFR. ....	75
Figura 4.28 Relación entre el precio del reactor, el costo del producto, con la temperatura y el flujo másico de alimentación, en un reactor CSTR. ....	75
Figura 4. 29. Calor de reacción en los reactores CSTR y PFR.....	76
Figura 4.30 Costo energético, con respecto al flujo y a la temperatura. ....	77
Figura 4.31 Costo energético, con respecto al flujo y a la temperatura. ....	78
Figura 4.32 Relación entre el costo, con el flujo y la temperatura en un reactor PFR. ....	79
Figura 4.33 Relación entre la rentabilidad, con el flujo y la temperatura en un reactor PFR. ....	79
Figura 4.34 Relación entre el costo, con el flujo y la temperatura en un reactor CSTR. ....	80
Figura 4.35 Relación entre la rentabilidad, con el flujo y la temperatura en un reactor CSTR. ....	80
Figura 4.36 Relación entre la fracción conversión del Tolueno con la temperatura y el flujo, en un reactor de lecho fluidizado.....	81
Figura 4.37 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor de lecho fluidizado. ....	82
Figura 4.38 Relación entre costo del reactor del lecho fluidizado y el costo del Xileno con la temperatura y el flujo másico en la alimentación. ....	83
Figura 4.39 Relación entre costo energético con la temperatura y el flujo másico en la alimentación en un reactor de lecho fluidizado. ....	84
Figura 4.40 Relación entre costo de operación con la temperatura y el flujo másico en la alimentación, en un reactor de lecho fluidizado. ....	85

Figura 4.41 Relación entre costo de operación con la temperatura y el flujo másico en la alimentación, en un reactor de lecho fluidizado. ....	85
--	----

## ÍNDICE DE TABLAS.

Tabla 2.1 Síntesis de las ecuaciones de estado (AspenPlus, 2016) .....	8
Tabla 3.1 Parametros cinéticos (Waziri, et al., 2010).....	25
Tabla 3.2 Correlaciones con respecto al dimensionamiento de un recipiente (Walas,1990). .....	28
Tabla 3.3 Variables a manipular en la pestaña “Vary”.....	31
Tabla 3.4 Rangos para generar el análisis. ....	32
Tabla 3.5 Costo del TXB reportados por PEMEX en Enero del 2014. ....	35
Tabla 3.6 Densidad y precio en Gal del TXB.....	36
Tabla 3.7 Ventajas y desventajas de los materiales usados para tanques de almacenamiento (Turton, et al., 2012).....	37
Tabla 3.8 Materias empleados en un tanque de almacenamiento, con respecto a los componentes que ocuparemos para nuestro proceso (Turton, et al., 2012).....	38
Tabla 3.9 Factor de costo para el material de los recipientes (Walas, 2010). ....	39
Tabla 3.10 Coeficientes de costos (Ulrich, et al., 2006).....	40
Tabla 3.11 Rangos para el análisis de sensibilidad para el reactor de lecho fluidizado. ....	50
Tabla 3.12 Datos citados por Walas (2010), para acero inoxidable y su regresión logarítmica. ....	52
Tabla 3.13 Resultados para la obtención del peso del envolverte. ....	53
Tabla A.1 Síntesis antecedentes modelos cinéticos.....	95
Tabla A.3 Síntesis de antecedentes modelos estequiometrico y condiciones de operación. ....	97
Tabla A.6 Conversiones reportadas.....	100
Tabla A.7 Valores de Energía de activación (kcal/kmol) reportados.....	101

---

## ***1. INTRODUCCIÓN.***

---

En la actualidad uno de los principales objetivos de la Ingeniería Química, busca desarrollar nuevos productos cuyos procesos, sean altamente sustentables desde la perspectiva material y energética. Martínez Sifuentes, et al.,(2000), propone el diseño de procesos constituido por tres etapas:

- 1) **Síntesis del proceso:** Es la etapa en donde se encuentra la estructura básica del proceso, por ejemplo se seleccionan los equipos a utilizar, los flujos de entrada a cada equipo, etc.
- 2) **Simulación de procesos:** En esta etapa se solucionan balances de materia y energía para un proceso en estado estacionario, también se genera una evaluación económica del proceso.
- 3) **Optimización:** En este apartado es donde se modifican parámetros, para obtener mayores rendimientos económicos.

En México uno de los productos importantes es el Xileno, con una producción de 3,192,000.00Tons de aromáticos, empleando catalizadores de platino suspendido en alumina.

El uso de simuladores de procesos tales como: Aspen Plus, Hysys, Chemcad, Super Pro Designer II, entre otros, han generado grandes ventajas a nivel industrial, debido a que se puede considerar como una técnica para evaluar de manera rápida, eficiente y económica un proceso a nivel industrial, mediante la utilización de datos reales.

La simulación de procesos puede ser útil en todas las etapas del desarrollo de un proyecto industrial. Por lo tanto el uso de simuladores puede usarse en las siguientes etapas de un proyecto industrial (Martínez Sifuentes, et al., 2000):

- a) **Investigación y desarrollo:** Una simulación sencilla se puede usar para probar la factibilidad técnica y económica del proyecto.
- b) **Etapa crítica en la toma de decisiones:** Se prueba diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación.
- c) **Planta piloto:** Utilización de modelos más sofisticados para obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
- d) **Diseño:** La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.

e) **Simulación de plantas existentes:** Es usado para cambiar las condiciones de operación.

En la investigación y desarrollo de métodos para la obtención de xilenos se ha logrado la introducción de nuevos materiales para la mejora del rendimiento del sistema de reacción a nivel laboratorio. Su implementación a escala industrial requiere el análisis y elección de las condiciones de operación y dimensionamiento de equipos. Por lo que la síntesis y optimización basada en costos y factibilidad técnica, empleando simuladores robustos (Aspen Plus) e introduciendo el uso de H-Mordenita como catalizador, proporcionará alternativas para la mejora de procesos actuales mediante el reequipamiento o acondicionamiento de los procesos convencionales,

## 1.1. Planteamiento del problema.

La síntesis de Xilenos es de gran importancia a nivel industrial, debido a que son utilizados en la formulación de gasolinas, disolventes y sustancias químicas. Existen tres formas de Xilenos, en las que la posición de los grupos metilos en el anillo de Benceno varía, generando así: Orto-Xileno (O-Xileno), Meta-Xileno (M-Xileno) y Para-Xileno (P-Xileno), a estas variaciones se les conoce como isomerización.

Existen distintos métodos para la obtención de Xilenos, por ejemplo: la desproporción del 1,2,4,5-TetrametilBenceno (1,2,4,5-TMB), la Desproporción del Tolueno (TDP), transalquilación 1,2,4-TMB y Tolueno, metilación del Tolueno. En cada uno de los métodos para la obtención de Xilenos, se deben tener en cuenta algunas condiciones para dicho proceso, como son la presión, temperatura, el tipo de reactor, el catalizador. En el proceso de la obtención de Xilenos, se utilizan distintos tipos de catalizadores, entre ellas podemos mencionar: H-Mordenita (H-M) y H-Zeolita Socony Mobil-5 (H-ZSM-5), H-Beta, H-Y, USY.

Europa juega un papel muy importante en esta industria con un 20% de la capacidad mundial producida, lo que significa una producción prevista para el 2002 de 18 millones de toneladas (Tons)/año y con un crecimiento previsto del 40% sobre su capacidad actual. Por otro lado, la capacidad de producción de derivados del Benceno, Tolueno y Xilenos (BTX) en Europa Occidental alcanza la cifra de 27 millones de Tons/año, procedentes de 53 empresas (López Bahamonde, 2010).

Con respecto a estudios del 2009 (Martínez Toledo, et al., 2011) en México la producción de (BTX) entre otros aromáticos son producidos en el Complejo Petroquímico La Cangrejera, que es localizada en la ciudad de Coatzacoalcos, Veracruz, en la cual se producen alrededor de 3,192,000.00Tons de aromáticos, de los cuales 139,000.00Tons son de Tolueno, 79,000.00 de Benceno y 60,000.00 de Xileno.

Aunque actualmente la gran diversidad de procesos y catalizadores para la obtención de Xilenos, la síntesis y optimización de tecnologías que mejore la eficiencia y permita el uso de nuevos materiales, es una necesidad en el desarrollo de procesos.

## **1.2. Justificación.**

Actualmente es una práctica convencional el análisis, estudio y optimización de procesos a partir del uso de simuladores, debido a la ventaja económica que representa en comparación de realizar pruebas a escala piloto principalmente cuando las fases involucradas además de las variables de estado, intervienen en la eficiencia del proceso. Dentro de los simuladores disponibles para procesos de Ingeniería Química que permiten el cálculo robusto del dimensionamiento y análisis paramétrico de equipos y procesos, es el Simulador Aspen Plus; el cual es el más utilizado a nivel industrial.

Con el objetivo de contribuir en las directrices disponibles para la operación y/o en la síntesis del sistemas reacción para la producción de Xilenos, este trabajo propone estudiar, mediante simulaciones en Aspen Plus ver. 8.4 (AP8.4) a partir de datos reales, el efecto de las variables de estado sobre el rendimiento y selectividad del sistema de reacción para así determinar las condiciones óptimas que permitan la evolución del sistema satisfaciendo las tres principales directrices de todo proceso: seguridad, rentabilidad y flexibilidad.

## **1.3. Hipótesis.**

La implementación de análisis paramétrico, basado en simulación en el diseño preliminar de un proceso para la obtención de Xilenos, presenta grandes ventajas para el desarrollo convencional de la síntesis del producto y dimensionamiento óptimo del equipo.

Por lo que el estudio del efecto de las variables de estado sobre la selectividad y rendimiento en la operación del sistema de reacción, limitado por las características del catalizador, permitirá establecer directrices para el óptimo rendimiento y/o estabilidad de la síntesis de reacción para la producción de Xilenos.

#### **1.4. Objetivo general.**

Evaluar, mediante el análisis de sensibilidad en AP8.4, las condiciones óptimas y dimensionamiento del sistema de reacción, para la obtención de Xilenos.

##### **1.4.1. Objetivos particulares.**

1. Seleccionar las ecuaciones de estado adecuadas, para el cálculo de propiedades termodinámicas, a las condiciones reales de operación en sistemas de reacción.
2. Realizar la síntesis del sistema de reacción para la producción de Xilenos.
3. Evaluar y comparar los rendimientos energéticos entre los diferentes estados estacionarios del sistema de reacción, mediante análisis de sensibilidad.
4. Evaluar el costo energético y costo fijo entre los diferentes estados estacionarios del sistema de reacción.
5. Determinar las condiciones óptimas de reacción mediante el análisis integral del rendimiento, selectividad del costo para el sistema de reacción.

---

## ***2. MARCO TEÓRICO.***

---

## **2.1. Ecuación de estado.**

Una ecuación de estado es la relación que existe entre dos o más propiedades termodinámicas (Arellanos Cárdenas, et al., 2016). La elección de la ecuación a usar, en una aplicación dada, la cual depende principalmente de la exactitud deseada y de la capacidad del usuario. En la elección de la ecuación de estado adecuada para un proceso, se debe considerar los siguientes factores:

### **1. Con respecto al tipo de componente, presente en el sistema de reacción:**

- I. Sistema químico.
- II. Sistemas con hidrocarburos.
- III. Sistemas especiales (aguas, aminas, ácido carboxilo, electrolíticos).
- IV. Refrigerantes.

### **2. Con respecto al tipo de proceso:**

- I. Químicos.
- II. Electrolíticos.
- III. Medio ambiente.
- IV. Procesos con gas.
- V. Minerales y metalurgia.
- VI. Aceites y gases.
- VII. Petroquímicos.
- VIII. Polímeros.
- IX. Refinería.

Con respecto a lo anterior, podemos observar que existen múltiples ecuaciones de estado para distintos tipos de sistemas de reacción, por lo tanto se genera en la Tabla 2.1 una síntesis de las ecuaciones de estado.

Tabla 2.1 Síntesis de ecuaciones de estado (AspenPlus, 2016).

Peng-Robinson-Wong-Sandler.	Este método se puede utilizar con altas temperaturas y presiones, esperando así con esta ecuación, predicciones exactas (3 y 2% en la presión y en la fracción molar respectivamente una temperatura dada) hasta aproximadamente 150 bar abs.
Soave-Redlich-Kwong.	Es una extensión de la ecuación de Redlich-Kwong-Soave de estado, la cual puede utilizarse a altas temperaturas y presiones.
UNIQUAC.	Se utiliza en soluciones líquidas fuertemente no ideales y equilibrio líquido-líquido. El modelo requiere parámetros binarios, los cuales deben ser equipados en la temperatura, la presión, y el rango de composición de operación. Ningún componente debe estar cerca de su temperatura crítica.
Chao-Sea.	Utilice el método de propiedad Chao-Sea para sistemas con límites de temperatura y presión, los cuales deben de estar entre los siguientes rangos: $200 < T < 533$ K, $P < 140$ atm. También para sistemas que contienen hidrocarburos y gases ligeros.
Peng-Rob.	Se utiliza en mezclas no polares o ligeramente polares. Es aceptable en la región crítica. Por lo tanto, no tiene un comportamiento anómalo, a diferencia de los métodos de propiedad coeficiente de actividad.
La ley de los gases ideales.	Se utiliza como un estado de referencia para los cálculos de la ecuación de otro estado, y se puede utilizar para modelar mezclas de gases a bajas presiones (sin interacciones de fase de gases específicos).

## 2.2. Modelo cinético.

Un modelo cinético permite explicar el comportamiento de los gases, suponiendo que un gas está formado por partículas que están en continuo movimiento. Este a su vez involucra:

- 1) **Mecanismo de reacción:** Describe los pasos de reacción y la relación entre las velocidades de reacción de los componentes químicos.

- 2) **Velocidad de reacción:** Es la cantidad específica de consumo o la producción de cualquier especie de reacción. Esta puede ser afectada por diversas variables y se dividen en:
- I. **Sistemas homogéneos:** Las variables son la temperatura, la presión y la composición.
  - II. **Sistemas heterogéneos:** Puede ocurrir que los materiales pasen de una fase a otra durante la reacción, en cuyo caso será importante la velocidad de transporte de materia, también influirá la intensidad de paso de calor (Levenspiel, 1986).
- 3) **Calor de reacción:** Las reacciones químicas van acompañadas de la evolución o absorción de energía (Perry, et al., 2008).
- 4) **Conversión, la selectividad y el rendimiento:** En donde la conversión, es el número de moles convertidos por moles iniciales o de alimentación de un reactivo. La selectividad de un producto, es la relación de la velocidad de producción de ese producto a la velocidad de producción de todos los productos combinado. Y el rendimiento de un producto de R con respecto a un reactivo A, es la relación de la velocidad de producción de R a la del consumo de A.

### 2.3. Cinética química.

La cinética química estudia la velocidad de reacción, considerando todos los factores que influyen sobre ella y explica la causa de la magnitud de esta. A su vez las leyes cinéticas dependen del tipo de reacción en el que se efectúan, es por ello que estudiaremos en primer lugar la clasificación de las reacciones químicas (Levenspiel, 1986).

#### 2.3.1. Clasificación de reacciones.

Una reacción química ha ocurrido cuando un número detectable de moléculas de una o más especies han perdido su identidad y han asumido una nueva forma, debido a un cambio en el tipo o número de átomos en el compuesto, o un cambio en la estructura o configuración de dichos átomos (Fogler, 2007).

Existen diferentes tipos de reacciones como son:

- 1) **Reacciones de síntesis o composición:** Dos o más elementos o compuesto se combinan, resultando un solo producto.
- 2) **Reacciones de descomposición o análisis:** Se forman dos o más productos a partir de un solo reactante.
- 3) **Reacciones de sustitución sencilla:** Ocurren cuando un átomo forma el lugar de otro similar pero menos activo en un compuesto.
- 4) **Reacciones de intercambio:** Estas reacciones son las que ocurren cuando un ión positivo de un compuesto se combina con el ión negativo del otro y viceversa.
- 5) **Reacciones de combustión:** Ocurren cuando un hidrocarburo orgánico interactúa con el oxígeno, formando al mismo tiempo agua y dióxido de carbono.
- 6) **Reacciones heterogéneas:** Incluyen más de una fase. En estos sistemas, la velocidad de reacción suele expresarse en medidas distintas al volumen, como son el área de la superficie de reacción o pesos de catalizador.
- 7) **Reacciones en fase líquida:** Son aplicadas principalmente en reactores semidiscontinuos y reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR).
- 8) **Reacciones en fase gaseosas:** Se aplican principalmente en reactores tubulares.
- 9) **Reacciones homogéneas:** Son las que incluyen solo una fase.
- 10) **Reacciones termodinámicamente limitadas:** Son aquellas muy reversibles, debido a esto, hay poca conversión.
- 11) **En reacciones múltiples:** Se pueden clasificar de la siguiente forma:
  - I. **Reacciones en serie:** Acontece en las reacciones donde el reactivo forma un producto intermedio, el cual reacciona nuevamente para formar un nuevo componente.
  - II. **Reacciones en paralelo:** Ocurre cuando el reactivo se consume por dos caminos de reacción distintos.
  - III. **Reacciones complejas:** Reacciones múltiples, en las cuales ocurren varias reacciones en serie y en paralelo.
  - IV. **Reacciones independientes:** Ocurren de manera simultánea, pero los productos y los reactivos no reaccionan entre sí, ni consigo mismo.

- V. **Reacciones deseadas y no deseadas:** De especial interés son los reactivos que se consumen en la formación de un producto deseado, D, y la formación de un producto no deseado, U, en una reacción secundaria o competitiva (Fogler, 2007).

### 2.3.2. Tipo de reactores.

Para un proceso químico se necesita especificar el tipo de reactor y el tamaño del mismo, con el fin de distinguir el reactor conveniente para obtener el producto deseado, con la conversión adecuada (Fogler, 2007). La elección del tipo de reactor esta en función de la fase en la que se desarrolló la reacción, el efecto de la hidrodinámica del sistema sobre la reacción, el tipo de operación (continuo o intermitente), entre otros factores. En cuanto a la forma de operar se distinguen dos tipos de reactores:

- 1) **Reactores intermitentes:** Se emplean para operaciones que son a pequeñas escalas, y una de sus ventajas es que permite una alta conversión por periodos prologados.
- 2) **Reactores de flujo continuo:** Son todos aquellos que trabajan con flujo continuo como son:
  - I. **Reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR):** Se utiliza por lo general en fase líquido, operando en estado estacionario, sin tener dependencia del tiempo o de la posición en la temperatura, la concentración o de la velocidad de reacción.
  - II. **Reactor tubular:** Opera en estado estacionario y consta de un tubo cilíndrico, y a diferencia del CSTR, estos son más utilizados para reacciones en fase gas. Los reactivos que reaccionan en el reactor tubular se consumen de manera continua a medida que fluyen a lo largo del reactor. Asumiendo así que la concentración varía continuamente en la dirección axial a todo lo largo del reactor.
  - III. **Reactores de membrana:** Se utilizan para el aumento de la conversión cuando la reacción es termodinámicamente limitada. Se considera la membrana inerte y sirve como barrera a los reactivos y a algunos productos.

- IV. **Reactores de lecho móvil:** Generan una desactivación significativa de catalizador, mediante una regeneración continua.
- V. **Reactores de transporte de paso directo:** Se emplea para sistemas de reacción en los cuales el catalizador se desactiva muy rápidamente. Por lo general se usa para producir gasolinas mediante la desintegración catalítica de fracciones pesadas de petróleo.
- VI. **Reactores multifásicos:** Son aquellos en los cuales se requieren dos o más fases para que la reacción se efectúe.
- VII. **Reactores de lecho fluidizado:** Se utiliza para reacciones donde intervengan un sólido y un fluido (generalmente un gas). En estos reactores la corriente de gas se hace pasar a través de las partículas sólidas, a una velocidad suficiente para suspenderlas, con el movimiento rápido de partículas se obtiene un alto grado de uniformidad en la temperatura evitando la formación de zonas calientes.

Con respecto a esto, para este trabajo de tesis, se empleará como modelos base para el análisis del proceso de producción de Xilenos, los reactores CSTR y PFR, con el fin de encontrar las condiciones óptimas para favorecer la selectividad y conversión, posteriormente estas condiciones se emplearán para la evaluación del proceso empleando un reactor de lecho fluidizado.

#### **2.4. Catálisis y reactores catalíticos.**

Un catalizador es una sustancia que afecta la velocidad de reacción, sin afectar el equilibrio termodinámico, y permanece constante al final del proceso.

Los catalizadores, pueden retardar las reacciones o pueden aumentar su velocidad, al mismo tiempo favorecen o inhiben las reacciones químicas. (Fogler, 2007).

Existen dos tipos de catálisis:

- a) **Homogéneas:** Se encuentra en solución por lo menos con uno de los reactivos.
- b) **Heterogénea:** Incluye más de una fase.

Las reacciones catalíticas ocurren en la interfase entre el fluido y el sólido, por eso es conveniente que el área interfacial sea grande, para así lograr velocidades de reacción significativas. Existen catalizadores en donde el área está dada por una estructura interna porosa, el cual nos genera una velocidad de reacción alta (Fogler, 2007).

Podemos clasificar a los catalizadores de distintas formas:

- 1) **Catalizador poroso:** Área considerable debido a sus poros. Los poros controlan el tiempo de residencia de diversas moléculas cerca de la superficie catalíticamente activa, hasta el grado en el que se permite que sólo las moléculas deseadas reaccionen.
- 2) **Tamices moleculares:** Contiene poros muy pequeños, son derivados de sustancias naturales o son totalmente sintéticos.
- 3) **Catalizador monolítico:** Son suficientemente activos y no contienen una superficie porosa.
- 4) **Soportados:** Contiene diminutas partículas sobre un material activo dispersado sobre una sustancia menos activa llamada soporte.
- 5) **No soportados:** Son aquellos catalizadores que son lo suficientemente activos que no requieren de superficies grandes.

Los catalizadores tienen un período de desactivación, el cual puede ser por:

1. **Envejecimiento:** Es debido a los largos periodos de uso del catalizador, ya sea por cambios graduales en la estructura cristalina o por pérdidas del material catalítico.
2. **Envenenamiento:** Es cuando existe una formación irreversible de depósitos sobre la superficie del sitio activo.
3. **Contaminación:** Formación o depósito de carbono u otra materia sobre la superficie.

Para que exista una reacción catalítica los reactivos deben unirse a la superficie (adsorción), esto se lleva a cabo por dos procesos los cuales son:

1. **Adsorción física:** Proceso isotérmico en el que el calor de adsorción es relativamente pequeño.
2. **Quimisorción:** Afecta la velocidad de reacción y los calores de adsorción son de la misma magnitud que el calor de una reacción química.

Para cada reacción debemos de utilizar un tipo de catalizador, observemos las distintas reacciones (Fogler, 2007):

- 1) **Reacciones de alquilación y desalquilación:** Para la alquilación se emplea catalizadores de Friedel- Crafts,  $AlCl_3$ , junto con trazas de HCl. En la desalquilación se utilizan catalizadores como son la silica-alúmina, silica-magnesia y arcilla.
- 2) **Reacciones de isomerización:** Se aplican catalizadores con sitios ácidos y sitios de hidrogenación.
- 3) **Reacciones de oxidación:** En este tipo de reacciones se emplea platino y el níquel, este también se utiliza para las reacciones de hidrogenación.
- 4) **Reacciones de hidratación y deshidratación:** Para reacciones de este tipo, se utilizan catalizadores que tengan fuerte afinidad al agua.
- 5) **Reacciones de halogenación y deshalogenación:** Se manejan haluros de cobre y de plata soportados.

En este trabajo de tesis, la reacción para la obtención de Xilenos es la de desalquilación por lo tanto se utilizará como catalizador la H-Mordenita, la cual pertenece a la clase de los silicatos.

#### **2.4.1. Difusión del seno del fluido a la superficie externa del catalizador.**

La difusión es la mezcla espontánea de átomos o moléculas por movimiento térmico aleatorio. Da lugar al movimiento de las especies en relación con el movimiento de la mezcla. En ausencia de otros gradientes (como el de la temperatura, de potencial eléctrico, etc.) las moléculas de una especie dada dentro de una misma fase siempre se difundirán.

El coeficiente de transferencia de masa es inversamente proporcional al espesor de la capa límite,  $\delta$ , y es directamente proporcional al coeficiente de difusión, como podemos observar la Ecuación 2.1:

$$k_c = \frac{D_{AB}}{\delta} \quad \text{Ec. 2.1}$$

Esto nos indica que a bajas velocidades de flujo sobre la partícula, la capa límite a través de la cual A y B deben difundirse es gruesa, es tanto que se requiere mucho tiempo para que A llegue a la superficie, por lo cual el coeficiente de transferencia de masa ( $k_c$ ) es pequeño (Fogler, 2007).

Para generar una transferencia de masa alta, tenemos que aumentar la velocidad del flujo, disminuyendo al mismo tiempo la capa límite.

## 2.5 H-Mordenita.

La  $(\text{Na}_2, \text{K}_2, \text{Ca}) \text{Al}_2\text{Si}_{10}\text{O}_{24} \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  (Mordenita) pertenece a la clase de los silicatos, subclase de los tectosilicatos. Y como en todas las Zeolitas pertenece a los aluminosilicatos debido a que contiene: sodio, calcio, potasio y se encuentra hidratado. Esta Zeolita tiene una densidad de 2.12 a 2.15 g/cm<sup>3</sup> (Mineralogy Database).

La Mordenita es una de las Zeolitas más abundantes en depósitos volcánicos alterados, y habitualmente se produce como blancos, agujas de vítreos de llenado venas y cavidades en las rocas ígneas. También se encuentra en los sedimentos marinos, como en los Urales y en los diques donde el agua ha atacado y una alteración de vidrios volcánicos (Encyclopaedia Britannica).



Figura 2.1 Mordenita.

## **2.6. Antecedentes.**

### **2.6.1. Producción de Xilenos.**

Los Xilenos son una importante materia prima básica, que tiene una aplicación considerable en la industria química y petroquímica. Siendo así el isómero P-X como uno de los más importantes, debido a su uso en fibras de poliéster, resinas, entre otros. Con respecto a los estudios de Waziri, et al. (2010) los procedimientos más usados, para la obtención de XBT, son el reformado catalítico y por vapor de craqueo de nafta; pero debido a las limitaciones termodinámicas, los rendimientos de los productos de estas fuentes dan cantidades inferiores de los Xilenos más valiosos. Es por eso que estudiaremos otros métodos de obtención de Xilenos para obtener la mayor eficiencia del producto, identificando como principal limitación el tipo de catalizador y las propiedades que este otorga al sistema de reacción.

### **2.6.2. Caracterización de materiales empleados en la producción de Xilenos.**

Existen actualmente una gran variedad de información sobre materiales estructurados y no estructurados empleados como catalizadores y soportes para catalizadores en la síntesis de Xilenos, la caracterización de estos materiales es hoy una de las principales líneas de investigación dirigida a la optimización de procesos, tal es el caso del estudio realizado por Waziri, et al. (2010) en el que realizaron investigaciones sobre las transformaciones catalíticas del Tolueno y 1,2,4-TMB, empleando una mezcla equimolar de H-M y H-ZSM-5 como catalizador. En el estudio, se llevó a cabo una serie de experimentos en un reactor tubular de flujo ascendente, en el cual se empleaba un intervalo de temperatura de 300 a 400 °C, con un rango de tiempo de reacción de 5 a 20 s. Con el objetivo de comparar las condiciones de reacción en la variación de la conversión de 1,2,4-TMB y la conversión del Tolueno.

Como resultado de dicha investigación se obtuvieron los modelos cinéticos para la isomerización, desproporción y las reacciones de transquilación de 1, 2,4.TMB y Tolueno. Estos modelos representar la reversibilidad de la reacción de isomerización, a través de las constantes de equilibrio termodinámico que al mismo tiempo dependen de la temperatura.

Los resultados para la reacción de 1,2,4- TMB y transquilación 1,2,4-TMB con Tolueno, muestran que la energía de activación fue mayor en el H-ZSM-5 que en la H-M. Como conclusión se pudieron observar tres aspectos importantes como son: 1) La H-M se presenta como mejor catalizador para obtener un mayor nivel de conversión de Tolueno y 1,2,4-TMB, en comparación con H-ZSM-5 (debido al tamaño del poro). 2) La alimentación de 1,2,4-TMB es más reactivo que el Tolueno sobre los catalizadores 3) Se encontraron mayores ventajas en la transquilación de 1,2,4-TMB con Tolueno sobre las transformaciones del Tolueno o 1,2,4-TMB.

Wang, et al. (1990), observaron que la Zeolita Beta presenta un potencial importante para su aplicación en la catálisis de reacciones para producción de Xileno, ya que contiene una excelente estabilidad catalítica y una selectividad de transquilación. Así mismo, observaron que, mezclando Tolueno en diversas materias primas la selectividad de producción del TMB al Xileno cambia, mientras que en el de TDP, mezclando TMB en diversas materias primas las temperaturas de reacción se reduce y se mejora el rendimiento de Xileno. En este artículo el cambio de la selectividad de la reacción se discute desde el punto termodinámico y de la cinética. Dentro de los resultados de esta investigación se tiene la propuesta de un modelo que describe la transferencia de un grupo metilo para la mejora de la eficiencia en la producción de Xileno. Concluyendo que el Tolueno controla la transferencia de un grupo metilo durante la alquilación, encontrando al mismo tiempo que la reacción química del Tolueno (reactivo) a temperaturas bajas se obtiene el 100% de eficiencia en la producción de Xileno teórico, disminuyendo la eficiencia al aumentar las temperaturas de reacción. En cambio la eficiencia de TMB aumenta con el aumento de las temperaturas de reacción.

Así mismo, Tsai, et al. (2004) estudió un modelo cinético de segundo orden para la TDP. El modelo representa una reacción reversible para el Tolueno con una energía de activación de 25kcal/ mol. Este modelo cinético es aplicable solamente para la H-M que tenga un 24% de coque. Encontrando que existen dos métodos para desactivarlos; uno es mediante el taponamiento de poros y la otra es por la desactivación por coque. Observando que el coque tiene una capacidad de acumulación de 24.5% en peso en un periodo de 340 días. Este modelo cinético reversible de segundo orden es aplicable para la H-M con un

contenido de coque hasta 24.6% en peso. La cinética se puede aplicar para estimar la actividad relativa de la coquización para varios periodos de flujo.

Dooley, et al. (1990) prepararon Zeolita Y con Níquel de 0-6% y fueron usados como catalizadores de desproporción con una temperatura de 340-501°C y presiones parciales de Tolueno 43kPa., empleando H<sub>2</sub> como gas portador. Con base a estas condiciones se observó que la desactivación era lenta, las reacciones secundarias insignificantes y los gradientes de concentración intraparticulas despreciable, desde el punto de vista de procesos esto es favorable ya que indica que la reacción no será superficial (sobre la partícula). Todos los datos cinéticos han demostrado ser característica de la desproporción intrínsea ajustando a un conjunto de 42 modelos de tipo Langmuir-Hinshelwood. Los datos se ajustaron mejor con una expresión de velocidad de segundo orden con la inhibición de Tolueno. Ante la gran variedad de ajustes realizados, concluyeron que es necesario realizar más estudios acerca de este tema para establecer una expresión de velocidad completa para catalizadores y para interpretar correctamente estos en términos de mecanismos de reacción. Debido a que este trabajo fue una combinación de un estudio cuidadoso de trabajos anteriores en los cuales se establece una compleja cinética para muchas Zeolitas.

Xiong, et al. (1995), mostraron que, durante el mecanismo de la TDP la reacción es catalizada por Zeolita H-ZSM-5 utilizando Tolueno-a,a, -d<sub>3</sub>. El mecanismo propuesto es una reacción en cadena de cationes bencílico. Para su caracterización se empleó un trazador (etiqueta) de deuterio, en donde se observó de un periodo de inducción cinético de tipo primario, y aceleración de la frecuencia tras la adición de pequeñas cantidades de difenilmetano durante la reacción. En este estudio se demuestra que, el estado de transición propuesto se ajusta perfectamente en el interior del canal recto de H-ZSM-5, prediciendo así que en una Zeolita con poros más grandes, el efecto isotópico cinético en desproporción de Tolueno será mayor.

### **2.6.3. Aplicación de simuladores en la optimización del proceso de producción de Xilenos.**

Khattaf (2007) estudió las transformaciones de los Xilenos con base a la Zeolita H-ZSM-5 en un simulador que imita el funcionamiento de reactores de lecho fluidizado comerciales.

En este estudio se encontró que el P-X es más reactivo en comparación del O-X y M-X. El orden de reactividad es consistente con el orden de difusividad. A temperaturas por debajo de los 400 °C, en la isomerización y la desproporción se encontraron rendimientos favorables a todos los Xilenos pero a medida que se aumentaba la temperatura de reacción a 500°C, la reacción de M-X se hizo más selectiva para la desproporción. Se observa que la reactividad de los isómeros de Xileno tiende a disminuir de P-X>O-X>M-X, atribuyéndolo a esta diferencia los proceso de difusión y adsorción de los Xilenos. En la relación p/o se encontró que era mayor que el valor termodinámico y disminuye con la temperatura, es decir que el P-X se ve menos favorecida a medida que se aumenta la temperatura.

Uno de los resultados observados en esta investigación es que la eficiencia en la producción de M-X estimada es menor de 0.1, indicando una alta resistencia difusional dentro de Zeolita H-ZSM-5; mientras que en el O-X el intervalo es de 0.35-0.45 y para el P-X se encontró que era cercano a la unidad, indicando esto que tiene una resistencia difusional insignificante, es decir que las resistencias a la transferencia de masa no compiten con la reacción.

Por otro lado, Ashraf (2013) analizó varios métodos para la optimización del P-X utilizando así el método de metilación del Tolueno con la presencia del H-ZSM-5, para la obtención el P-X. El proceso completo es simulado en Aspen Plus, los parámetros de reacción fueron optimizados para obtener el 97.5% de selectividad de P-X utilizando la función de optimización. Después de la separación de P-X la pureza que se obtiene es del 99.7 %. Y la integración de calor del proceso se realiza utilizando Aspen Energy Analyzer resultando así el 23 % de reducción de generación de trabajo pérdida total. Mediante un análisis de sensibilidad se demostró que, haciendo funcionar el reactor a baja temperatura, baja presión y tiempo de contacto bajó la selectividad del P-X puede ser aumentada.

En el anexo A1 se presenta la síntesis de los modelos cinéticos reportados por la literatura (Tabla A1, A2, A3, A4).

---

### ***3. METODOLOGÍA.***

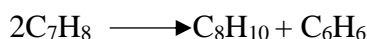
---

Para conocer las condiciones óptimas en la obtención de Xilenos, se usó el simulador AP8.4 con la licencia disponible en la Facultad de Ingeniería Química de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

### 3.1. Ecuación química.

La primera heurística reportada por Seider, et al. (2003), respecto a la síntesis de sistemas de reacción, se debe seleccionar las materias primas y las reacciones químicas con el fin de evitar, o reducir, la manipulación y almacenamiento de productos químicos peligrosos y tóxicos.

Para la obtención de Xilenos, a partir de la TDP se utilizó la siguiente ecuación química reportada por Waziri, et al. (2010), en la cual podemos observar al Tolueno como única materia prima, presentándose un único subproducto, minimizando las etapas de separación requeridas en el proceso.



Los componentes obtenidos por la ecuación química fueron introducidos en AP8.4 en la carpeta de componentes, como se muestra en la Figura 3.1.



Figura 3. 1 Selección de los componentes para la TDP.

### 3.2. Selección de las ecuaciones de estado adecuada.

Los modelos termodinámicos son desarrollos matemáticos que permiten evaluar el comportamiento termodinámico de una sustancia pura o una mezcla. Consecuentemente para la obtención del modelo termodinámico usado en esta simulación, el proyecto se basó, en el artículo de Carlson (1996), el cual propone una metodología para facilitar la selección del

modelo termodinámico. Dicho método se basa mediante el uso de diagramas de árbol de decisión como se observa en las Figuras 3.2 y 3.3.

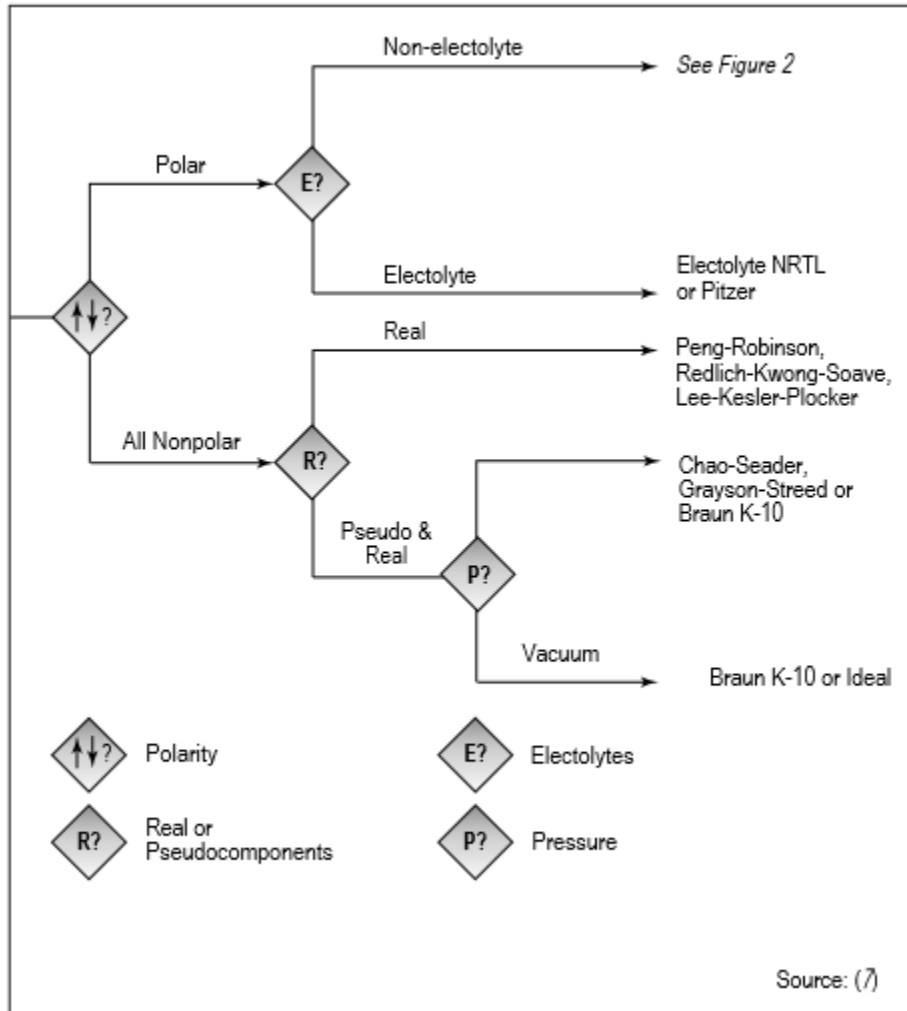


Figura 3.2 Primer paso para la selección del modelo (Carlson, 1996).

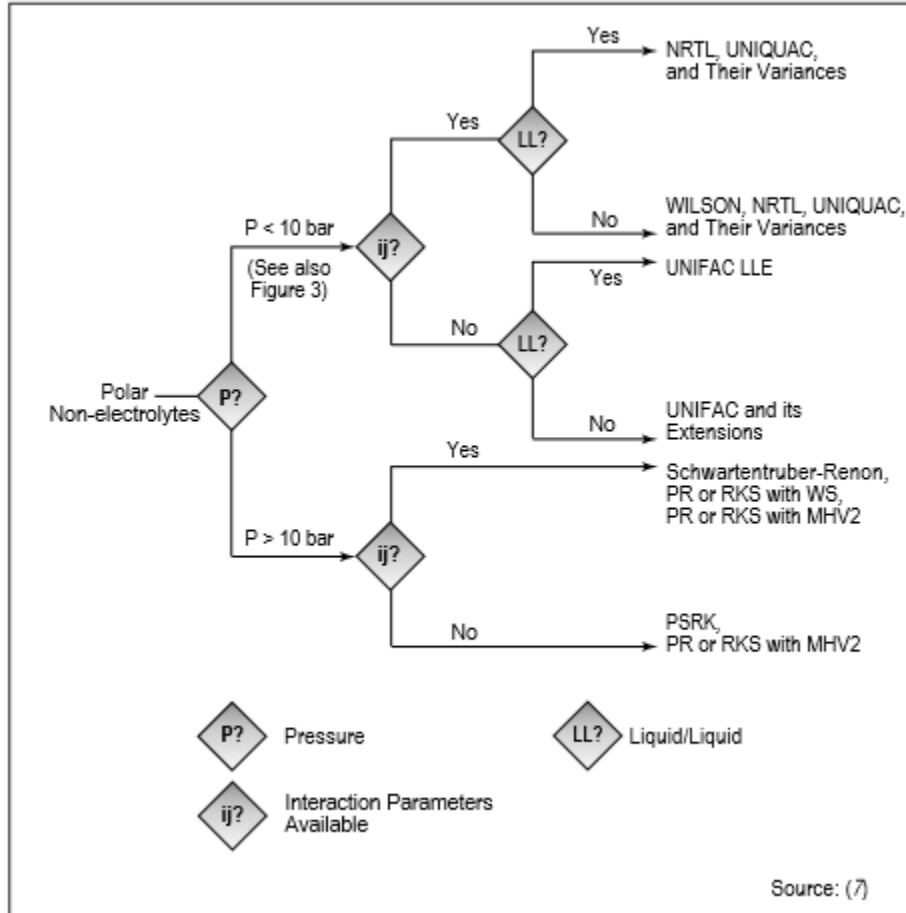


Figura 3.3 Diagrama de árbol para selección de método (Carlson, 1996).

Así mismo Martínez Sifuentes, et al.(2000) menciona que, las ecuaciones de estado son aplicables a fluidos normales (gases raros, nitrógeno, oxígeno, monóxido de carbono, hidrocarburos), y a sustancias de baja polaridad. Con respecto a lo anterior y debido a que nuestros componentes químicos son hidrocarburos, se utilizó la ecuación de estado de Peng-Robinson que se muestra en la Figura 3.2.

La especificación del método en AP8.4, se realiza en la carpeta “Methods”, como se muestra en la Figura 3.4.



Figura 3.4 Introducción del método en AP8.4

### 3.3. Síntesis del sistema de reacción para la producción de Xilenos.

Se seleccionó el modelo cinético del reactor reportado por Waziri, et al. (2010)

Ecuación 3.1.

$$\frac{dy_T}{dt} = -2k_1 y_t^2 \frac{W_c W_{hc}}{V^2 MW_T} \phi \quad \text{Ec. 3.1}$$

En donde:

$k_1$  =La constante de reacción.

$y_t$  =Fracción masa del reactivo.

$W_c$  =Masa del catalizador alimentado.

$W_{hc}$  =Masa del Tolueno alimentado.

$V^2$  =Volumen del reactor.

$MW_T$  =Peso molecular del Tolueno.

$\phi_1$  =Desactivación del catalizador durante la reacción.

La conversión de la materia prima ( $x_{MP}$ ) y rendimiento global de la misma respecto al producto principal ( $Y_{P/MP}$ ), Ecuación 3.2 y 3.3 respectivamente, que cada modelo (CSTR o PFR) otorga al proceso, son los parámetros empleados para determinar la factibilidad del procesos a las diferentes condiciones de operación a evaluar.

$$x_{MP} = \frac{\dot{n}_{MP,e} - \dot{n}_{MP,s}}{\dot{n}_{MP,e}} \quad \text{Ec. 3.2}$$

$$Y_{\frac{P}{MP}} = \frac{\dot{n}_{p,s}}{\dot{n}_{MP,e}} \quad \text{Ec. 3.3}$$

En donde:

$\dot{n}_p$  =Flujo molar del producto ( $P$ ).

$\dot{n}_{MP}$  =Flujo molar de la materia prima ( $MP$ ).

Subíndices:

$e$  y  $s$  =Representan entrada y salida.

Para el uso de la Ecuación 3.1 en las especificaciones del modelo cinético del reactor, la ecuación se expresa en base a concentración mediante el uso de la Ecuación 3.4, la cual expresa la relación que hay entre la cantidad de sustancia (mol), masa de sustancia (g) y su peso molecular (g/mol).

$$m = n(MW) \quad \text{Ec. 3.4}$$

En donde:

$n$  =Número de moles.

$MW$  =Peso molecular.

Por lo tanto sustituyendo la Ecuación 3.4 en la 3.1, y simplificando esto obtenemos la Ecuación 3.5:

$$\frac{dy_T}{dt} = -2K_1 y_T^2 \left( \frac{n_c MW_c}{V} \frac{n_t}{V} \right) \phi \quad \text{Ec. 3.5}$$

A partir de la definición matemática de fracción conversión (Ecuación 3.6), se introduce la variable concentración en la Ecuación 3.5, obteniendo la Ecuación 3.7.

$$y_{total} = \frac{m_i}{m_{total}} \quad \text{Ec. 3.6}$$

Donde:

$(m_i)$  = Masa del componente.

$(m_{total})$  =Masa total.

$$\frac{dCA}{dt} = -2k_1 CA^2 (n_c MW_c n_t) \phi \quad \text{Ec. 3.7}$$

La Ecuación 3.7, es empleada AP8.4 como modelo cinético del proceso de reacción.

### 3.4. Parámetros cinéticos.

En la Tabla 3.1 se muestran los parámetros cinéticos reportados por Waziri, et al. (2010). Estos valores se emplearon para la solución de la Ecuación 3.7 en la simulación.

Tabla 3.1 Parametros cinéticos (Waziri, et al., 2010).

H-M	$K_1 \times 10^5$ (m <sup>6</sup> /kgcat s)	$E_1$ (KJ/mol)	$\alpha$ (1/s)
Valores	1.01	54.22	0.06
95 %Cl	0.14	4.35	0.02

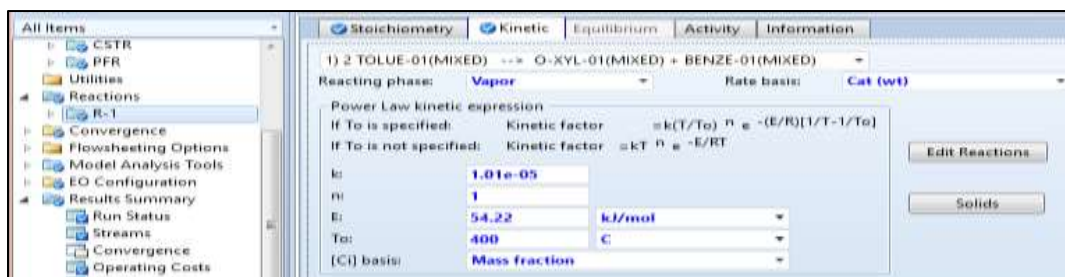


Figura 3.5 Cinética de reacción.

### 3.5. Análisis de la hidrodinámica del sistema de reacción.

Con el fin de evaluar el efecto de la hidrodinámica (grado de mezclado) del sistema de reacción en la rendimiento y fracción conversión, se evaluó el proceso desarrollado en un reactor PFR y CSTR. En la Figura 3.6 se muestra el diagrama de flujo del sistema de reacción empleado AP8.4.

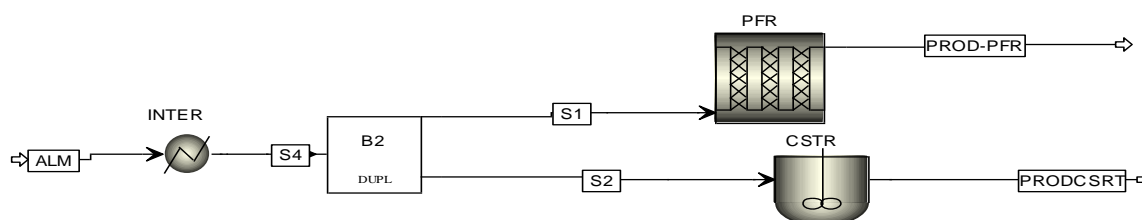


Figura 3.6 PFR y CSTR en AP8.4.

#### 3.5.1. Corriente de alimentación.

El flujo de alimentación preliminar, se determinó mediante la Ecuación 3.8, empleando la masa ( $m$ ) de Tolueno y tiempo de retención hidráulica ( $TRH$ ),  $m=0.162\text{g}$  y  $TRH=20\text{s}$ , propuesto por Waziri, et al. (2010), obteniendo un flujo de  $0.0081\text{g/s}$ :

$$F = \frac{m}{TRH} \quad \text{Ec. 3.8}$$

El flujo másico obtenido basado en simulación empleando los mismos valores de masa de catalizador y  $TRH$  de  $20.1611\text{s}$  es de  $0.00374\text{g/s}$ . La diferencia entre el valor obtenido basado en datos del artículo y el obtenido basado en simulación es debido a que en la simulación se consideró una caída de presión en el reactor de 0 (presión de alimentación y

operación del reactor 1 atm). Lo anterior se establece basado en lo propuesto por Walas (1990) en donde menciona que en la corriente de entrada para un vapor, la presión debe encontrarse entre 1 y 1.2atm. Por consiguiente estos datos son introducidos en el simulador (Figura 4.7).



Figura 3.7 Determinación de las condiciones en la corriente de alimentación (Walas,1990).

\*Lo mismo ocurre en un reactor CSTR por lo tanto se omitió este paso.

### 3.5.2. Condiciones en el intercambiador de calor.

La alimentación fresca al proceso de reacción se encuentra a presión y temperatura ambiente, por lo que es necesario introducir un intercambiador de calor antes del reactor para el acondicionamiento térmico de la corriente de entrada al reactor, calentando la corriente de alimentación hasta 673.15K, (temperatura de burbuja de la corriente de entrada), Figura 3.8.

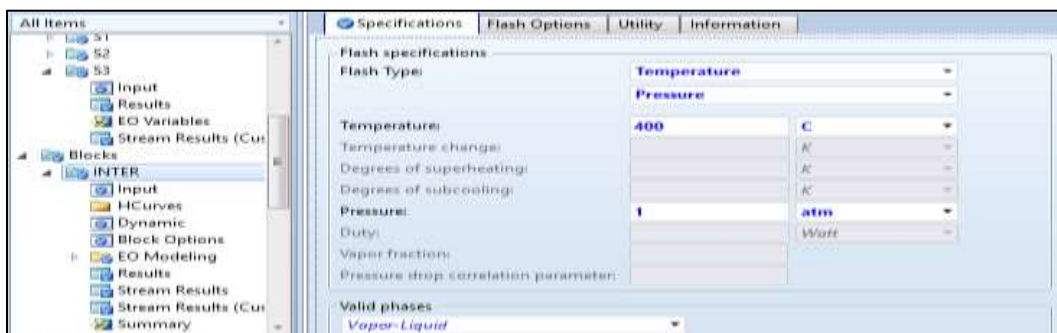


Figura 3.8 Condiciones del intercambiador de calor.

### 3.5.3. Dimensionamiento de los reactores.

En el dimensionamiento del reactor se tomó como línea base un volumen de 45 cm<sup>3</sup> (Waziri, et al., 2010), para el escalamiento del reactor se tomó en consideración la heurística mencionada Walas (1990) en donde la relación de longitud con el diámetro esta dada en la Tabla 3.2.

Tabla 3.2 Correlaciones con respecto al dimensionamiento de un recipiente (Walas,1990).

p (atm)	1-18.011491	18.079537-35.022982	35.091028-
L/D	3	4	5

Basado en que la geometría del reactor es cilíndrica el volumen del reactor se calcula mediante la Ecuación 3.9, empleando la proporción L/D mostrada en la Ecuación 3.10 y la definición del diámetro mostrada en la Ecuación 3.11.

$$V = \pi r^2 L \quad \text{Ec. 3.9}$$

$$\frac{L}{D} = 3 \quad \text{Ec. 3.10}$$

$$D = 2r \quad \text{Ec. 3.11}$$

En donde

$L$  = Longitud.

$r$  = Radio.

$V$  = Volumen.

$D$  = Diámetro

Integrando la Ecuación 3.10 y 3.11 en la 3.9 se obtiene la Ecuación 3.12, con la cual se determina el radio del reactor, para un volumen de 45 cm<sup>3</sup> el  $r=1.3365\text{cm}$ ,  $D=2.673\text{cm}$  y  $L=8.019\text{cm}$ .

$$r = \sqrt[3]{\frac{45\text{cm}^3}{6\pi}} \quad \text{Ec. 3.12}$$

Estos datos son introducidos en los reactores PFR y CSTR como se muestran en las Figuras 3.9 y 3.10.

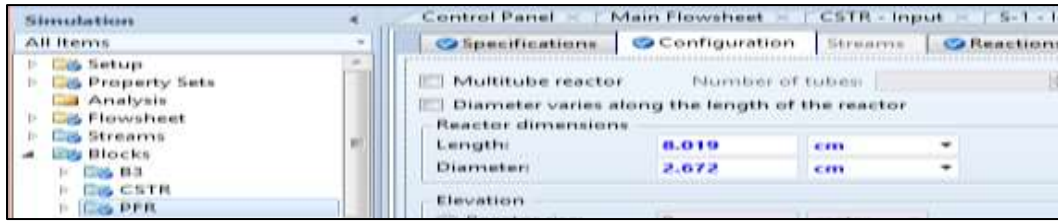


Figura 3.9 Dimensionamiento del PFR.

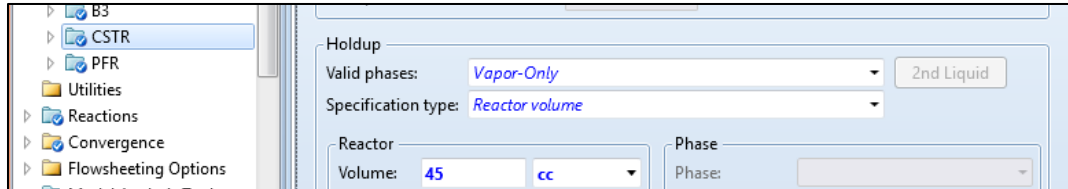


Figura 3.10 Dimensionamiento del CSTR.

### 3.5.4. Porosidad del lecho.

Se llama porosidad al espacio libre que existe entre las partículas que se encuentra dentro del lecho ( $\varepsilon$ ), el espacio libre entre moléculas es afectado por el tamaño y la forma de la partícula, este parámetro es definido por medio de la Ecuación 3.13.

$$\varepsilon = \frac{V_g}{V_{tanque}} \quad \text{Ec. 3.13}$$

En donde:

$V_g$  = Volumen del gas.

$V_{Tanque}$  = Volumen del tanque.

Para un  $F = 3.74 \times 10^{-6}$  kg/s (Apartado 3.4.1),  $V_o = 2.227 \times 10^{-6} \text{m}^3/\text{s}$ , Volumen del reactor  $45 \text{cm}^3$  y el TRH de 20s, se emplea la Ecuación 3.14 para calcular la densidad, teniendo como resultado  $\rho = 1.6793 \text{kg}/\text{m}^3$ .

$$\frac{F}{V_o} = \rho \quad \text{Ec. 3.14}$$

El volumen de gas ( $V_g$ ) que ocupa en el reactor, se calcula a partir de la Ecuación 3.15, en donde la densidad es de  $1.6793 \text{kg}/\text{m}^3$  y la masa del Tolueno ( $m$ ) se obtendrá a partir

de la Ecuación 3.8, para un  $F = 3.74 \times 10^{-6}$  kg/s y un TRH de 20s. Obteniendo así un  $V_g = 4.45 \times 10^{-5} \text{m}^3$ .

$$\rho = \frac{m}{V_g} \quad \text{Ec. 3.15}$$

Con la Ecuación 3.15 se obtuvo el volumen del sólido (catalizador), en cuenta que la densidad del sólido es de  $2120 \text{kg/m}^3$ . (Mineralogy Database), y con la masa de catalizador de  $8.1 \times 10^{-4} \text{kg}$  (Waziri, et al., 2010), obteniendo así un  $v_s = 3.8208 \times 10^{-7} \text{m}^3$ .

Ya que el volumen del tanque es igual al volumen gas más el volumen del sólido (Ecuación 3.16), el volumen del tanque es  $4.4882 \times 10^{-5} \text{m}^3$ .

$$V_{\text{tanque}} = V_g + V_s \quad \text{Ec. 3.16}$$

Generando las respectivas sustituciones en la Ecuación 3.13 se obtiene un valor de porosidad del  $\varepsilon = 99.1499\%$ . Posteriormente estos datos son introducidos en la simulación como se muestra en las Figuras 3.11.

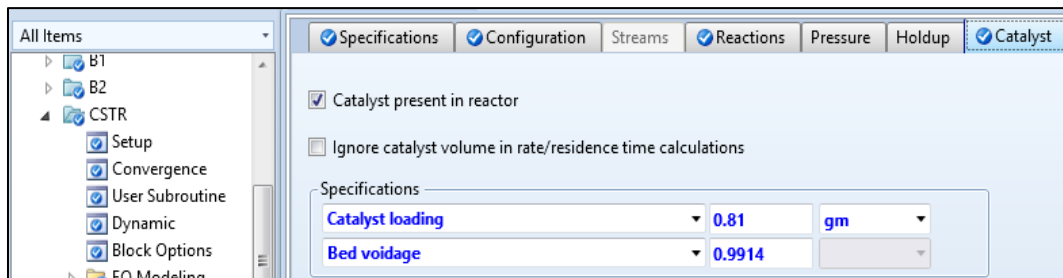


Figura 3.11 Porosidad del lecho en un PFR y CSTR.

### 3.5.5. Densidad de catalizador.

La densidad de la H-M es de  $2.12 \text{g/cm}^3$  (Mineralogy Database), este valor se toma como línea base para el análisis del efecto de la porosidad lecho y densidad del catalizador sobre el proceso (Figura 3.12).

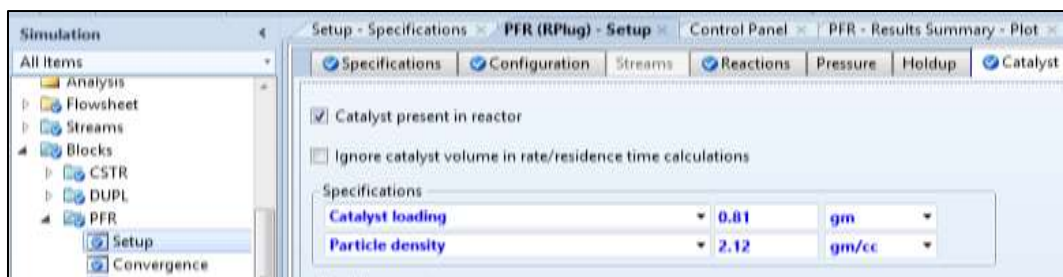


Figura 3.12 Densidad del catalizador en un PFR y CSTR.

### 3.6 Análisis paramétrico.

Los objetivos 3, 4 y 5 se lograron mediante la realización del análisis paramétrico mediante la herramienta Model Analysis Tools Sensitivity, con el fin de determinar las condiciones óptimas del proceso de reacción teniendo como principal objetivo el costo de operación mediante la integración de códigos en fortran en el análisis de sensibilidad, para evaluar el efecto de las variables de estado (Tabla 3.3) del proceso en el costo de operación. Empleando las ecuaciones de costos (Walas, 2010) como función objetivo para la identificación de las condiciones óptimas en los equipos principales y auxiliares.

En el análisis de sensibilidad se definieron las variables a calcular, las variables a manipular y los rangos de manipulación. En la Tabla 3.3 se muestran las variables a manipular, las cuales sirvieron para determinar el efecto que tienen sobre la conversión, rendimiento.

Tabla 3.3 Variables a manipular en la pestaña “Vary”.

Variables a manipular.		Variables a calcular.
CSTR.	PFR.	
Volumen.	Longitud.	Conversión, rendimiento, rentabilidad, consume energético, costo de equipo.
Temperatura.	Temperatura.	
Flujo de alimentación del sistema.	Flujo de alimentación del sistema.	
Presión.	Presión.	
	Diámetro.	

Los análisis de sensibilidad se realizaron mediante el siguiente procedimiento:

1) **Variar variables:** En la pestaña “Vary” se introdujeron las variables a manipular como se muestra en la Figura 3.13, 3.14 y 3.15 con los rangos mostrados en la Tabla 3.4. En esta tabla podemos observar que la temperatura máxima es 673.15K la cual es la temperatura en donde Waziri, et al. (2010) obtiene su máxima conversión, y con el proposito de observar el efecto que genera la temperatura sobre la conversión y el rendimiento, se disminuyo la temperatura a 643.15K.

Los rangos de trabajo empleados para el análisis de sensibilidad a partir de los valores de línea base (flujo másico, longitud, y diámetro) se muestran en la Tabla 3.4.



Figura 3.13 Variables a analizar en el PFR.

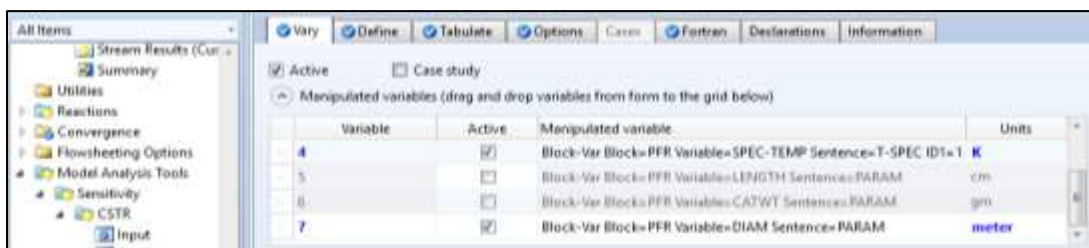


Figura 3.14 Variables a analizar en el PFR (continuación).

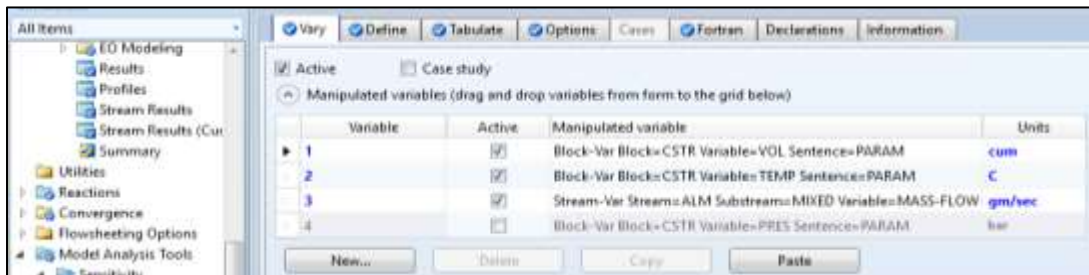


Figura 3.15 Variables a analizar en el CSTR.

Tabla 3.4 Rangos para generar el análisis.

	Temperatura	Presión	Flujo másico	Longitud	Diámetro	Volumen
Rangos	643.15-673.15K	1-1 atm	0.004-0.061 g/s	0.04-0.08cm	1-10cm	2.3561E-6m <sup>3</sup> -0.002356 m <sup>3</sup>

2) **Variables a calcular:** En la pestaña “Define” se colocaron los nombres de cada una de las variables a calcular como se muestra en las Figuras 3.16, 3.17, 3.18, 3.19, 3.20, 3.21.

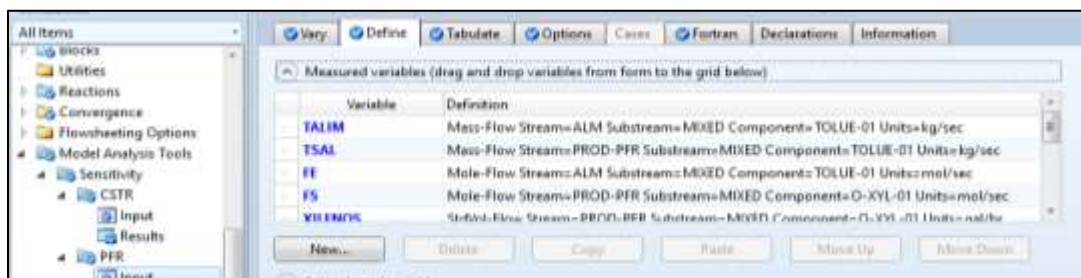


Figura 3.16 Definición de variables en el PFR.

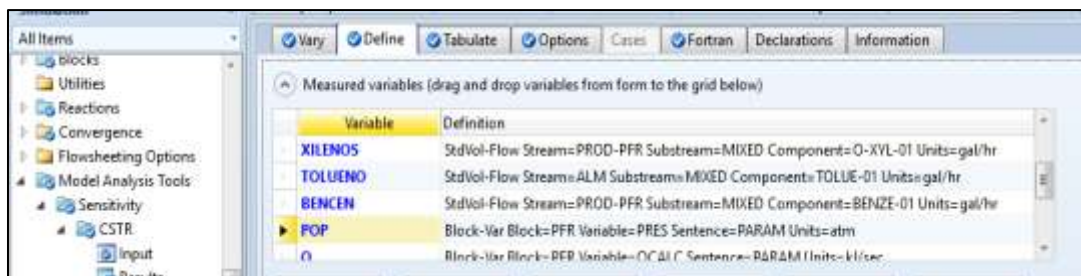


Figura 3.17 .Definición de variables en el PFR (continuación 1).

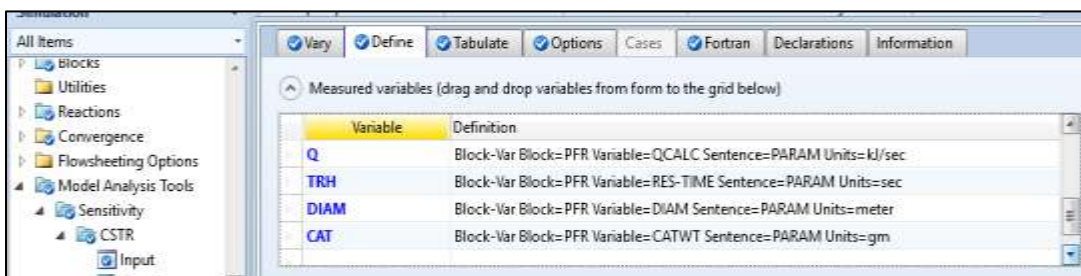


Figura 3.18 Definición de variables en el PFR (continuación 2).

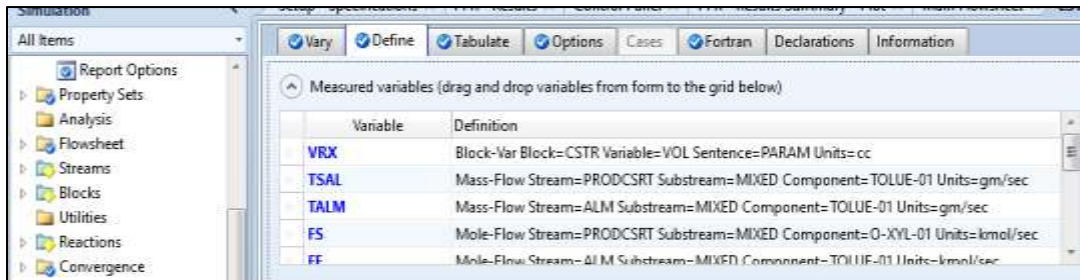


Figura 3.19 Definición de variables en el CSTR.

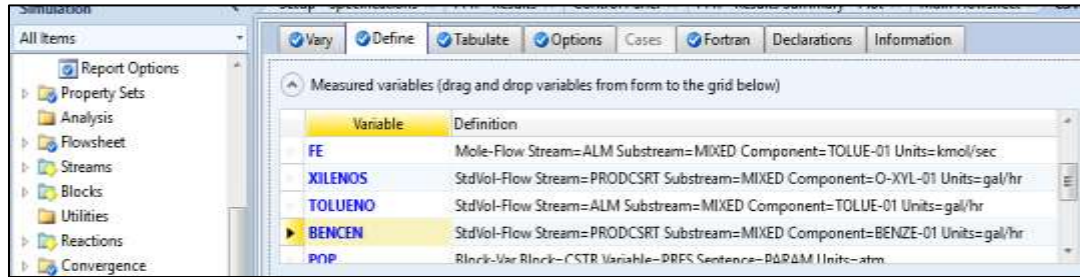


Figura 3.20 Definición de variables en el CSTR (continuación 1).

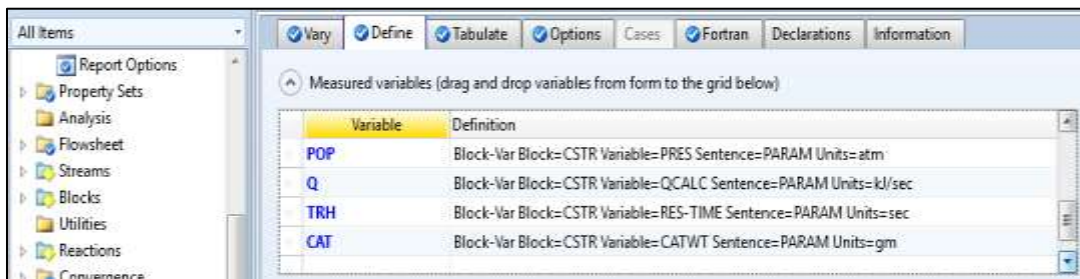


Figura 3.21 Definición de variables en el CSTR (continuación 2).

3) **Tabulate:** En la pestaña “Tabulate”, se estableció el formato que se desea para la tabla de resultados, como también algunas ecuaciones a calcular (Figuras 3.22 y 3.23).



Figura 3.22 “Tabulate” en el CSTR.



Figura 3.23 “Tabulate” en el PFR.

4) **Fortran:** En la pestaña “Fortran” se ubicaron las ecuaciones requeridas para el análisis de costos. A continuación mostraremos el procedimiento para el análisis de costos.

4.1) **Costos de materia prima, productos, subproductos y catalizador:** Para los costos de la materia prima, el costo de los productos y subproductos con respecto a nuestra producción, se utilizaron los costos organizacionales de PEMEX de Enero del 2015, el cual muestra el informe trimestral de Octubre- Diciembre del 2014 (Tabla 3.5). Debido a que AP8.4 maneja el flujo en Gal/s, se convirtieron los datos del mes de Diciembre a estas unidades, haciendo uso de la Ecuación 3.17 en donde un  $Gal = 0.0037m^3$  y un  $kg = 1000Tons$ .

Tabla 3.5 Costo del TXB reportados por PEMEX en Enero del 2014.

	Unidades	Octubre	Noviembre	Diciembre
Tolueno	\$/Tons	16,896.19	15,623.95	13,468.01
Xilenos 5°	\$/Tons	16,562.07	15,155.46	13,392.27
Benceno	\$/Tons	20,287.63	19,609.79	16,553.90

$$\rho = \frac{kg}{m^3} = \frac{Tons}{Gal} \quad \text{Ec. 3. 17}$$

Posteriormente con base a la Ecuación 3.18, se obtiene el precio en Gal de los componentes que intervienen en el proceso, como se muestra en la Tabla 3.6.

$$$/Gal = (\rho)($/Tons) \quad \text{Ec. 3. 18}$$

Tabla 3.6 Densidad y precio en Gal del TXB.

	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$\rho$ (Tons/Gal)	(\$/Gal)
Tolueno	866.9	3.20753x10 <sup>-3</sup>	43.1990
Xilenos	865	2.595x10 <sup>-3</sup>	34.0833
Benceno	876.6	2.62x10 <sup>-3</sup>	37.41185

El costo de la H-M es de \$158.8 dolares por 25 g de catalizador (Riogen, 2016).

**4.2) Efecto del tiempo sobre el equipo comprado:** Esto suele ser usado cuando se depende de los registros anteriores o de información de correlaciones publicadas con respecto a los precios. Los cuales son esenciales para poder actualizar los costos o para tomar en cuenta la inflación. La Ecuación 3.19 (Turton, et al.,2012) sirve para el cálculo del efecto del tiempo sobre el costo. Por lo tanto este apartado servirá para actualizar cada costo con la Ecuación 3.19.

$$C_2 = C_1 \left( \frac{I_2}{I_1} \right) \quad \text{Ec. 3.19}$$

Donde

$C_2$  =Costo anualizado.

$C_1$  =Costo base.

$I_1$  =El índice de costo, con base al año del costo base.

$I_2$  =El índice de costo, con base al año del costo anualizado.

Los índices de costos provenientes de las revistas Chemical Engineering (2003-2014) se observan en las Figuras 3.24, 3.25, 3.26.



Figura 3.24 Índice de costos del 2003-2010 (Chemical Engineering).

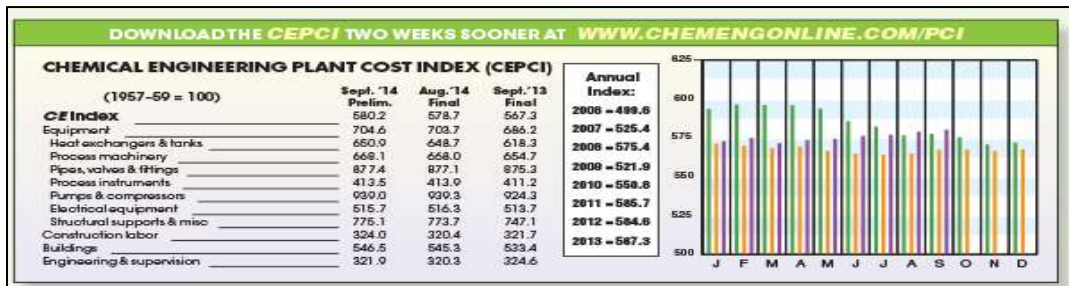


Figura 3.25 Índice de costos del 2006-2013 (Chemical Engineering).



Figura 3.26 Índice de costos del 2007-2014 (Chemical Engineering).

**4.3) Selección del material de construcción:** La Tabla 3.7 muestra las ventajas y desventajas de algunos materiales usados para los tanques de almacenamiento reportados por Turton, et al. (2012). Debido a que el material de construcción depende de los químicos que estarán en contacto con el equipo, se usó la Tabla 3.8 para la selección del material adecuado para el proceso, en donde se observa que el acero inoxidable 304 es el material indicado para los componentes de TXB, además de que es uno de los más usado a nivel industrial.

Tabla 3.7 Ventajas y desventajas de los materiales usados para tanques de almacenamiento (Turton, et al., 2012).

Material.	Ventajas.	Desventajas.
Acero al carbón.	Bajo costo, fácil de conseguir, resistente a la abrasión, de fabricación estándar, resistente alcalina.	Mala resistencia a los ácidos y alcalinos fuertes, a menudo causa la decoloración.
Acero inoxidable.	Resiste la mayoría de los ácidos, reduce la decoloración, disponibles con una variedad de aleaciones, abrasión menos de acero suave.	No es resistente a cloruros, más caro, más difícil de fabricación, materiales de aleación pueden haber efectos catalíticos.
Monel-Níquel.	Poca decoloración. Resistente a cloruros.	No es resistente en ambientes oxidantes. Es costoso.
Hastelloy.	Mejorado a lo largo de níquel Monel.	Más caro que el Monel y Níquel.

Tabla 3.8 Materias empleados en un tanque de almacenamiento, con respecto a los componentes que ocuparemos para nuestro proceso (Turton, et al., 2012).

Componente químico	Acero al carbón	304 Acero inoxidable	316 Acero inoxidable	Aluminio	Cobre	Latón	Monel	Metal
Benceno	A	A	A	A	A	A	A	A
Tolueno	A	A	A	A	A		A	A
Xilenos		A	A					A

#### 4.4) Ecuaciones para costo de los recipientes:

Walas (2010) menciona las ecuaciones de costos para recipientes, en donde los costos de los recipientes varían con respecto a las dimensiones y el recubrimiento. (Ecuaciones 3.20, 3.21, 3.22, 3.23, 3.24, 3.25).

##### Para recipientes horizontales presurizados:

$$C = F_M C_D + C_a \quad \text{Ec. 3.20}$$

$$C_b = 1.218 \exp[8.571 - 0.2330(\ln W) + 0.04333(Ln W)^2] \quad \text{Ec. 3.21}$$

Restricciones para la Ecuación 3.21.

$800 < W < 914,000$  lb peso del recubierto.

$$C_a = 1669 D^{0.2029} \quad \text{Ec. 3.22}$$

Restricciones para la Ecuación 3.22.

$3 < D < 12$  ft diámetro (plataformas y escalera)

##### Para recipientes verticales:

$$C = F_M C_D + C_a \quad \text{Ec. 3.23}$$

$$C_b = 1.218 \exp[9.100 - 0.2889(\ln W) + 0.04576(Ln W)^2] \quad \text{Ec. 3.24}$$

Restricciones de la Ecuación 3.24.

$5000 < W < 226,000$  lb.

$$C_a = 300 D^{0.7396} L^{0.7066} \quad \text{Ec. 3.25}$$

Restricciones para la Ecuación 3.25.

$6 < D < 10, 12 < L < 20$

Para estas ecuaciones el factor de costo  $F_M$  estará dado por la Tabla 3.9, la cual está diseñada para el material usado en el proceso químico.

Tabla 3.9 Factor de costo para el material de los recipientes (Walas, 2010).

Material	Factor costo $F_M$
Acero inoxidable, 304	1.7
Acero inoxidable,316	2.1
Carpenter 20 CB-3	3.2
Nickel-200	5.4
Monel-400	3.6
Inconel-600	3.9
Incoloy-825	3.7
Titanio	7.7

Debido a que el dimensionamiento de los reactores CSTR y PFR no se encuentran dentro de los parámetros de las ecuaciones de Walas (2010), se utilizó el peso del material y el diámetro mínimo para hacer uso de ellas.

**4.5) Servicios Auxiliares:** Las utilidades de proceso por lo general incluyen electricidad, vapor de proceso, refrigerante, aire comprimido, agua de refrigeración, agua caliente, aceite caliente, agua de proceso, agua desmineralizada, agua municipal, y el río, lago o el agua del océano (Ulrich, et al., 2006). Para obtener el costo de los servicio se utilizó la Ecuación 3.26.

Debido a que con respecto a las investigaciones reportadas por Menard y Kelly, et al., 2004, las cuales mencionan que la reacción del TDP es ligeramente exotermica, se omitió el agua de enfriamiento como servicio auxiliar para el reactor. Siendo así el único servicio auxiliar el vapor de agua, que es usado para el intercambiador de calor.

$$C_{su} = a(CEPCI) + b(CSF) \quad \text{Ec. 3.26}$$

Donde:

$C_{s,u}$  =Precio de utilidad.

$a$  y  $b$  =Son los coeficientes de utilidades.

$(C_{sf})$  =El precio de petróleo en \$/GJ.

$CEPCI$  =Chemical Engineering Plant Cost Index, es un parámetro de la inflación para proyectos en el U.S. Con base a este artículo se necesitó el índice de costos del 2005, el cual es de 499.6 (Figura 3.24).

En la Tabla 3.10 reportada Ulrich, et al., 2006 podemos observar los coeficientes de  $a$  y  $b$  que se pueden utilizar en nuestro proceso.

Tabla 3.10 Coeficientes de costos (Ulrich, et al., 2006).

Parámetros.	Coeficientes de costos.	
	a	b
Proceso de vapor, \$/kg		
Módulo de proceso.	$2.7 \times 10^{-5} m_s^{-0.9}$	$0.0034 p^{0.05}$
De base.	$2.3 \times 10^{-5} m_s^{-0.9}$	$0.0034 p^{0.05}$

De la Ecuación 3.27, se obtuvo el flujo masico ( $m_s$ ), en donde el  $CP$  del vapor del agua proviene de las Tablas de Perry, et al. (2008) (Figura 3.27), en donde para una temperatura de 683.15 K se obtuvo un  $CP$  de vapor del 0.03741 kJ/molK

$$Q_{RX} = m_s CP(\Delta T) \quad \text{Ec. 3.27}$$

Donde:

$m_s$ =Flujo másico en kg.

$CP$ =Calor específico.

$\Delta T$ =Delta de temperaturas.

TABLE 2-305 Thermodynamic Properties of Water (Continued)								
Temperature K	Pressure MPa	Density mol/dm <sup>3</sup>	Volume dm <sup>3</sup> /mol	Int. energy kJ/mol	Enthalpy kJ/mol	Entropy kJ/(mol·K)	C <sub>v</sub> kJ/(mol·K)	C <sub>p</sub> kJ/(mol·K)
Saturated Properties								
450	0.93220	0.26711	3.7438	46.492	49.982	0.11907	0.034362	0.048177
460	1.1709	0.33209	3.0113	46.609	50.134	0.11764	0.035561	0.050489
470	1.4551	0.40925	2.4435	46.708	50.263	0.11627	0.036821	0.053005
480	1.7905	0.50035	1.9986	46.788	50.367	0.11493	0.038137	0.055809
490	2.1831	0.60738	1.6464	46.848	50.442	0.11362	0.039503	0.058919
500	2.6392	0.73265	1.3649	46.885	50.487	0.11233	0.040920	0.062388
510	3.1655	0.87884	1.1379	46.898	50.500	0.11105	0.042391	0.066259
520	3.7690	1.0491	0.95315	46.883	50.475	0.10979	0.043920	0.070723
530	4.4589	1.2473	0.80174	46.838	50.411	0.10852	0.045519	0.075827
540	5.2389	1.4780	0.67659	46.758	50.302	0.10724	0.047197	0.081789
550	6.1172	1.7471	0.57235	46.641	50.142	0.10595	0.048968	0.088573
560	7.1062	2.0620	0.48497	46.478	49.925	0.10462	0.050848	0.097461
570	8.2132	2.4325	0.41110	46.264	49.641	0.10324	0.052856	0.10813
580	9.4480	2.8720	0.34819	45.988	49.278	0.10180	0.055017	0.12178
590	10.821	3.3994	0.29417	45.636	48.819	0.10026	0.057361	0.13994
600	12.345	4.0434	0.24732	45.188	48.242	0.098600	0.059939	0.16540
610	14.033	4.8497	0.20620	44.613	47.506	0.096755	0.062831	0.20384
620	15.901	5.9009	0.16946	43.855	46.550	0.094631	0.066197	0.26923
630	17.969	7.3737	0.13562	42.801	45.238	0.0922029	0.070465	0.40819
640	20.265	9.8331	0.10170	41.095	43.156	0.088324	0.077576	0.94736
647.1	22.064	17.874	0.055948	36.314	37.548	0.079393		
Single-Phase Properties								
300	0.1	55.317	0.018078	2.0277	2.0295	0.007081	0.074406	0.075315
372.76	0.1	53.212	0.018793	7.5196	7.5214	0.02347	0.067921	0.075938
372.76	0.1	0.032769	30.517	45.135	48.190	0.13257	0.02801	0.037444
400	0.1	0.030397	32.598	45.900	49.189	0.13516	0.02717	0.036170
500	0.1	0.024154	41.401	45.619	52.759	0.14313	0.02717	0.035663
600	0.1	0.020086	49.786	51.387	56.365	0.14970	0.028103	0.036513
700	0.1	0.017201	58.136	54.256	60.069	0.15541	0.029225	0.037592
800	0.1	0.015044	66.471	57.240	63.887	0.16050	0.030431	0.038778
900	0.1	0.013369	74.799	60.347	67.827	0.16514	0.031887	0.040024

Figura 3.27 Propiedades físicas y químicas del vapor del agua (Perry, et al., 2008).

$\Delta T$  Son las temperatura de burbuja del Tolueno (395.29K) y la temperatura ideal que opera el reactor (673.15K), con su respectivo enfoque de temperatura mínima (10°C) reportado por Turton, et al. (2012). Estos datos fueron intruducidos en la Ecuación 3.27 obteniendo así la Ecuación 3.28.

$$M_s = \frac{\left( \frac{Q_{RX}}{0.03741 \frac{kJ}{molK} (683.15 - 395.29K)} \right)}{100g} \left( 18 \frac{g}{mol} \right) \quad \text{Ec. 3. 28}$$

(C<sub>sf</sub>)=Con respecto a la Figura 3.28, se calculó el costo base del servicio auxiliar en el año 2005, el cual es de 11.20 \$/GJ.

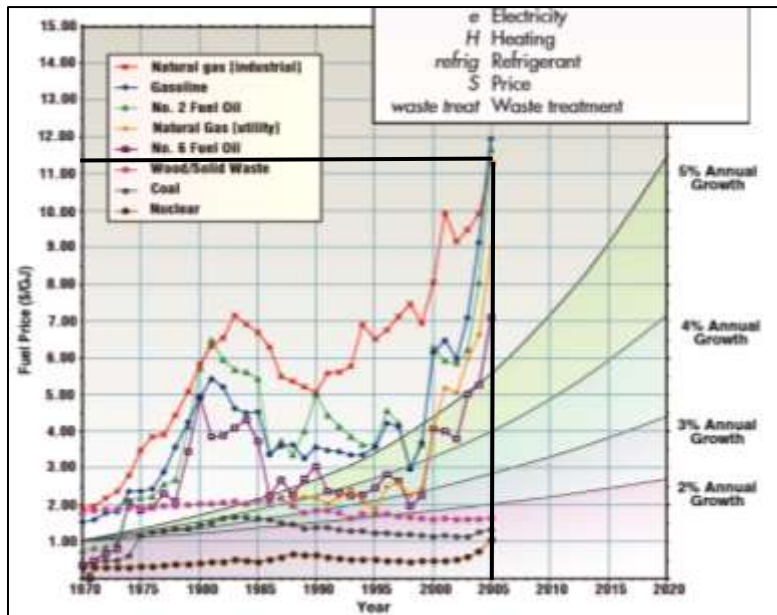


Figura 3.28 Gráfico para la obtención del ( $C_{sf}$ ) (Ulrich, et al., 2006).

Para el reactor PFR, se generó un arreglo, con el fin de identificar con mayor precisión el costo energético, debido a la variación de las temperaturas en el intercambiador de calor. Esto se logró colocando en AP8.4, que el reactor PFR funciona con respecto a la temperatura de alimentación (Figura 3.29) y posteriormente la pestaña “Vary” se modificó la temperatura a analizar (Figura 4.30). Este arreglo solo pudo generarse en el reactor PFR, debido a que el simulador en los reactores CSTR y de lecho fluidizado no cuentan con esta opción.

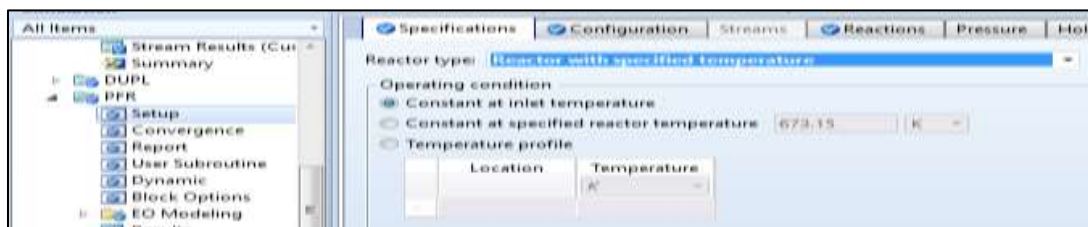


Figura 3.29 Variación con respecto a la temperatura en el reactor PFR.

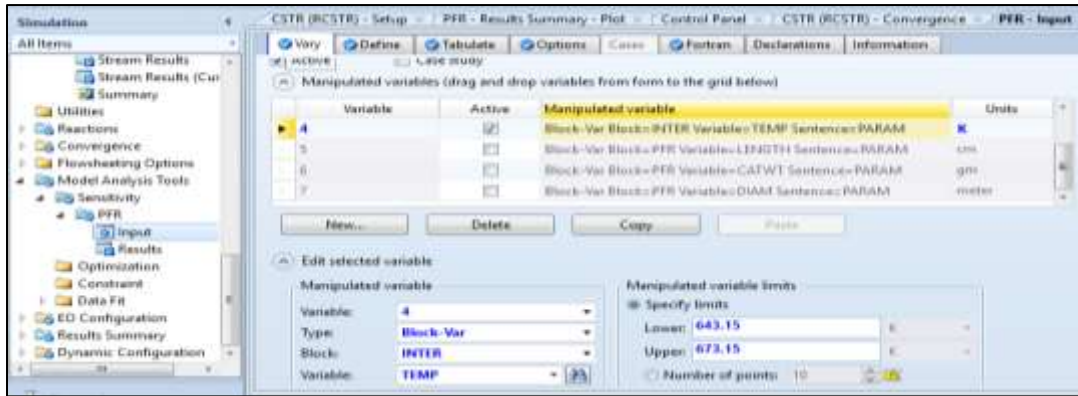


Figura 3.30 Variación de la localización del análisis con respecto a la temperatura.

**4.6) Interés compuesto:** En la entidad crediticia se cobra un interés por el préstamo en una compensación por los beneficios percibidos. Y a esto que se le puede llamar como el costo del alquiler de dinero. (Perry, et al., 2008). Por lo tanto con base a la Figura 3.31 (Perry, et al., 2008), con respecto factor de intereses discreto, se obtiene el factor a 20 años el cual es un tiempo considerable para el préstamo del equipo adquirido, obteniendo así un factor del 0.08024, el cual posteriormente se multiplica por el costo del reactor.

<b>TABLE 9-21 Discrete Compound Interest Factors*</b>						
n	Single payment		Uniform annual series			
	Compound-amount factor	Present-worth factor	Sinking-fund factor	Capital-recovery factor	Compound-amount factor	Present-worth factor
	Given P, to find F $\frac{1}{(1+i)^n}$	Given F, to find P $\frac{1}{(1+i)^n}$	Given F, to find A $\frac{i}{(1+i)^n - 1}$	Given P, to find A $\frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1}$	Given A, to find F $\frac{(1+i)^n - 1}{i}$	Given A, to find P $\frac{(1+i)^n - 1}{i(1+i)^n}$
5% Compound Interest Factors						
1	1.050	0.9524	1.00000	1.05000	1.000	0.952
2	1.103	.9070	0.48780	0.53780	2.050	1.859
3	1.158	.8638	.31721	.36721	3.153	2.723
4	1.216	.8227	.23201	.28201	4.310	3.546
5	1.276	.7835	.18097	.23097	5.526	4.329
6	1.340	.7462	.14702	.19702	6.802	5.076
7	1.407	.7107	.12282	.17282	8.142	5.786
8	1.477	.6768	.10472	.15472	9.549	6.463
9	1.551	.6446	.09069	.14069	11.027	7.108
10	1.629	.6139	.07940	.12950	12.578	7.722
11	1.710	.5847	.07039	.12039	14.207	8.306
12	1.796	.5568	.06283	.11283	15.917	8.863
13	1.886	.5303	.05646	.10646	17.713	9.394
14	1.980	.5051	.05102	.10102	19.599	9.899
15	2.079	.4810	.04634	.09634	21.579	10.380
16	2.183	.4581	.04227	.09227	23.657	10.838
17	2.292	.4363	.03870	.08870	25.840	11.274
18	2.407	.4155	.03555	.08555	28.132	11.690
19	2.527	.3957	.03275	.08275	30.539	12.085
20	2.653	.3769	.03024	.08024	33.066	12.462

Figura 3.31 Cálculo del interés compuesto(Perry, et al., 2008).

**4.7) Cálculo del costo de operación:** En este apartado se sumaron los costos de la columna anualizada, el costo energético y el costo del catalizador.

**4.8) Utilidad bruta:** Es la diferencia entre los ingresos de una empresa y los costos de operación. Sin tomar en cuenta los costos fijos, los costos financieros o los pagos de interés sobre deuda (Ecuación 3.29).

$$UB = CX - \text{costos} \quad \text{Ec. 3.29}$$

Donde:

UB=Utilidad bruta.

CX =Ingresos por la venta de Xilenos producidos.

Costos=Precio de operación.

### 3.7. Reactor de lecho fluidizado.

En el apartado anterior se generaron los análisis a los reactores CSTR y PFR para determinar las condiciones óptimas para el proceso. Con los resultados obtenidos de los análisis, se generaron toma decisiones, con el fin de introducir en el reactor de lecho fluidizado los datos que servirán para obtener un proceso rentable (Figura 3.32).

Se utilizó un reactor de lecho fluidizado puesto que las velocidades de transferencia de calor y masa entre el gas y las partículas son mayores que en otros sistemas de mezclado.

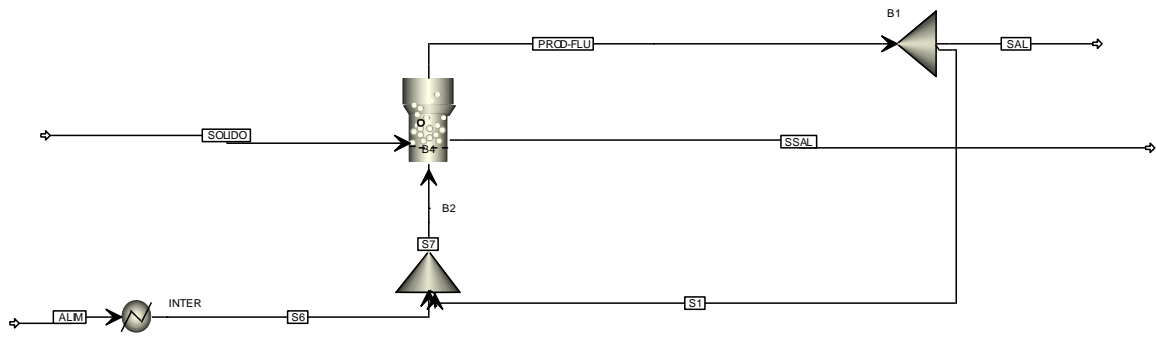


Figura 3.32 Reactor de lecho fluidizado.

#### 3.7.1 Componentes que intervienen en el reactor de lecho fluidizado.

Los reactores de lecho fluidizados se caracterizan por el uso de catalizadores, es por ello que en este apartado se introdujo el tipo de catalizador en la pestaña de propiedades de AP8.4. Debido a que la H-M no se encuentra en el simulador, se utilizó un catalizador que tuviera una composición química, y una densidad semejante a la Zeolita H-M (Figura 3.33).

Component ID	Type	Component name	Alias
TOLUE-01	Conventional	TOLUENE	C7H8
O-XYL-01	Conventional	O-XYLENE	CBH10-1
BENZE-01	Conventional	BENZENE	C6H6
SOLIDO	Conventional	AL2Si2O7*2H2O	KAOLINITE

Figura 3.33 Componentes que intervienen el reactor de lecho fluidizado.

### 3.7.2. Corriente de alimentación.

La Ecuación 3.30 sirvió para determinar el flujo másico preliminar para el reactor de lecho fluidizado, en donde el flujo volumétrico y el flujo másico son de  $6.80 \times 10^{-7} \text{m}^3/\text{s}$  y  $1.13 \times 10^{-6} \text{kg}/\text{s}$  respectivamente, los cuales son reportados por el reactor PFR en un TRH de 20s. Obteniendo así una  $\rho = 1.67 \text{kg}/\text{m}^3$

$$\rho = \frac{\dot{F}}{V_o} \quad \text{Ec. 3.30}$$

Donde:

$F$  =Flujo másico.

$V_o$  =Flujo volumétrico.

$\rho$  =Densidad.

Para la utilización de la Ecuación 3.31, se utilizó una velocidad ( $V_e$ ) de  $0.000428056 \text{m}/\text{s}$  (mencionada por AP8.4), con respecto a un área ( $A$ ) de  $18.63 \text{m}^2$ . Obteniendo así un  $V_{o_2} = 0.00798 \text{m}^3/\text{s}$ .

$$V_{o_2} = A V_e \quad \text{Ec. 3.31}$$

Para la obtención del nuevo flujo másico se utilizó la Ecuación 3.32, en donde el flujo másico es de  $0.0133 \text{kg}/\text{s}$ .

$$\dot{m}_2 = \rho(V_{o_2}) \quad \text{Ec. 3.32}$$

Debido a que a flujos pequeños, tienden a quedarse en el catalizador, se fue modificando el flujo con el fin de evitar el problema anterior, obteniendo así un flujo de  $0.010499 \text{kg}/\text{s}$ , con una conversión de Tolueno de 50.32% y un TRH de 6.073min. Estos datos fueron introducidos en AP8.4 (Figura 3.34).

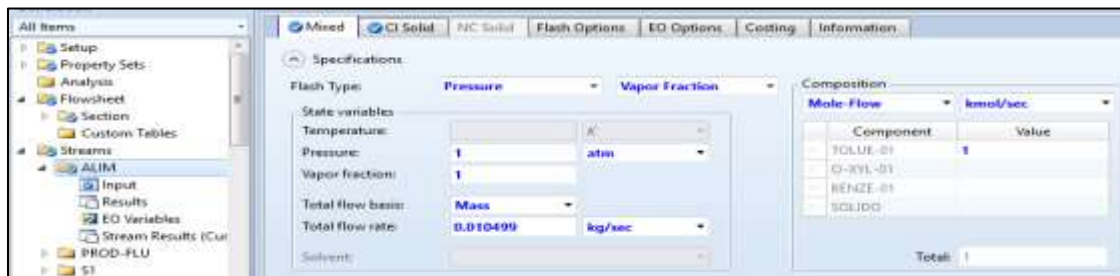


Figura 3.34 Corriente de alimentación al reactor de lecho fluidizado.

### 3.7.3. Dimensionamiento del intercambiador de calor.

En el proceso de TDP en un reactor de lecho fluidizado, la alimentación fresca al proceso de reacción se encuentra a presión y temperatura ambiente al igual que en los reactores CSTR y PFR, por lo que es necesario introducir un intercambiador de calor antes del reactor para el acondicionamiento térmico de la corriente de entrada al reactor, calentando la corriente de alimentación hasta 673.15K, (temperatura de burbuja de la corriente de entrada).



Figura 3.35 Dimensionamiento del intercambiador de calor.

### 3.7.4. Dimensionamiento del reactor de lecho fluidizado.

Con el fin de recuperar y reutilizar el Tolueno no consumido, y a su vez con el objetivo de aumentar la conversión, se generó una recirculación del 90% (Figura 3.36).



Figura 3.36 Recirculación.

Los catalizadores generalmente reaccionan con uno o más de los reactivos para formar productos intermedios que, posteriormente, conducen al producto final de reacción, a menudo bastan pequeñas cantidades del catalizador para incrementar la velocidad de una reacción. Por lo tanto la cantidad de masa del catalizador utilizada en el reactor, fue la cantidad mínima de catalizador que mostraba AP8.4 para un reactor de lecho fluidizado

debido la masa de catalizador reportada por Waziri, et al. 2010 es para reactores de menores dimensiones (Figura 3.37).

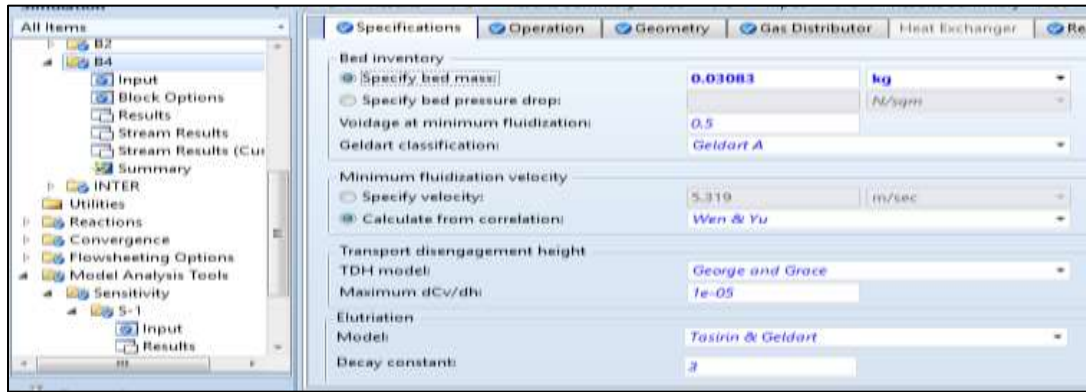


Figura 3.37 Masa del catalizador.

Con respecto a la literatura y a los análisis realizados anteriormente, se demostró que tenemos mayores conversiones a una temperatura de 673.15 K, por lo tanto este dato fue utilizado en el reactor de lecho fluidizado (Figura 3.38).

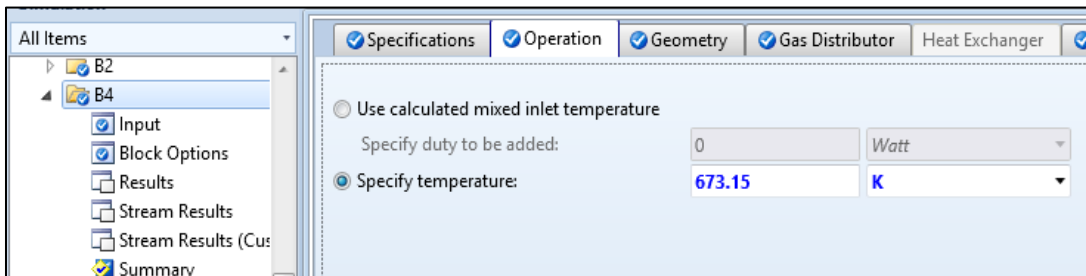


Figura 3.38 Temperatura en la que opera el reactor.

Con base al manual reportado por aspentech, 2013, se especificaron las dimensiones del reactor de lecho fluidizado, con el objetivo de generar una caída de presión en el reactor (Figura 3.39)

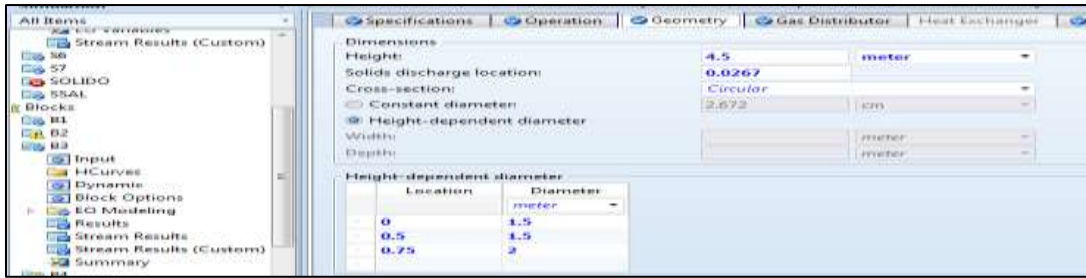


Figura 3.39 Dimensionamiento del reactor de lecho fluidizado.

### 3.7.5 Dimensionamiento del catalizador.

Los catalizadores no son uniformes, es decir tienen distintos tamaños de partículas, por lo tanto para el dimensionamiento del catalizador Choudhury, et al. (1997) muestra un gráfico para la distribución de partículas con respecto a la H-M a diferentes proporciones (Figura 3.40), de las cuales, se usó la de 12.40, para posteriormente introducirlos en AP8.4 (Figura 3.41).

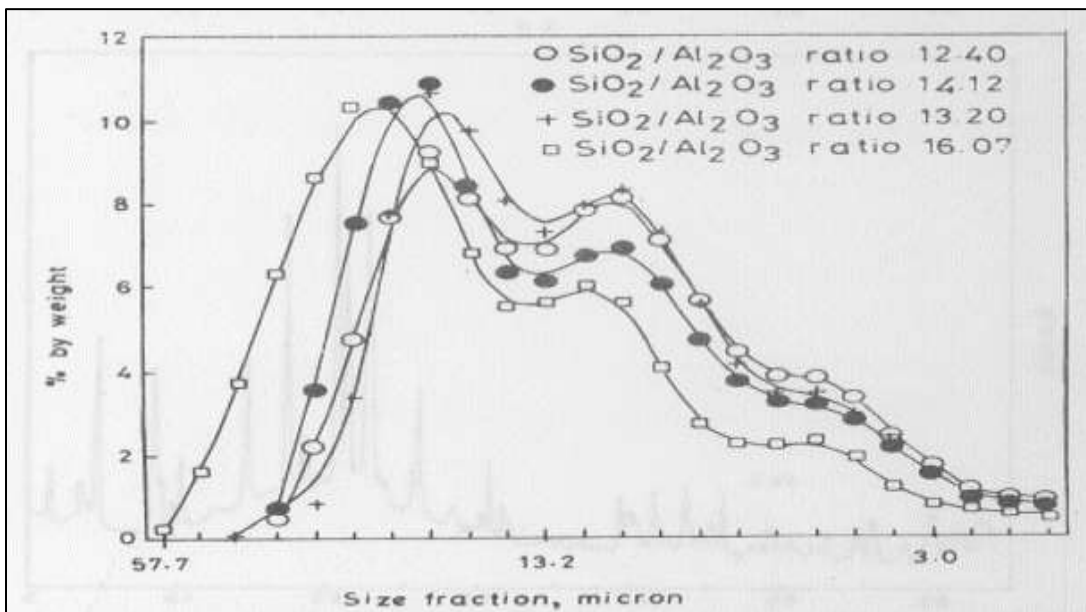


Figura 3.40 Distribución de partículas para la H-M (Choudhury, et al.,1997).

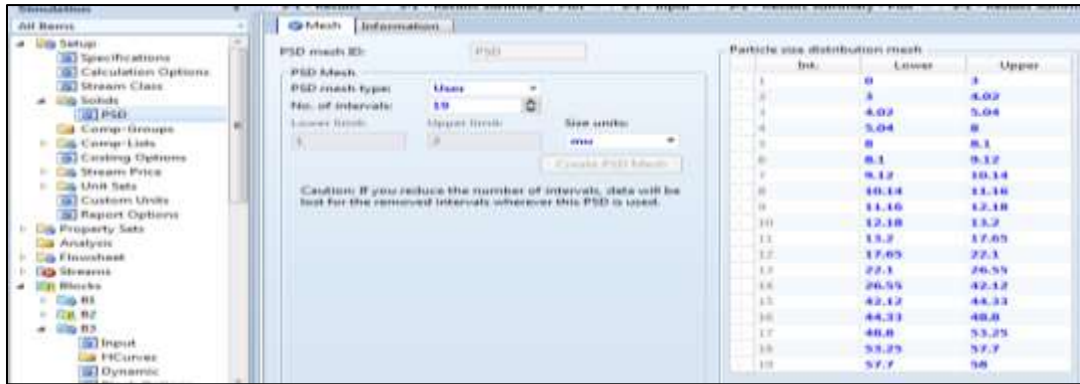


Figura 3.41 Distribución de partículas en AP8.4.

### 3.7.6 Análisis de sensibilidad para el Reactor de lecho fluidizado.

En la pestaña “Vary” se introdujeron las variables a manipular se introdujeron las variables a manipular, con respecto a los rangos registrados en la Tabla 3.11.

Tabla 3.11 Rangos para el análisis de sensibilidad para el reactor de lecho fluidizado.

	Temperatura	Flujo
Rangos	671.5944-673.15K	0.005-0.01185kg/seg

En las ventanas de “Tabulet” y “Define” se colocaron las mismas variables y ecuaciones que se usaron en el reactor CSTR y PFR (Apartado 3.5). En la pestaña “Fortran” las ecuaciones de costos se mantuvieron iguales a las realizadas en los reactores PFR y CSTR, con la excepción de las ecuaciones para recipientes reportadas por Walas (2010), en donde debido al dimensionamiento del reactor de lecho fluidizado, se puede hacer uso de ellas con las especificaciones del reactor.

Siendo el peso del envoltorio, una de las variables importante para el uso de estas ecuaciones, se utilizó la Ecuación 3.33.

$$W = (V_{envol})(\rho_{acero}) \tag{Ec. 3.33}$$

Donde:

$\rho_{acero}$  = La densidad del acero inoxidable 304 es de 499.392lb/ft<sup>3</sup> (Allow wire internacional, 2016).

$V_{envol}$  = Para el volumen del envolvimiento se usó la Ecuación 3.34, en donde el volumen interno ( $V_{int}$ ) y el volumen externo ( $V_{ext}$ ) se obtuvieron de las Ecuación 3.35 y 3.36 respectivamente.

$$V_{envol} = V_{int} - V_{ext} \quad \text{Ec. 3.34}$$

$$V_{int} = \frac{\Pi(D_{in}^2)}{4} H \quad \text{Ec. 3.35}$$

$$V_{ext} = \frac{\Pi(D_{ext}^2)}{4} H \quad \text{Ec. 3.36}$$

Para la obtención del diámetro externo se usó la Ecuación 3.37.

$$D_{ext} = D_{in} + T_{in} \quad \text{Ec. 3.37}$$

En donde:

$D_{ext}$  = Diámetro externo.

$D_{in}$  = Diámetro interno.

$T_{in}$  = Recubrimiento del equipo.

La presión del equipo es proporcional al espesor de las paredes del equipo. Por lo tanto para un recipiente cilíndrico que funciona a mayor que la presión ambiente, la relación entre la presión de diseño y grosor de la pared requerida para soportar la tensión radial en la forma cilíndrica del recipiente, el código de American Society of Mechanical Engineers (ASME) recomienda la Ecuación 3.38. (Turton, et al., 2012).

$$T_{in} = \frac{(PD)(D_{IN})}{(2SE) - (1.2PD)} \quad \text{Ec. 3.38}$$

En donde:

$T_{in}$  = Recubrimiento del equipo.

$PD$  = Es la presión usada en el sistema.

$D_{in}$  = Diámetro interno = 6.5617ft

$S$  = Módulo de deformación.

$E$  = Eficiencia de la soldadura 0.85.

Walas (1990) menciona que la presión de diseño es de 10% o 0.68046-1.70115atm sobre la presión máxima de operación, en este trabajo se optó por 1.2 sobre la presión máxima de operación.

Para la obtención del módulo de deformación, la Figura 3.42 (Walas, 1990) muestra los diferentes módulos de deformación para los distintos tipos aceros inoxidable. Con respecto al acero inoxidable 304, se generó una regresión polinómica (Figura 3.43), con estos valores, de la cual se encontró la Ecuación 3.39, siendo esta ecuación posteriormente usada para encontrar el módulo de deformación a una temperatura de 752°F, siendo el módulo de deformación de 1183.91psig o 771.1035bar (Tabla 4.12).

A.S.M.E. Specification No.	Grade	Nominal composition	Specified minimum tensile strength	For temperatures not exceeding °F.											
				-20 to 100	200	400	700	900	1000	1100	1200	1300	1400	1500	
SA-240	304	18 Cr-8 Ni	75,000	18,700	15,600	12,900	11,000	10,100	9,700	8,800	6,000	3,700	2,300	1,400	
SA-240	304L†	18 Cr-8 Ni	70,000	15,600	13,300	10,000	9,300								
SA-240	310a	25 Cr-20 Ni	75,000	18,700	16,900	14,900	12,700	11,600	9,800	5,000	2,500	700	300	200	
SA-240	316	16 Cr-12 Ni-2 Mo	75,000	18,700	16,100	13,300	11,300	10,000	10,600	10,300	7,400	4,100	2,200	1,700	
SA-240	410	13 Cr	65,000	16,200	15,400	14,400	13,100	10,400	6,400	2,900	1,000				

Figura 3.42 Modulo de deformación para acero inoxidable (Walas,1990).

Tabla 3.12 Datos citados por Walas (2010), para acero inoxidable y su regresión logarítmica.

Wallas 1990		Regresión logarítmica	
T(X) °F	S(Y) psig	T(X) °F	S(Y) psig
-20	18700	-20	19518.25
100	18700	100	17164.62
200	15600	200	15695.31
400	12900	400	13661.89
700	11000	700	11556.83
900	10100	900	9967.49
1000	9700	1000	8960.95
1100	8800	1100	7764.70
1200	6000	1200	6353.58
1300	3700	1300	4711.42
1400	2300	1400	2830.97
1500	1400	1500	713.95
Resultado			
T(X) °F		S(Y) psig	
752		11183.91	

$$y = 3.73283E - 9x^4 - 1.986958E - 5x^3 + 2.768886E - 2x^2 - 2.166488E + 1x + 1.907372E + 4 \quad \text{Ec. 3.39}$$

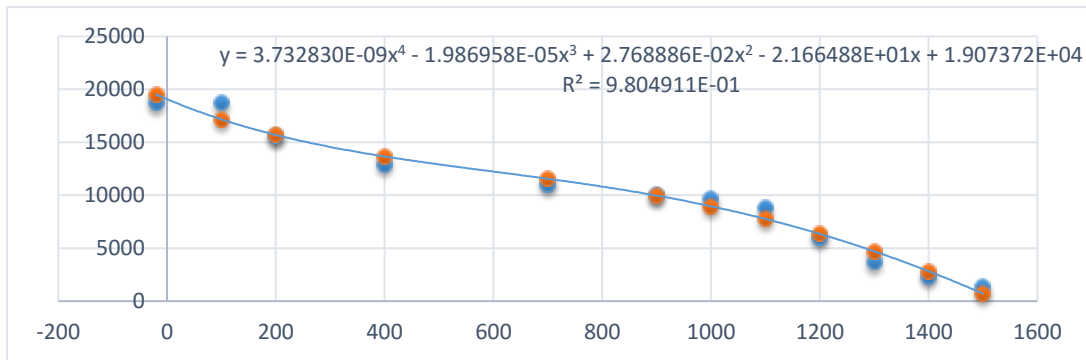


Figura 3.43 Regresión logística.

La eficiencia de soldadura depende del tipo de soldadura y el grado de examen de la soldadura. Los valores típicos reportados por el Turton, et al. (2012), son de 1,0 a 0,6, por lo tanto se usó un valor de eficiencia de soldadura de 0.85.

Posteriormente generando las considerables sustituciones en las ecuaciones anteriores se consiguieron los resultados mostrados en la Tabla 3.13.

Tabla 3.13 Resultados para la obtención del peso del envoltorio.

Diámetro interno	Diámetro externo	Volumen interno	Volumen externo	Volumen del envoltorio	Peso del material
6.561ft	6.599ft	499ft <sup>3</sup>	14.76ft <sup>3</sup>	5.81ft <sup>3</sup>	2,901.46lb

La Tabla 3.13 demuestra que el peso del envoltorio del recipiente se encontraba por debajo de los límites mínimos permisibles, esto se debe a que estas ecuaciones de costos para recipientes son para presiones de operación por arriba de las 2atm. Por lo tanto se utilizó el valor mínimo del peso del envoltorio. Con respecto a las dimensiones del reactor, se usaron los valores de diámetros y longitud del reactor de lecho fluidizado, debido a que se encuentran entre los parámetros de las ecuaciones de Walas (2010).

En la Figura 3.44 se muestra el diagrama de flujo que describe las etapas y suencia de etapas que comprende este trabajo de investigación.

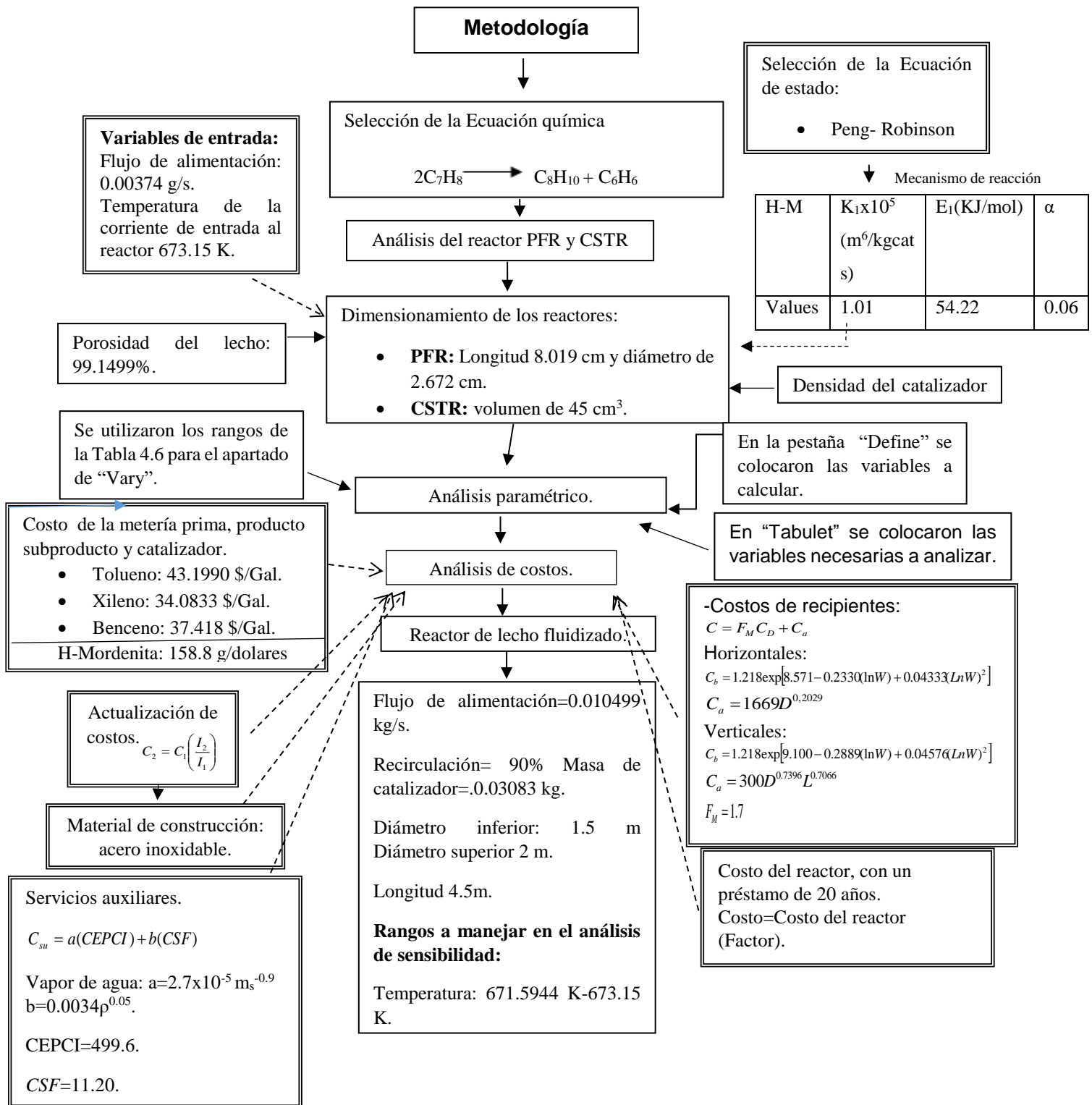


Figura 3.44 Diagrama de flujo de la metodología de trabajo.

---

## ***4. RESULTADOS.***

---

#### **4.1. Resultados de los Reactores de PFR y CSTR con respecto a la porosidad del lecho.**

Los resultados de la simulación con respecto a los reactores PFR y CSTR fueron las primeras aproximaciones para la obtención de las variables a introducir en el reactor de lecho fluidizado, con el fin de identificar si el proceso de TDP es rentable.

##### **4.1.1. Fracción conversión del Tolueno, rendimiento con respecto al producto deseado y costo del Tolueno.**

En la Figura 4.1 se observa que a mayor temperatura y a menor flujo másico, en un reactor PFR, las variaciones son significativas con respecto a la fracción conversión; tal es el caso de la fracción conversión, a una temperatura de 673.15K y un flujo másico de  $4 \times 10^{-6}$  kg/s, en donde se obtuvo una fracción conversión del 0.275. Esto se debe a que a menor flujo, mayor tiempo de contacto se tiene con el sistema y por lo tanto las fracciones conversión del Tolueno son altas, pero al mismo tiempo, la velocidad de reacción disminuye. Concluyendo así, que los datos de fracción conversión, se asemejan a los reportados por Waziri, et.,2010, el cual reporta una fracción conversión del 0.28. Al mismo tiempo se observa en la Figura 4.2, que a las mismas condiciones antes mencionadas se obtuvo un rendimiento del 0.14 con respecto al producto deseado (Xilenos).

En las Figuras 4.1 y 4.2 se obtuvo un gráfico lineal, con respecto a los costos, en donde a mayor flujo se generó mayor costo, como es el caso de la producción del Tolueno, a un flujo másico de  $6.1 \times 10^{-5}$  kg/s. y a una temperatura de 673.15K, se obtuvo un costo de \$25,000.00 anualmente, tomando en cuenta que el proceso se trabaja 24hrs. y 360días al año. Esto no afecta

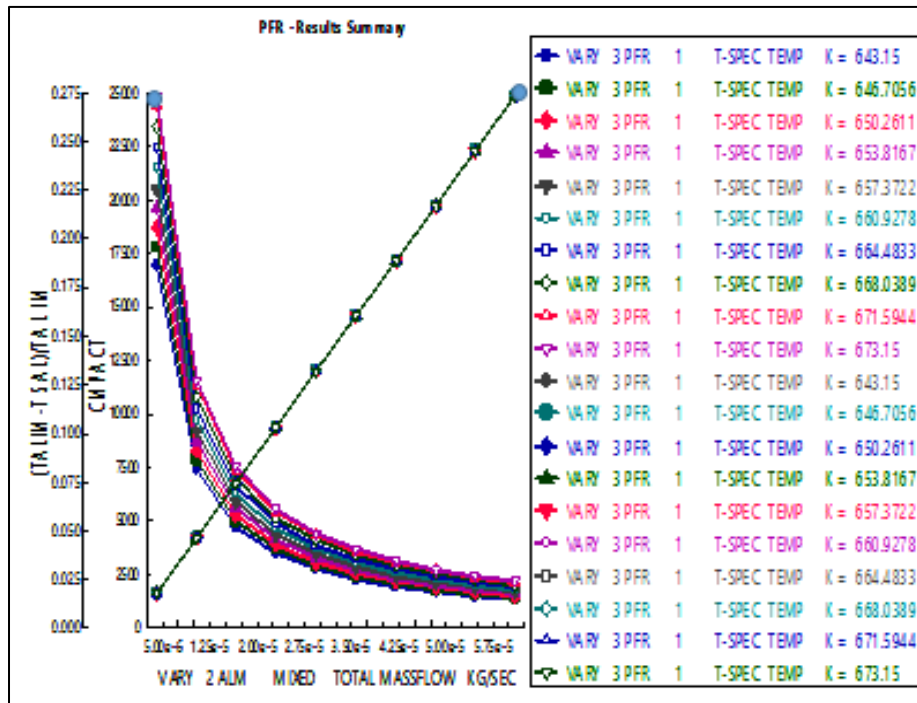


Figura 4.1 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor. PFR.

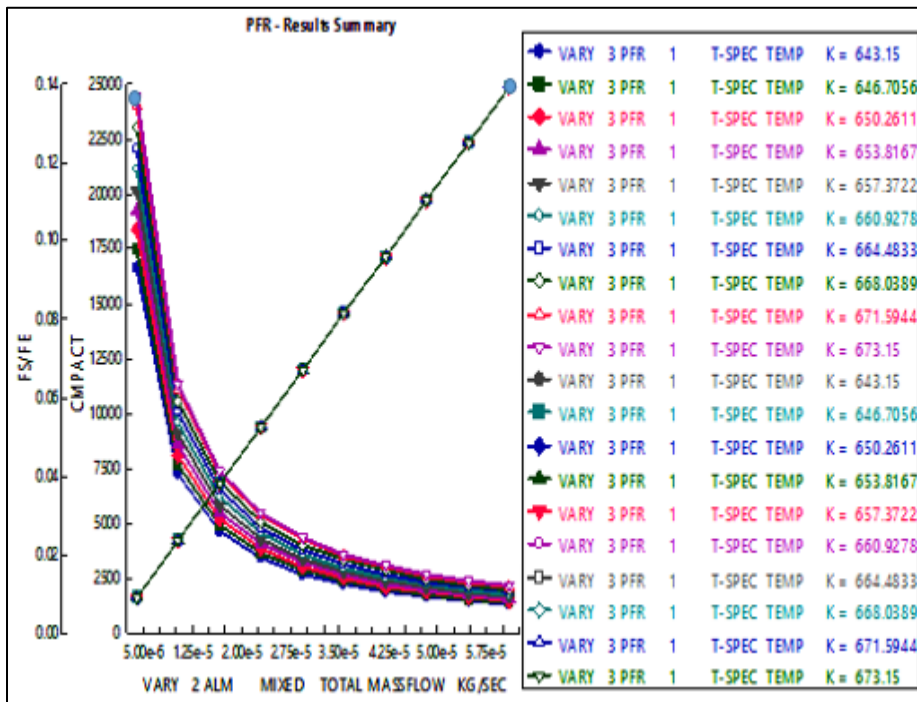


Figura 4.2 Relación entre el rendimiento del Xileno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

En las Figuras 4.3, se demuestra que la fracción conversión disminuyo en el reactor CSTR (Figura 4.3), a una temperatura de 673.15K y un flujo de  $4 \times 10^{-6}$  kg/s , debido a que en un reactor CSTR la mezcla es completa en todo el reactor y por lo tanto la solución se encuentra diluida, disminuyendo así la concentración, Con respecto al rendimiento (Figura 4.4) a la temperatura de 673.15K y a un flujo másico de  $4 \times 10^{-6}$  kg/s fue de 0.115.

En relación a los costos del Tolueno en el CSTR, se puedo observar en las Figuras 4.3 y 4.4 que el costo del Tolueno con un flujo de  $6.1 \times 10^{-5}$  kg/s fue de \$25,000.00 al igual que en el PFR debido a que entra la misma alimentación en los reactores.

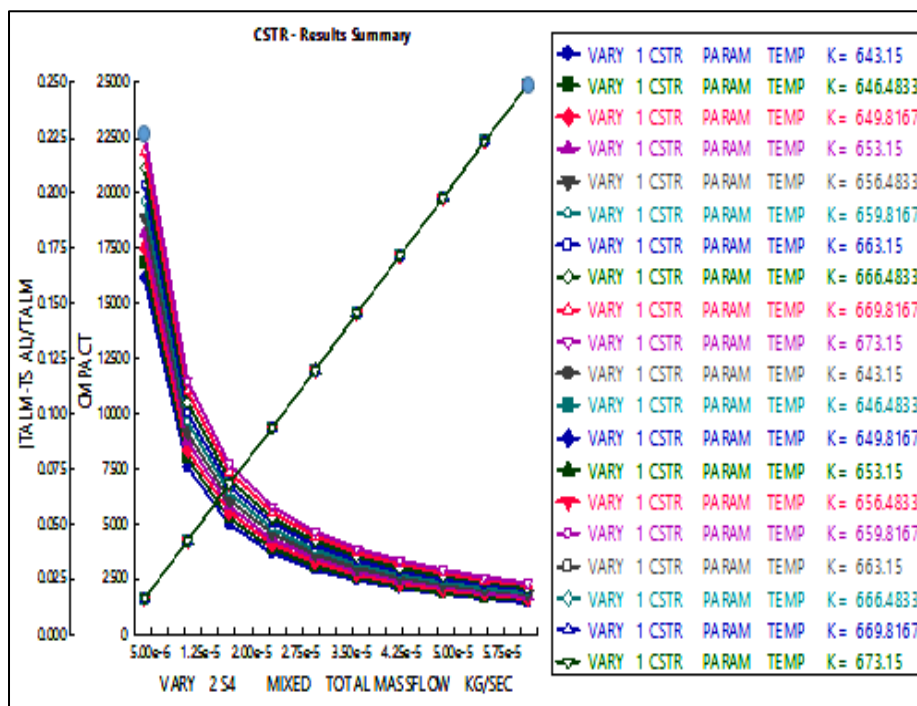


Figura 4.3 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.

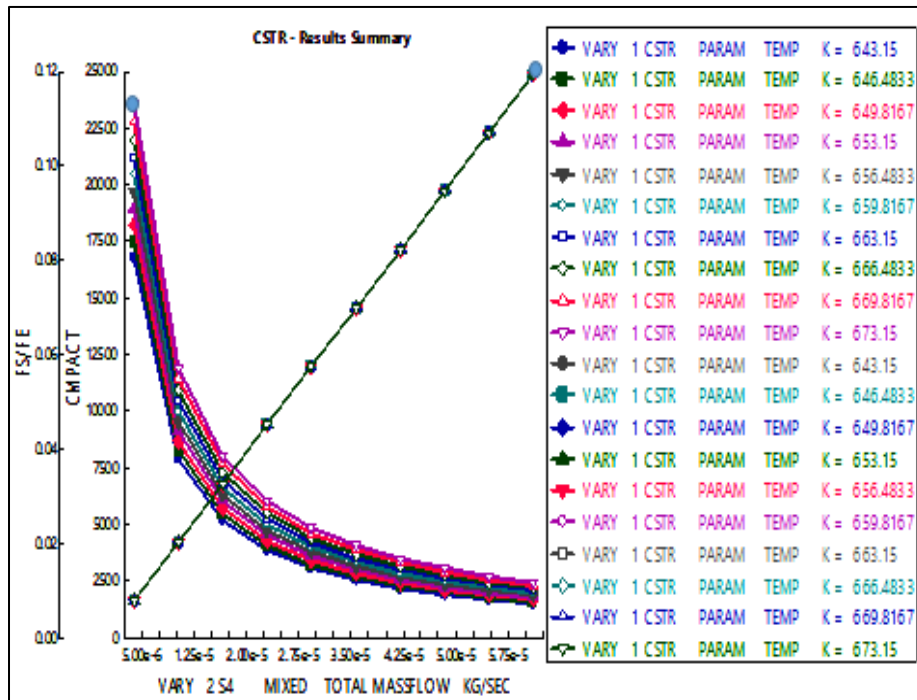


Figura 4.4 Relación entre el rendimiento del Tolueno y el costo, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.

#### 4.1.2. Fracción conversión del Tolueno, rendimiento y costo con respecto al Benceno.

Generando un análisis de costos a mayores flujos, se logra un costo más alto del Benceno, como se muestra en el reactor PFR, a un flujo másico de  $6.1 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ , el costo fue de \$218.00 anualmente, aunque a estas condiciones se obtuvo la menor fracción conversión del Tolueno, la cual fue de 0.039 (Figura 4.5). En el caso del rendimiento en el reactor PFR (Figura 4.6) a la temperatura de 673.15K y un flujo másico de  $4 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ , el rendimiento fue de 0.14.

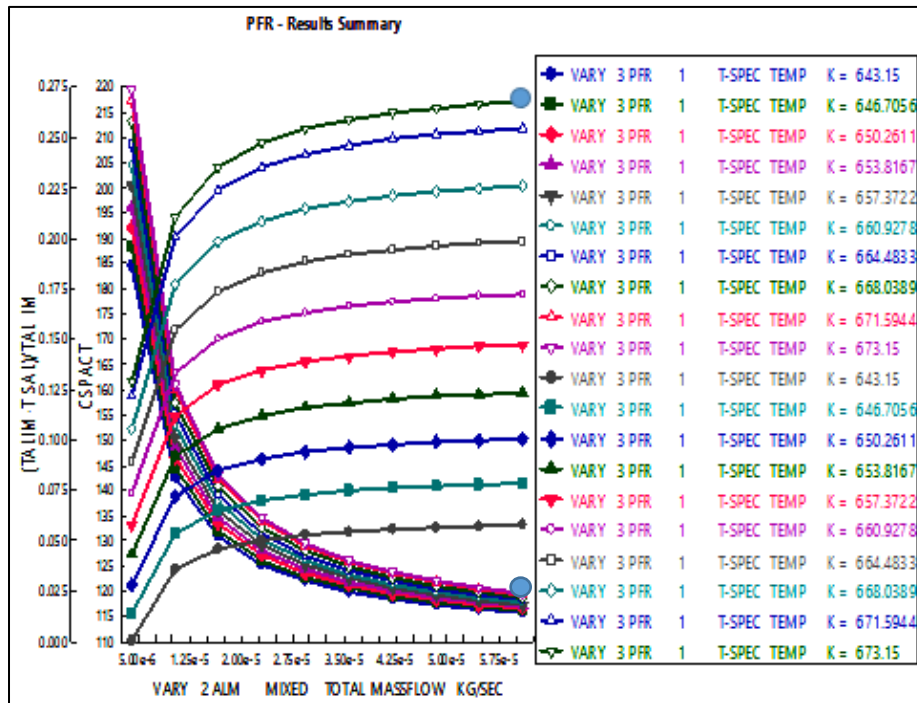


Figura 4.5 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

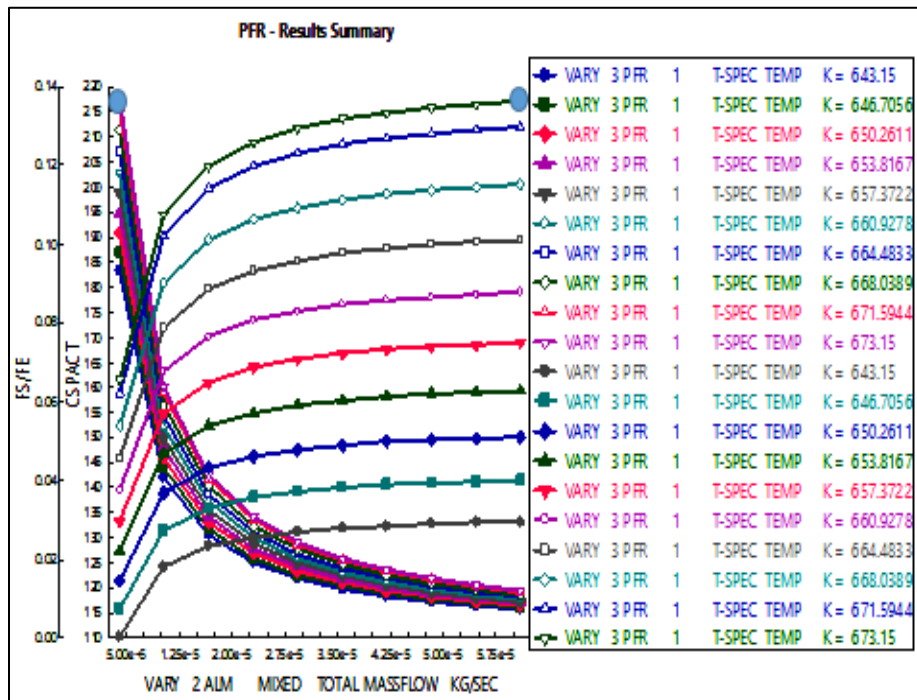


Figura 4.6 Relación entre el rendimiento del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

En el reactor CSTR se obtuvo menores ganancias que en el reactor PFR, (Figuras 4.7 y 4.8) en la producción de Benceno, como se observa en el flujo de  $6 \times 10^{-5} \text{kg/s}$  y temperatura de 673.15K, el costo tiende a ser de \$210.00 anualmente. Por lo tanto se demuestra que es más conveniente usar un reactor PFR en el proceso de TDP, en comparación con el reactor CSTR.

Así mismo se observa que con base al rendimiento, con respecto al Benceno (Figura 4.8), a un flujo de  $4 \times 10^{-6} \text{kg/s}$  y una temperatura de 673.15K el rendimiento fue de 0.114.

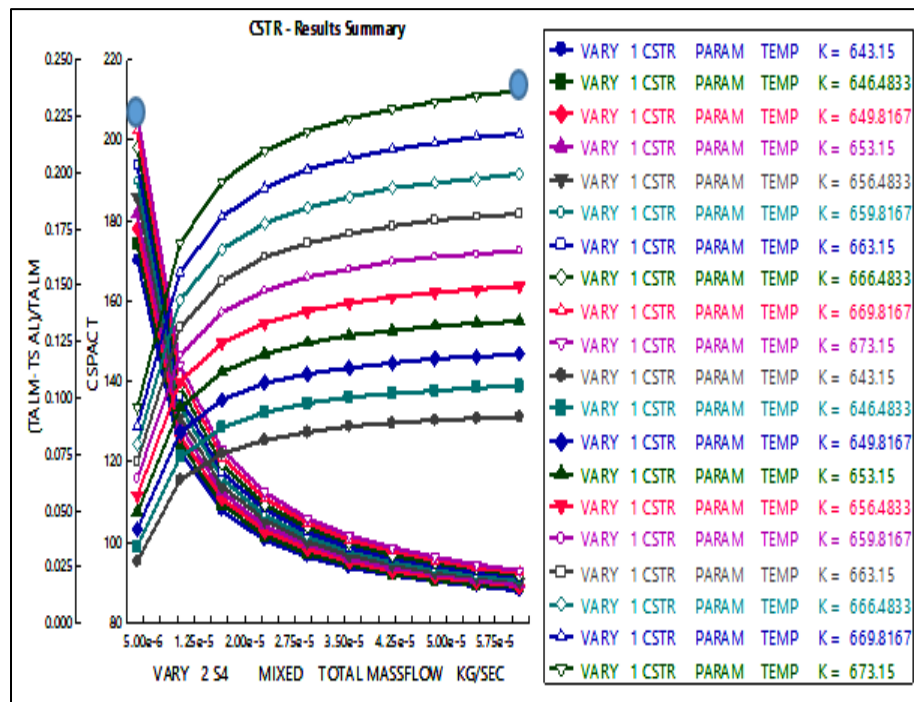


Figura 4.7 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.

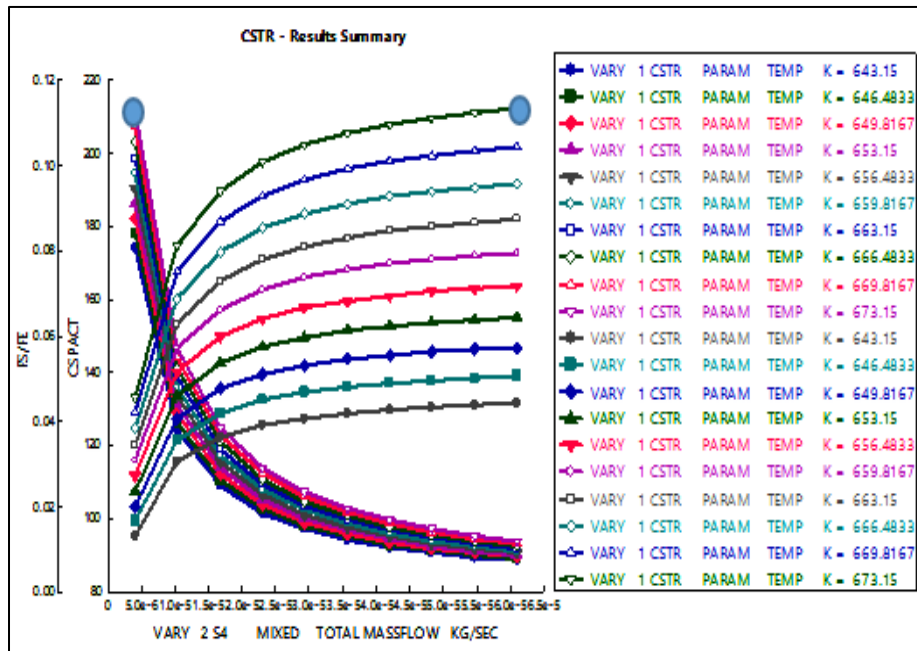


Figura 4.8 Relación entre el rendimiento del Tolueno y el costo del Benceno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.

#### 4.1.3. Fracción conversión del Tolueno, rendimiento y costo con respecto al Xileno.

En relación al Xileno (producto principal) en un reactor PFR, se obtuvo las mayores ganancias de Xileno, a mayores flujos y temperaturas altas, como se observa en el flujo de  $6.2 \times 10^{-3} \text{kg/s}$  y la temperatura de 673.15K, en donde el costo de venta fue de \$270.00 anualmente (Figura 4.9), a pesar de que a estas condiciones es menor la fracción conversión del Tolueno. En el caso del flujo en donde se obtuvo la mayor fracción conversión de Tolueno ( $4 \times 10^{-6} \text{kg/s}$ ) el costo fue de \$138.00 (Figura 4.9).

El rendimiento del producto deseado, a las condiciones de  $4 \times 10^{-6} \text{kg/s}$  y 673.15K, fue de 0.14 (Figura 4.10).

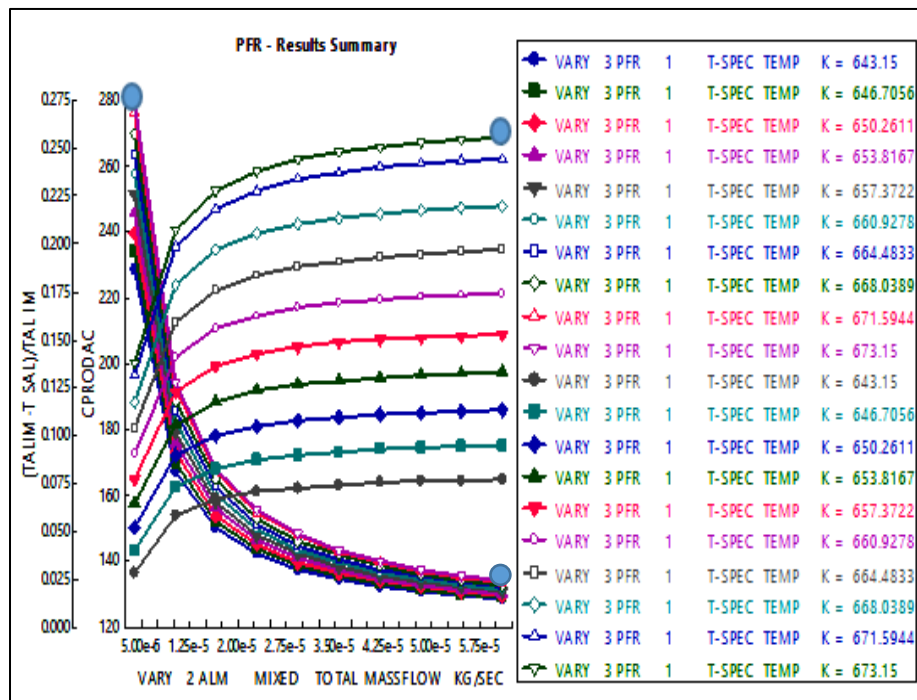


Figura 4.9 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

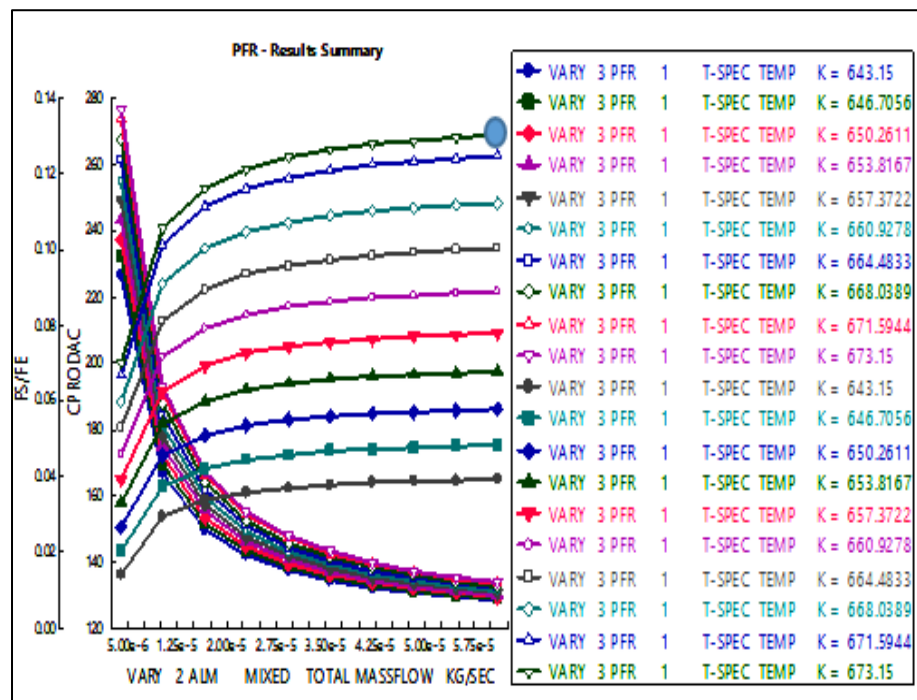


Figura 4.10 Relación entre el rendimiento y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

En el análisis del producto deseado (Xileno) en un reactor CSTR a un flujo de  $6.1 \times 10^{-5}$  kg/s y 673.15K el costo fue de \$265.00 (Figuras 4.11 y 4.12). Con respecto al rendimiento del Xileno, en un flujo de  $4 \times 10^{-6}$  kg/s se obtuvo un rendimiento del 0.114 (Figura 4.12). Comparando los resultados de los reactores CSTR y PFR, el PFR demuestra ser más eficiente que el reactor CSTR, debido a que las ganancias son mayores con respecto al producto deseado.

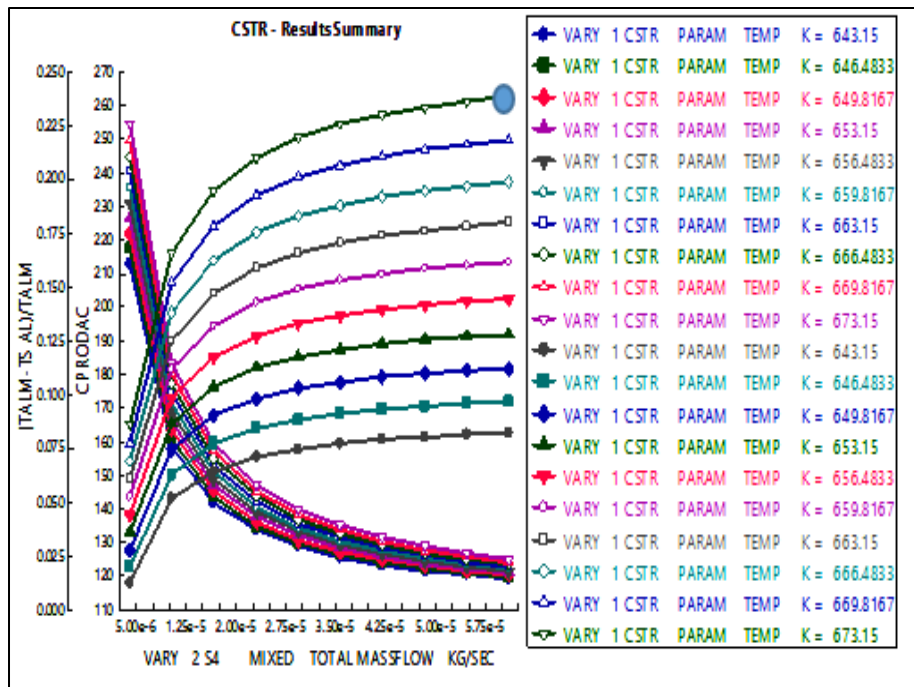


Figura 4.11 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.

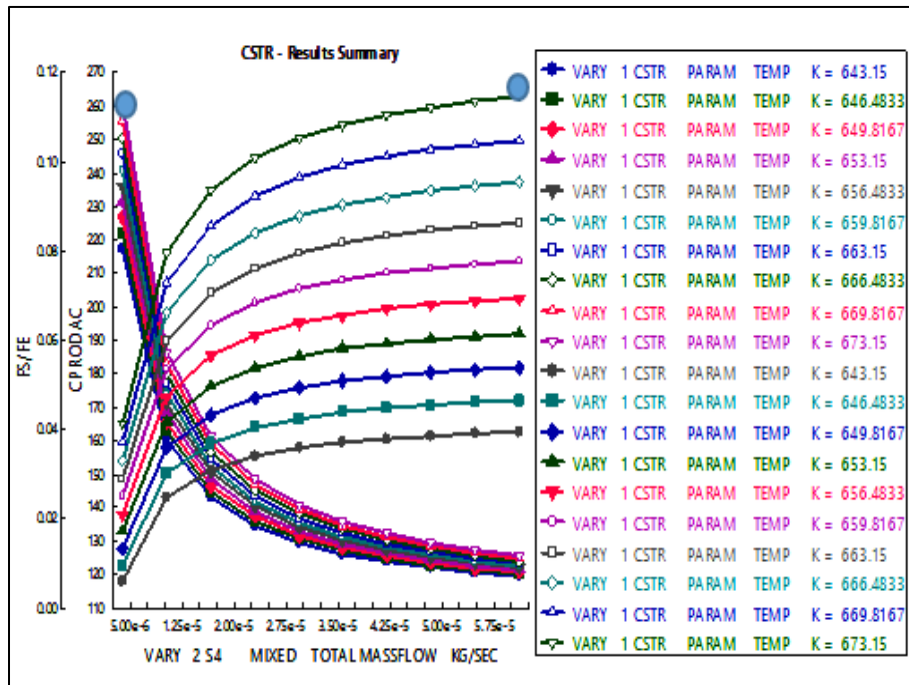


Figura 4.12 Relación entre el rendimiento y el costo del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor CSTR.

#### 4.1.4 Efecto del catalizador en la fracción conversión y el rendimiento, y el costo del mismo.

Como se observa en las Figuras 4.13 y 4.14 respectivamente, el uso del catalizador en un reactor PFR genera cambios significativo en la fracción conversión y en el rendimiento. Por ejemplo en la Figura 4.13, en donde a un flujo de  $4 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$  y una temperatura de 673.15K la fracción conversión fue de 0.36, comparando este resultado con los análisis anteriores, en donde no se tomaba en cuenta el uso del catalizador, la fracción conversión era de 0.275. Con respecto al costo del catalizador se observa que, no varía con respecto al flujo, si no que se mantiene contante en un precio de \$138.00 anuales, esto puede ser variable debido a que existe diferentes motivos para que el catalizador pueda ser cambiado por lo menos dos veces al año, algunos son: por envejecimiento, contaminación y coquización. La Figura 4.14 reporta los datos con respecto al rendimiento, en donde a un flujo de  $4 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$  y a una temperatura de 673.15 K, el rendimiento aumento a 0.18.

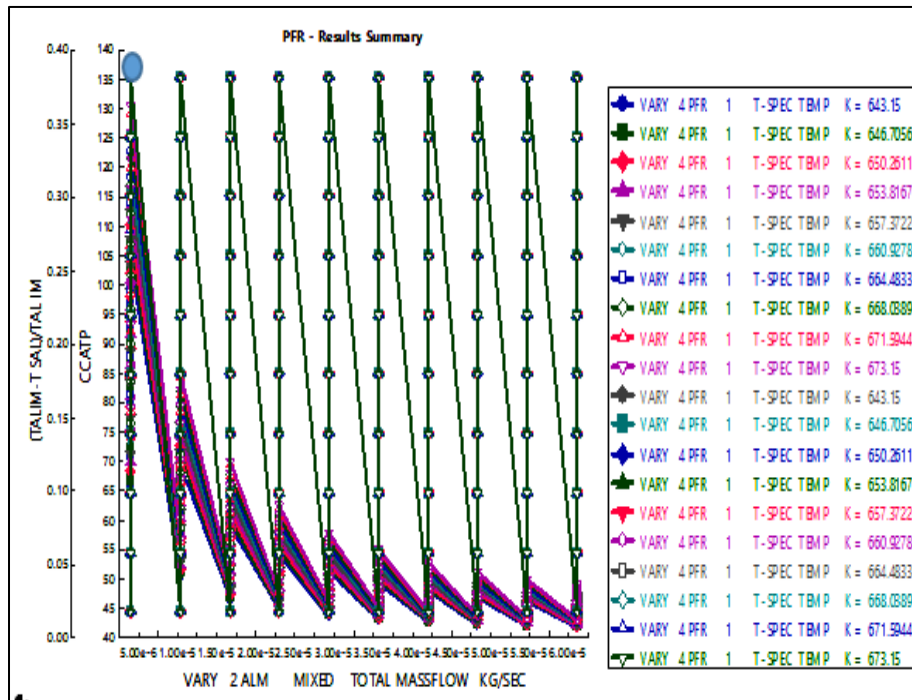


Figura 4.13 Relación entre la fracción conversión del Tolueno y el costo del catalizador, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

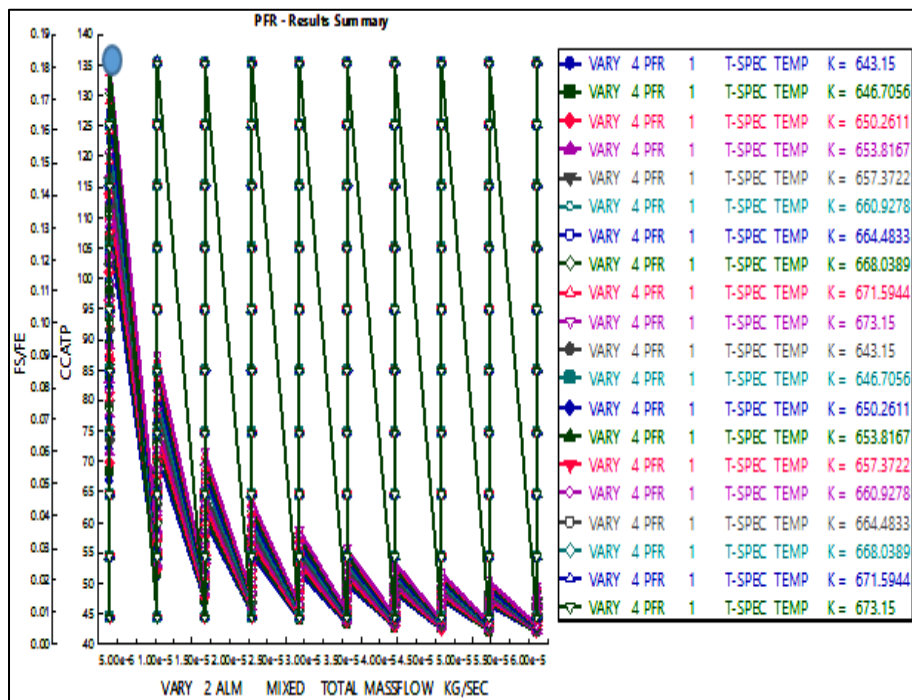


Figura 4.14 Relación entre el rendimiento del Xileno y el costo del catalizador, con la temperatura y el flujo, en un reactor PFR.

El dimensionamiento de un reactor CSTR no permite el uso de un catalizador, es por eso que no se generó el análisis.

#### 4.1.5. Densidad del lecho.

En la generación del análisis de sensibilidad con respecto a la densidad del lecho, se demuestró que la densidad del lecho no es una variable que afecte la fracción de conversión, como se observa en la Figura 4.15 en el reactor PFR, en donde a la temperatura de 673.15K la fracción de conversión fue de 0.275, en el rango de densidad de 2.12 a 2.15g/m<sup>3</sup>; al igual ocurre en el rendimiento Figura 4.16. Este análisis se generó únicamente en el reactor PFR, debido a que AP8.4., no cuenta con la opción para este análisis.

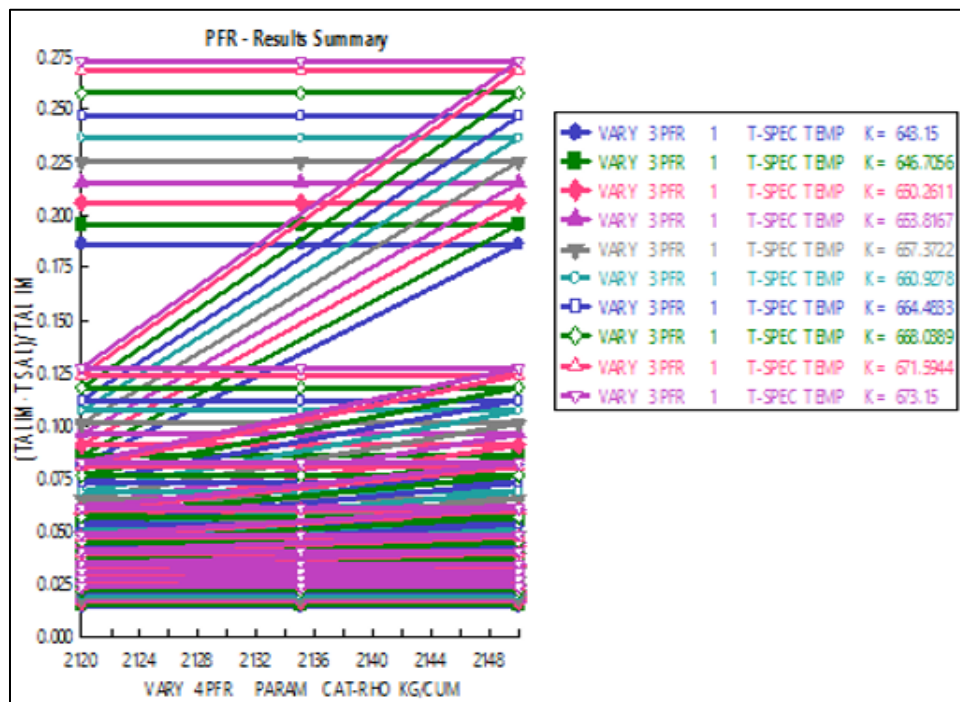


Figura 4.15 Relación entre la fracción de conversión, con la densidad del catalizador y la temperatura en un reactor PFR.

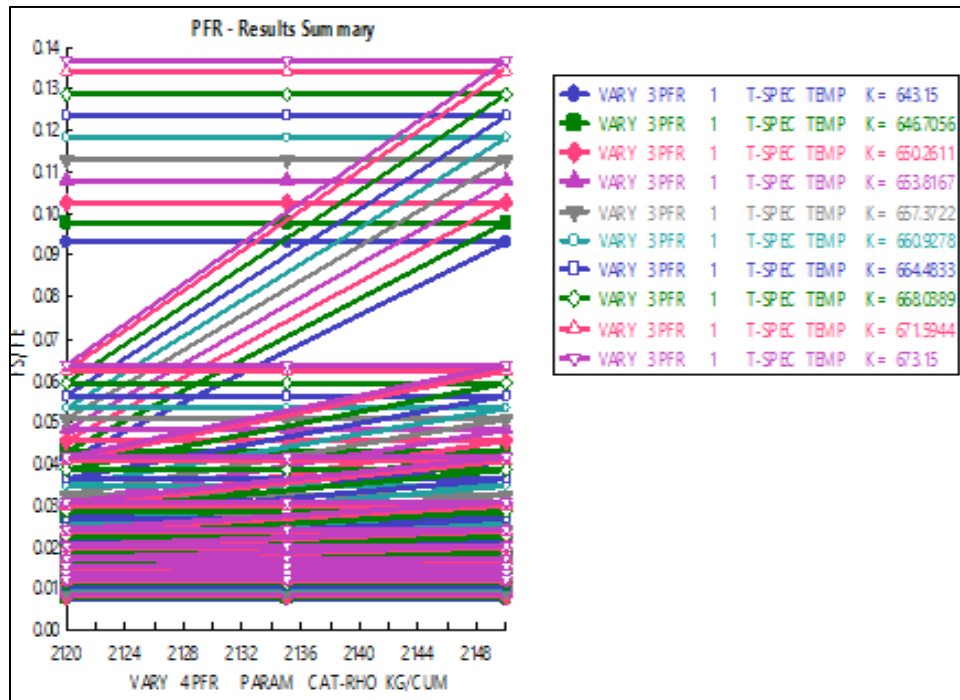


Figura 4.16 Relación entre la rentabilidad, con la densidad del catalizador y la temperatura en un reactor PFR.

#### 4.1.6. Dimensionamiento de los reactores CSTR y PFR.

El dimensionamiento de los reactores es un punto muy importante, debido que dependiendo de las dimensiones del reactor, el tiempo de retención hidráulica varía, y así mismo aumenta la fracción de conversión, aunque en estas simulaciones no se observó lo anterior, debido que las únicas variables que aumentan la fracción de conversión son el flujo másico de alimentación y la temperatura. Observemos los siguientes ejemplos:

- 1) En el reactor PFR se varió la longitud del reactor de 0.04 a 0.08 metros, y como se observa en las Figuras 4.17 y 4.18 respectivamente, la variable de longitud no genera cambios de fracción de conversión ni de rendimiento, lo que genera estos cambios es la temperatura.
- 2) También se generó un análisis de sensibilidad en el reactor PFR con respecto al diámetro del reactor, con un rango de 0.01 y 0.1m, en donde se denota en las Figuras 4.19 y 4.20 respectivamente, que no existen cambios significativos en la fracción

conversión o en el rendimiento, y se sigue observando que, la temperatura en estos gráficos, es la única variable que afecta la fracción conversión y el rendimiento.

- 3) Igualmente se generaron los mismos análisis para el reactor CSTR con base a un rango de 0.05-0.65m de longitud y 0.05-0.65m de diámetro, (estos rangos se generaron con el volumen, debido a que AP8.4 para un reactor CSTR no cuenta con la opción de variación de longitud y diámetro) observando así que la longitud no genera cambios significativos en la fracción conversión o en el rendimiento, como podemos se observa en las Figuras 4.21, 4.22, 4.23 y 4.24, respectivamente.
- 4) Por último se generaron los análisis de sensibilidad para el volumen en los reactores CSTR y PFR, pero de igual forma no generan cambios significativos en la fracción conversión. (Figura 4.25 y Figura 4.26).

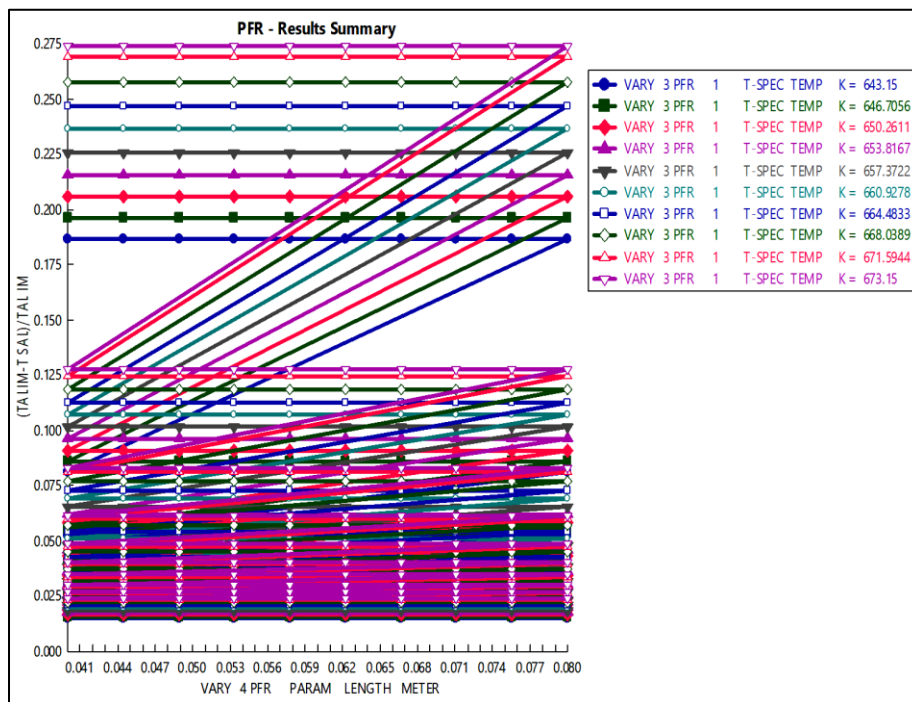


Figura 4.17 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y la longitud del reactor PFR.

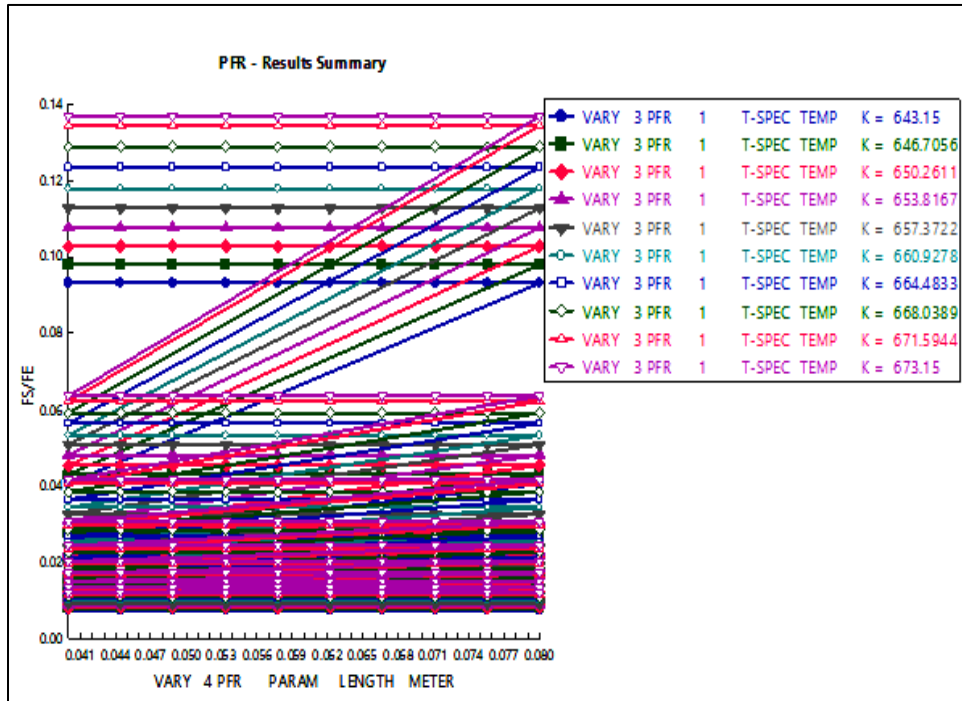


Figura 4.18 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y la longitud del reactor PFR.

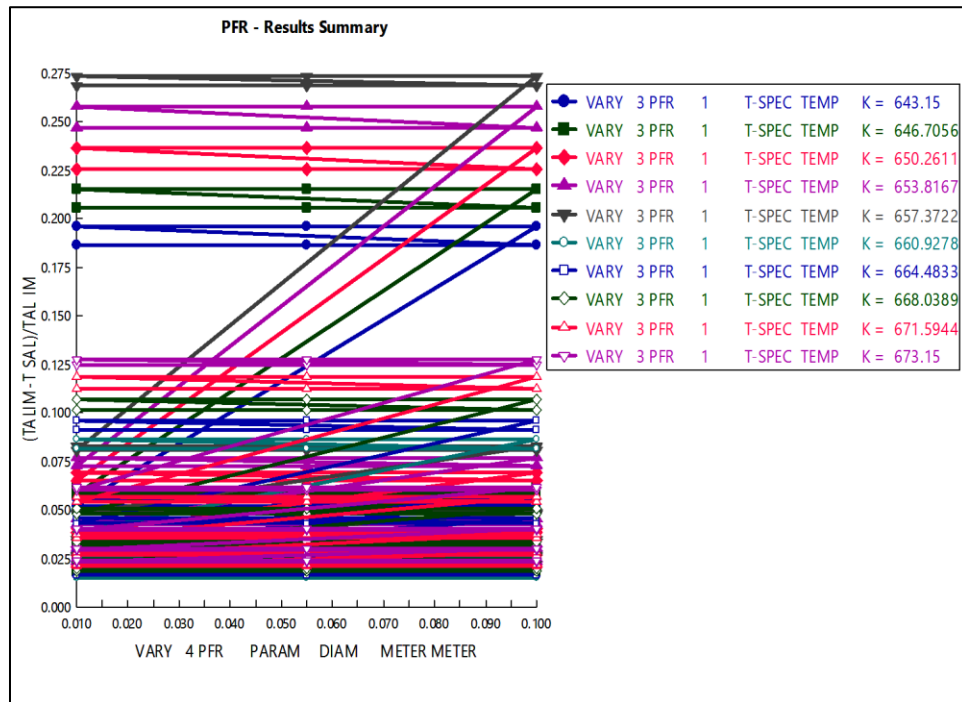


Figura 4.19 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el diámetro del reactor PFR.

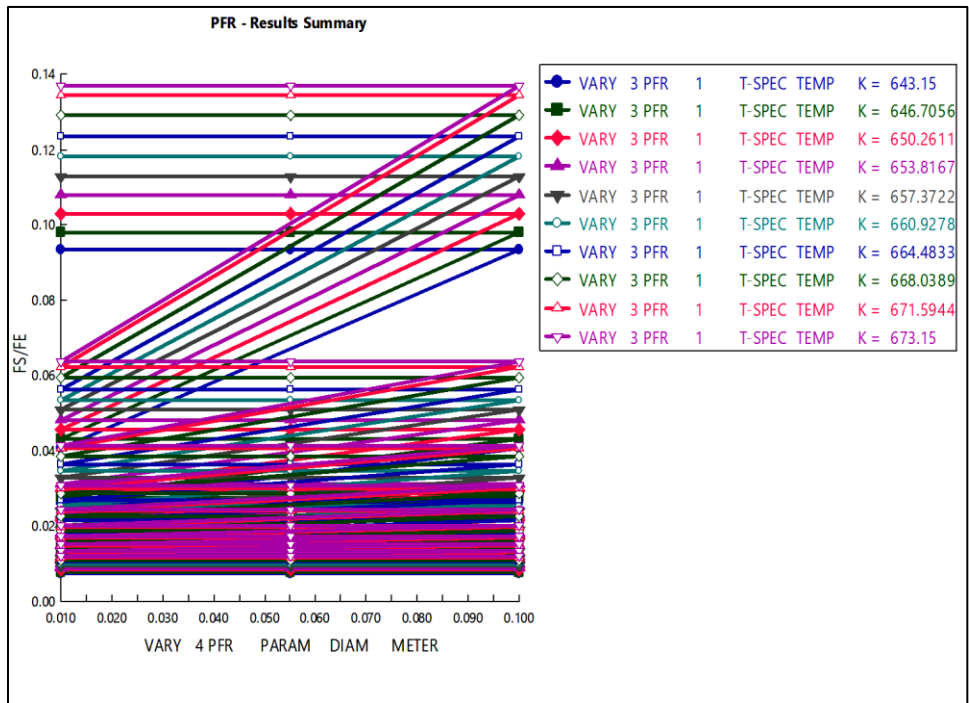


Figura 4.20 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y el diámetro longitud del reactor PFR.

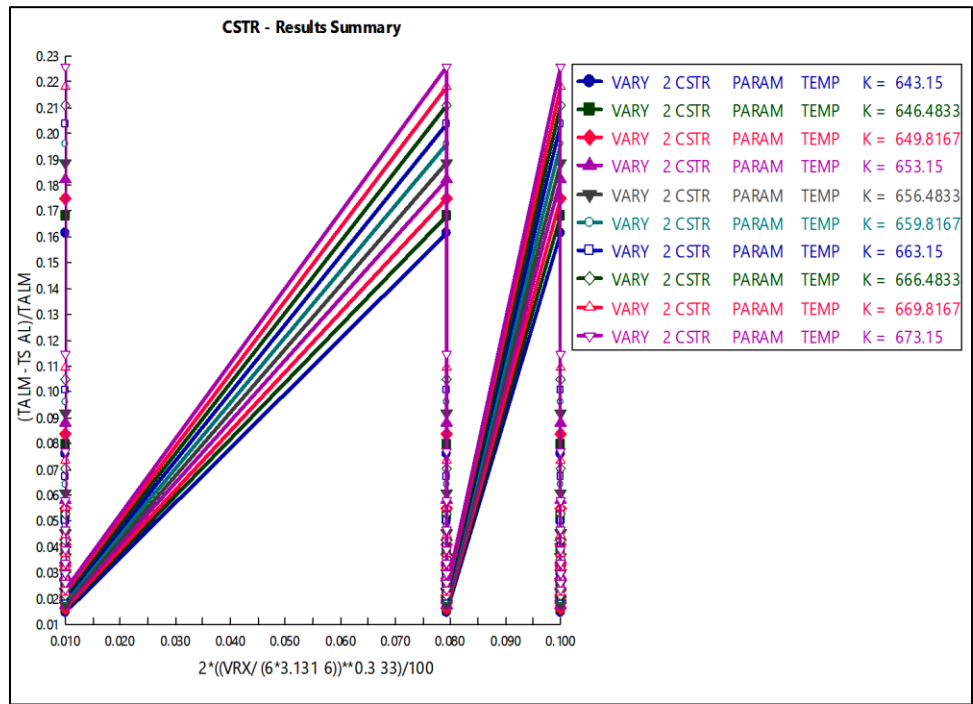


Figura 4.21 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el diámetro del reactor CSTR.

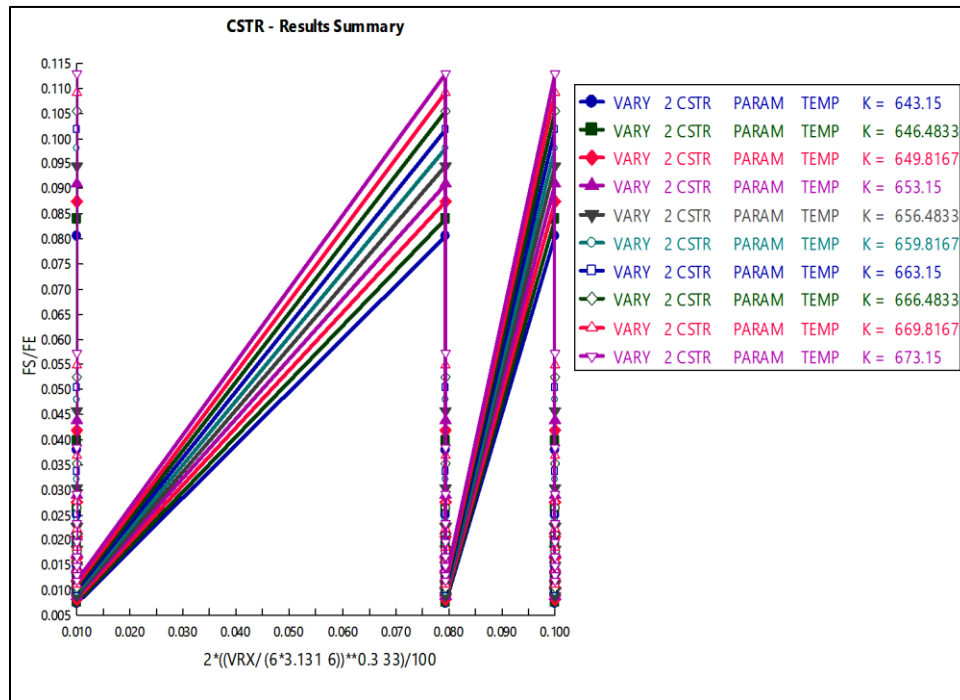


Figura 4.22 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y el diámetro del reactor CSTR.

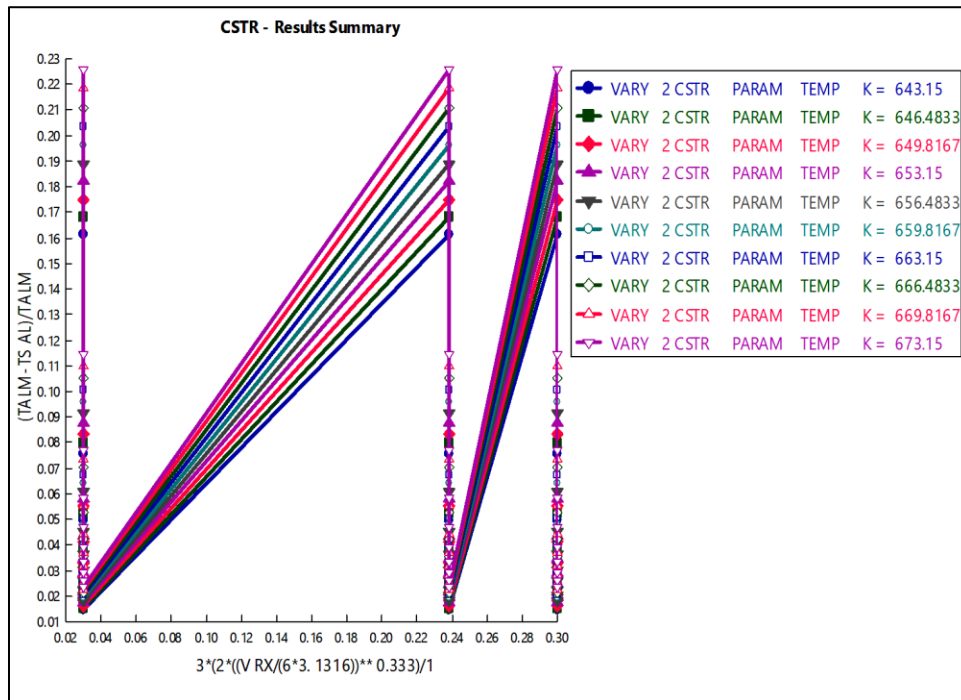


Figura 4.23 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y la longitud del reactor CSTR.

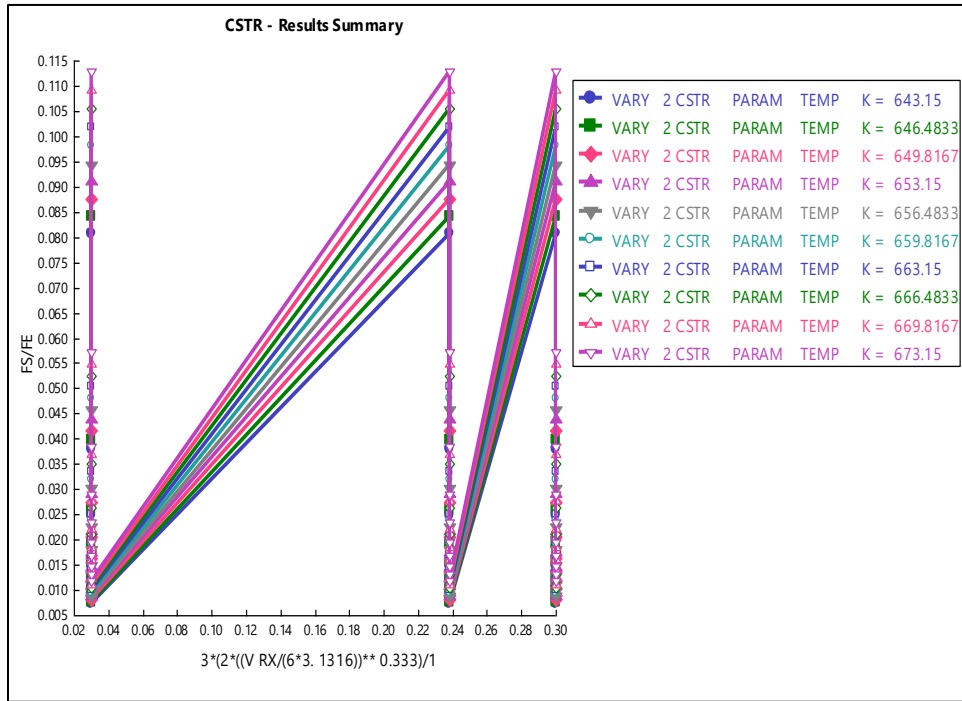


Figura 4.24 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y la longitud del reactor CSTR.

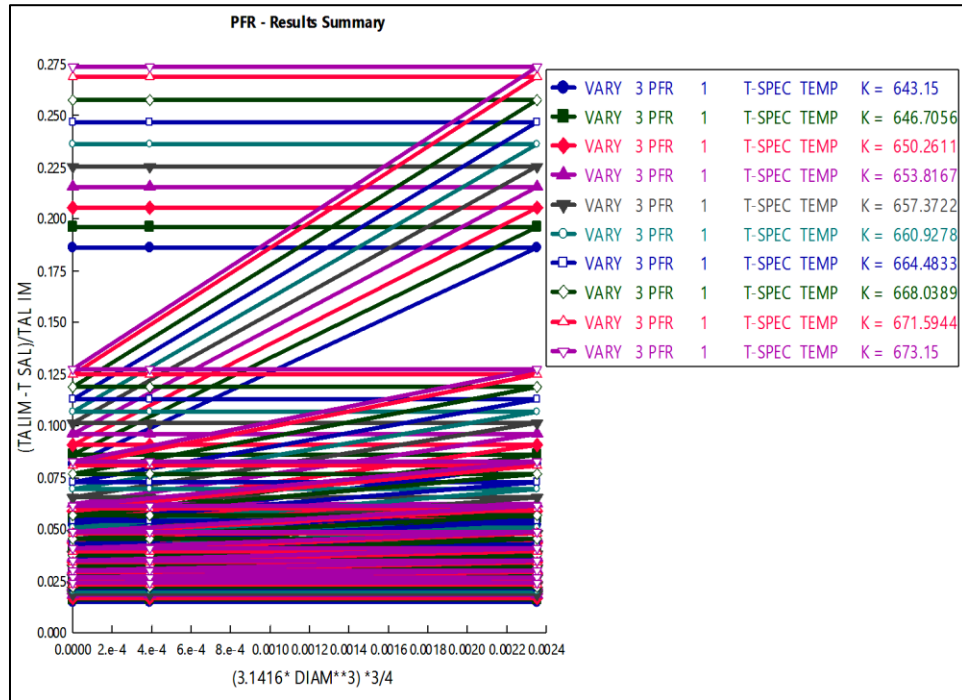


Figura 4.25 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el volumen del reactor PFR.

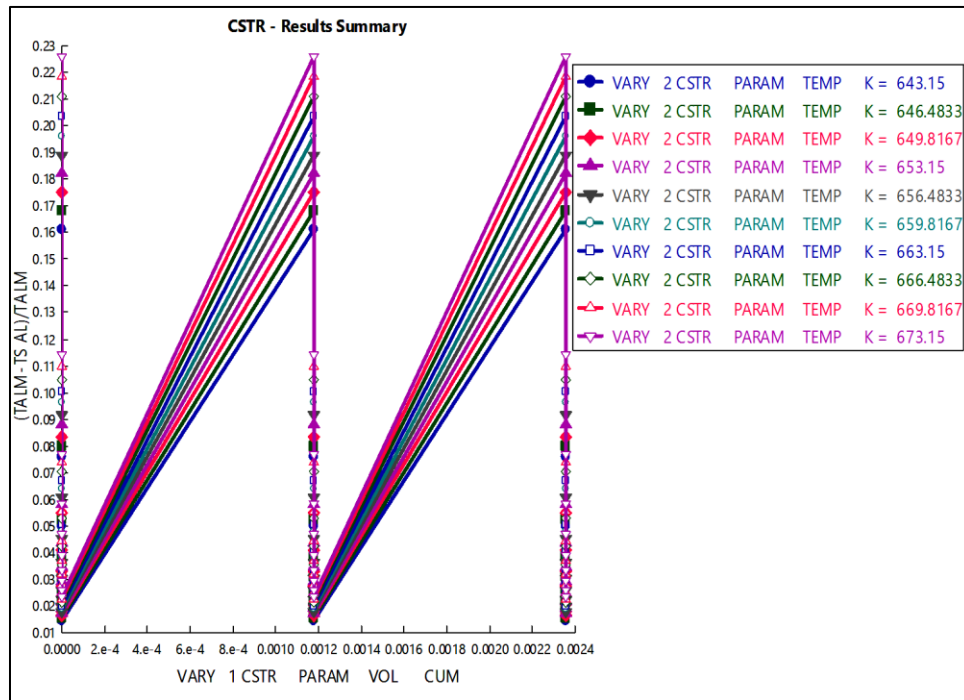


Figura 4.26 Relación entre la fracción conversión del Tolueno, con la temperatura y el volumen del reactor CSTR.

#### 4.1.7. Costo de los reactores PFR y CSTR.

Con base a los costos del reactor CSTR y PFR, se generaron gráficos con respecto a la producción del producto deseado anualmente, y el costo del reactor, con el fin de identificar si es rentable el primer año de producción. Para el reactor PFR se observa en la Figura 4.27, que el costo del reactor fue de \$315,000.00, con respecto a las condiciones mínimas antes mencionadas por Walas, 2010. Debido a que el costo del reactor está por arriba del costo de producción anual (\$270.00), el proceso es rentable, a estas condiciones.

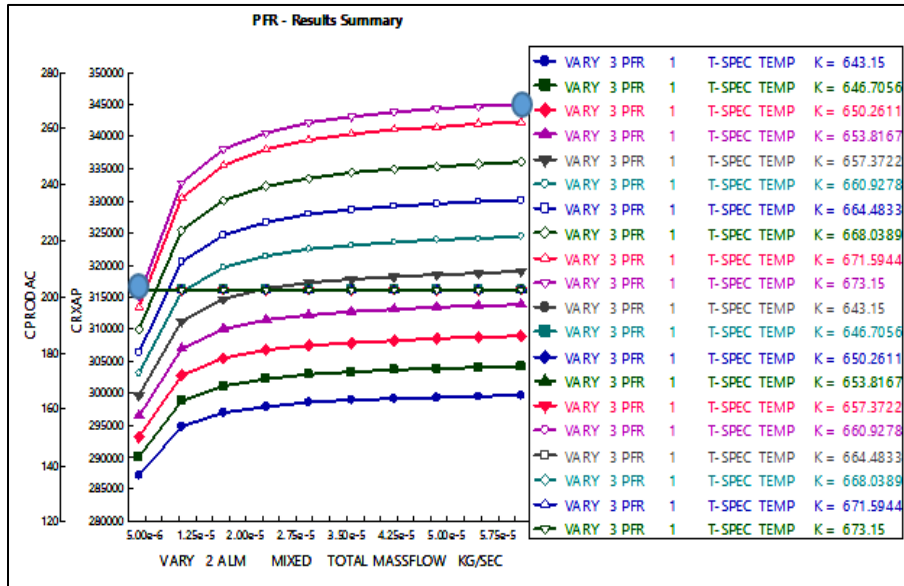


Figura 4.27 Relación entre el precio del reactor, el costo del producto, con la temperatura y el flujo másico de alimentación, en un reactor PFR.

Lo mismo ocurre en el reactor CSTR (Figura 4.28), debido a que generamos poco Xileno y no se llega a tener un costo de producción alto para recuperar la inversión del costo del reactor de manera instantánea, el proceso no es rentable a estas condiciones; estos casos suelen suceder a nivel laboratorio. En la figura 4.28 se observa que el costo del reactor fue de \$881,455.00.

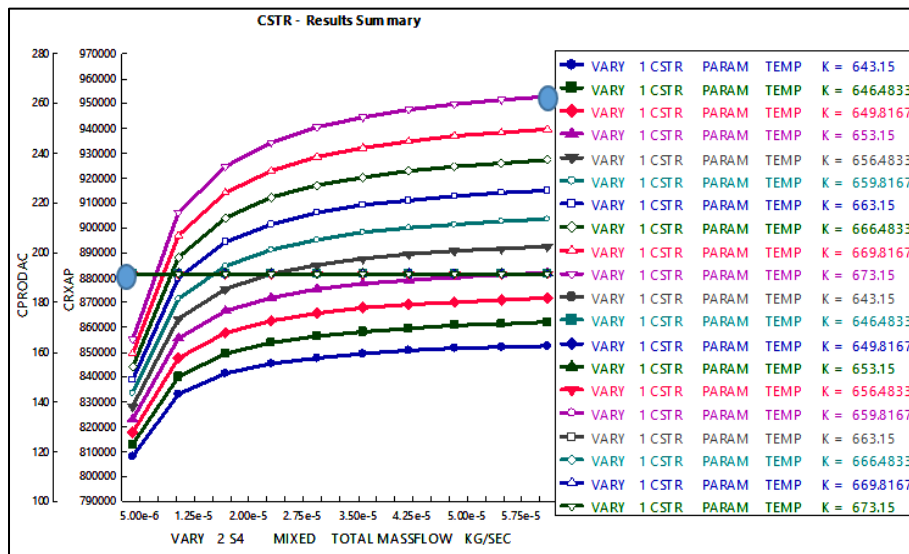


Figura 4.28 Relación entre el precio del reactor, el costo del producto, con la temperatura y el flujo másico de alimentación, en un reactor CSTR.

#### 4.1.8. Costo energético.

Debido a que la reacción es ligeramente exotérmica (Menard) (Kelly, et al., 2004)(Figura 4.29), no se consideró el costo del agua de enfriamiento, siendo el vapor del agua el único servicio auxiliar en el proceso.

Para generar el costo energético en el reactor PFR, se generó un arreglo, para determinar el costo a partir de la temperatura de burbuja, al rango de temperaturas de 643.15 a 673.15K, notando así que a flujos de  $4 \times 10^{-6}$  kg/s y a una temperatura de 643.15K se obtuvo un costo energético de \$12,100.00 y para flujos mayores tal es el caso de  $6.1 \times 10^{-5}$  kg/s y a una temperatura de 673.15K se obtuvo un costo energético de \$6,500.00. Figura 4.30. Este arreglo no afecta los demás análisis debido a que es solo para determinar el costo a través de las distintas temperaturas en las cual interactúa el reactor PFR.

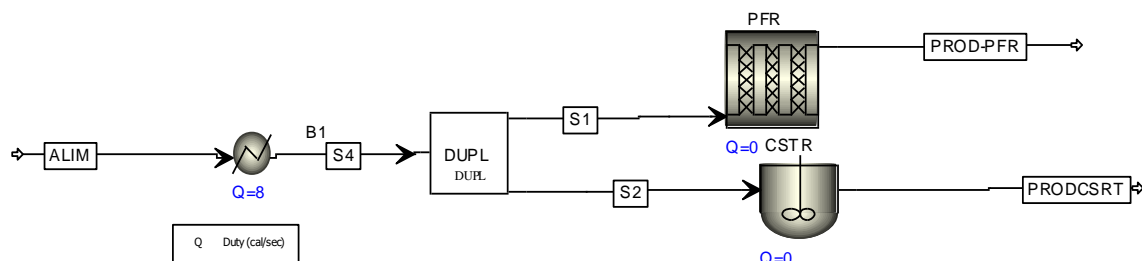


Figura 4. 29. Calor de reacción en los reactores CSTR y PFR.

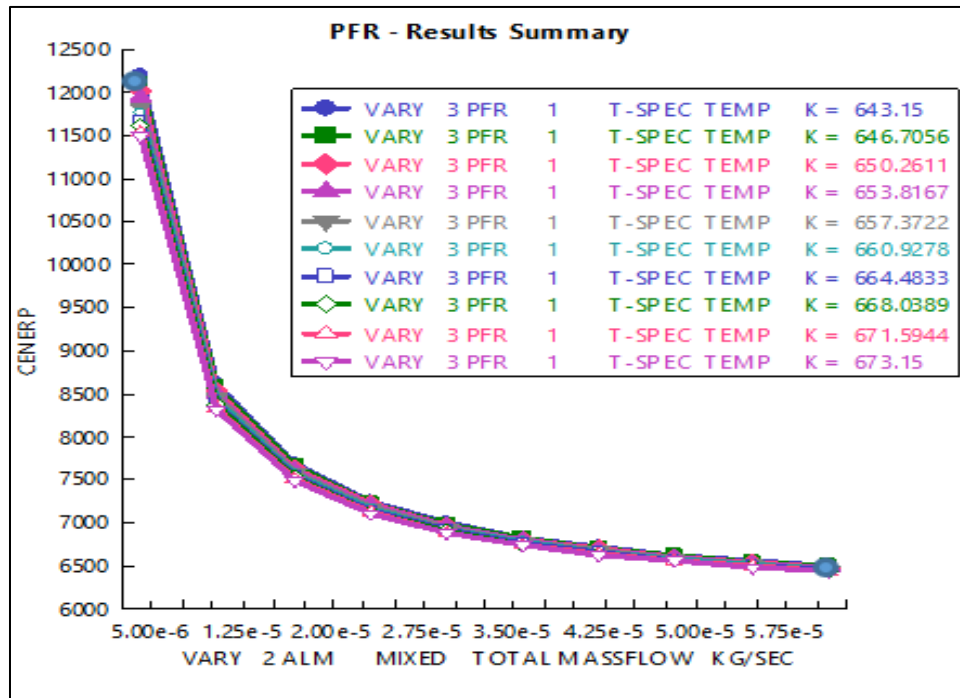


Figura 4.30 Costo energético, con respecto al flujo y a la temperatura.

En el reactor CSTR (Figura 4.31), debido a que no se consiguió generar el mismo arreglo que en el reactor PFR, se generó una aproximación de los costos a las mismas condiciones que en el reactor PFR, 673.115K y a un flujo de  $4 \times 10^{-4}$  kg/s, en donde el costo fue de \$11,500.00 anualmente y a la misma temperatura con un flujo de  $6 \times 10^{-5}$  kg/s se obtuvo un costo de \$6,450.00. Como se observa los costos energéticos son muy parecidos a los del reactor PFR. Por consiguiente, a pesar de que los costos sean muy parecidos es recomendable generar una toma de decisiones con respecto al reactor PFR, debido a que nos genera resultados más precisos.

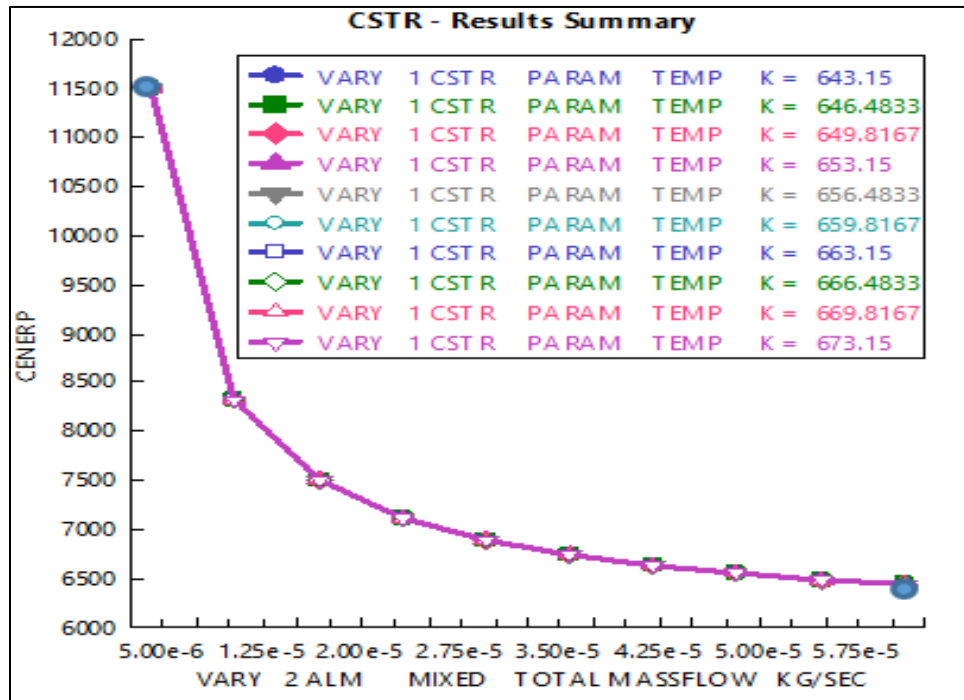


Figura 4.31 Costo energético, con respecto al flujo y a la temperatura.

#### 4.1.9. Costo y utilidad bruta.

Se demostró con los análisis anteriores que la utilización de flujos pequeños a altas temperaturas, hace que el proceso a esas condiciones no sea rentable, a pesar de que el reactor será pagado a 20 años y con un interés del 5%, se obtuvo aun así costos sumamente altos, como se observa en la Figura 4.32, esto se debe a los costos de los servicios auxiliares.

En el reactor PFR, con un flujo de  $4 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$  y a una temperatura de 643.15K se obtuvo costos anuales altos de hasta \$37,465.00 , generando así a estas condiciones una utilidad bruta negativa \$-37,329.00, en el cual el signo negativo indica que se obtuvieron pérdidas (Figura 4.33). Con un flujo de  $6 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$  y a una temperatura de 673.15 K se obtuvo un costo de \$31,800.00 y una utilidad bruta de \$-31,531.00, demostrando con esto que a flujos másicos mayores, disminuimos el costo de operación.

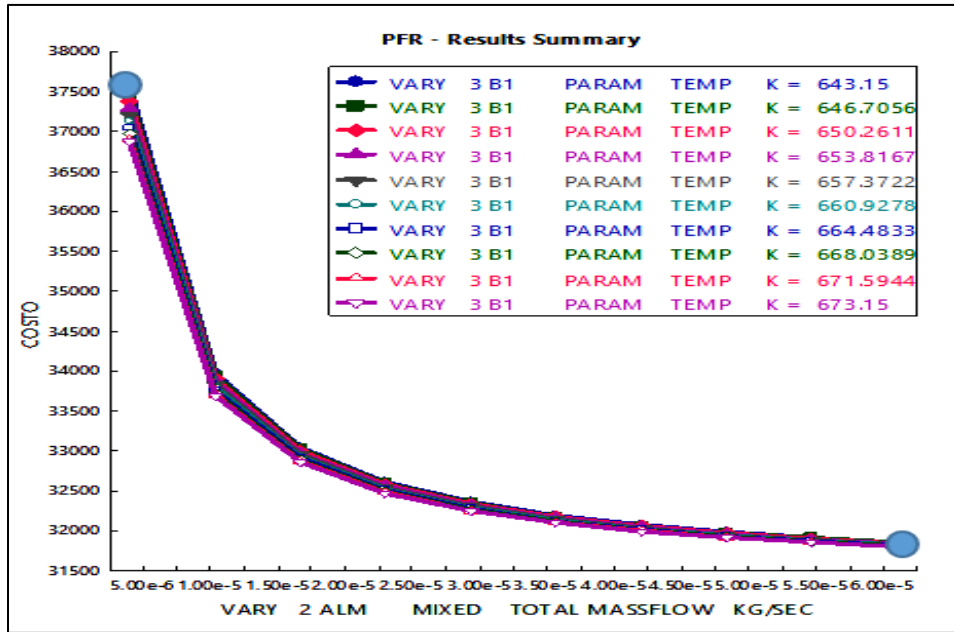


Figura 4.32 Relación entre el costo, con el flujo y la temperatura en un reactor PFR.

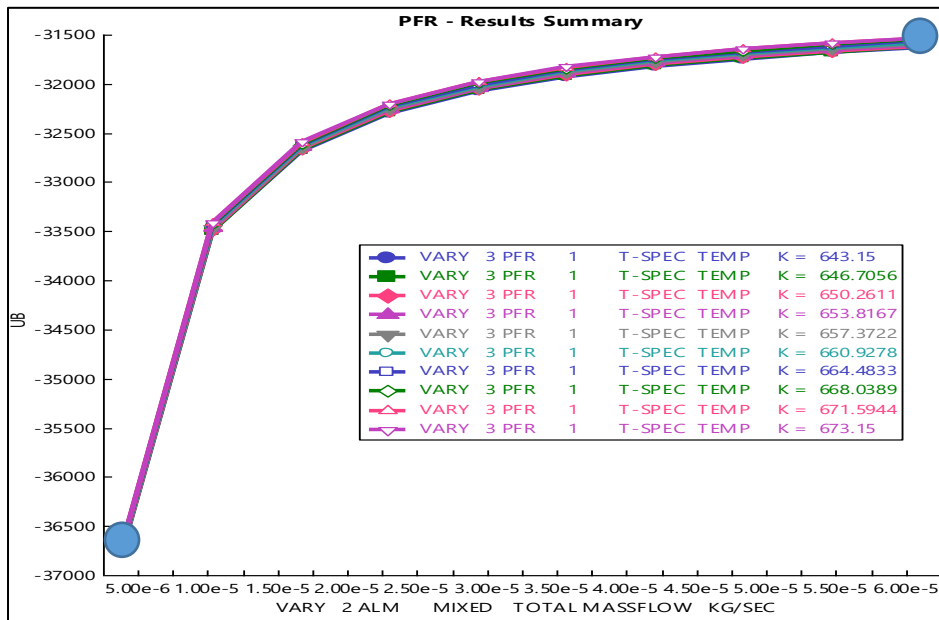


Figura 4.33 Relación entre la rentabilidad, con el flujo y la temperatura en un reactor PFR.

Al igual ocurre en un reactor CSTR, no se generaron utilidades brutas y solo se generaron costos, como se puede observar en las Figuras 4.34 y 4.35 respectivamente, por ejemplo a una temperatura de 673.15K y un flujo másico de  $4 \times 10^{-6}$  kg/s la utilidad bruta fue de \$-81913.00 (Figura 4.35), por lo tanto a estas condiciones el proceso no es rentable. Por

consecuente se demuestra, que la mejor alternativa para obtener ganancias, son flujos altos a una temperatura de 673.15K.

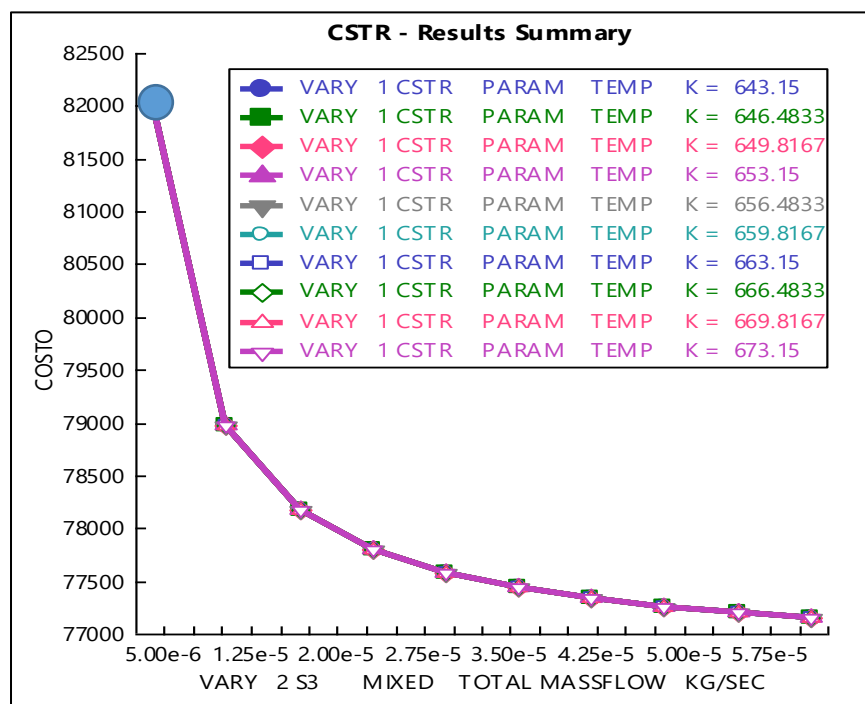


Figura 4.34 Relación entre el costo, con el flujo y la temperatura en un reactor CSTR.

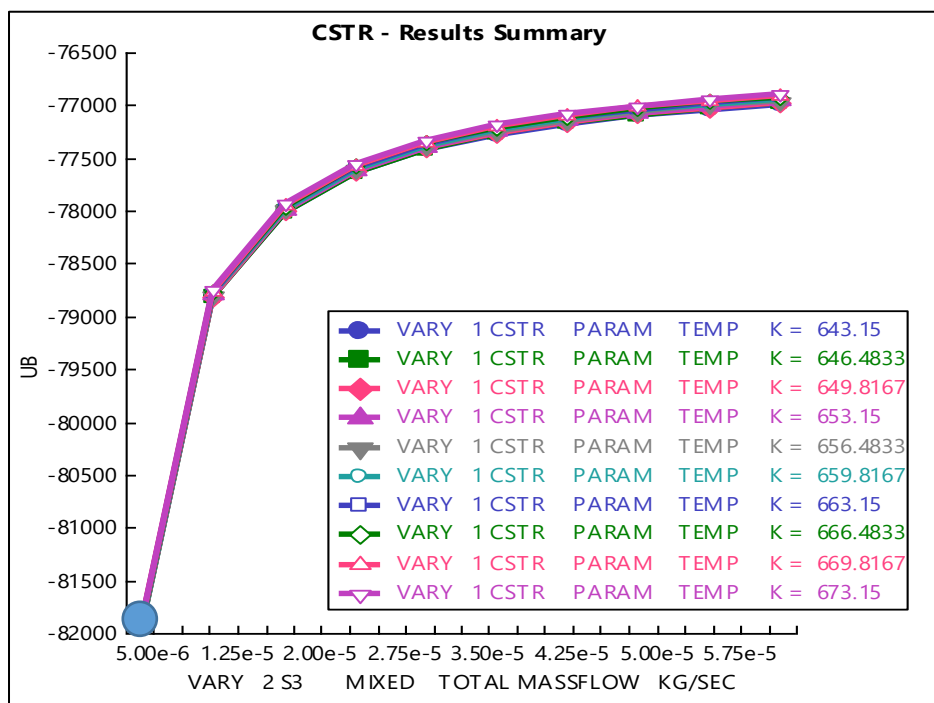


Figura 4.35 Relación entre la rentabilidad, con el flujo y la temperatura en un reactor CSTR.

## 4.2. Resultados del reactor de lecho fluidizado.

Con base a los análisis realizados en los reactores CSTR y PFR, se demostró que el flujo de alimentación, es pequeño para el dimensionamiento del reactor de lecho fluidizado, por lo consiguiente el flujo de alimentación está dando entre los rangos de 0.005 a 0.01185kg/s.

Con respecto a la Figura 4.36, se observa que, a un flujo de 0.005kg/s y una temperatura de 673.15K se obtuvo la mayor fracción conversión de 0.623, y con base al rendimiento en las mismas condiciones, se obtuvo un resultado de 0.313 como se observa en la Figura 4.36.

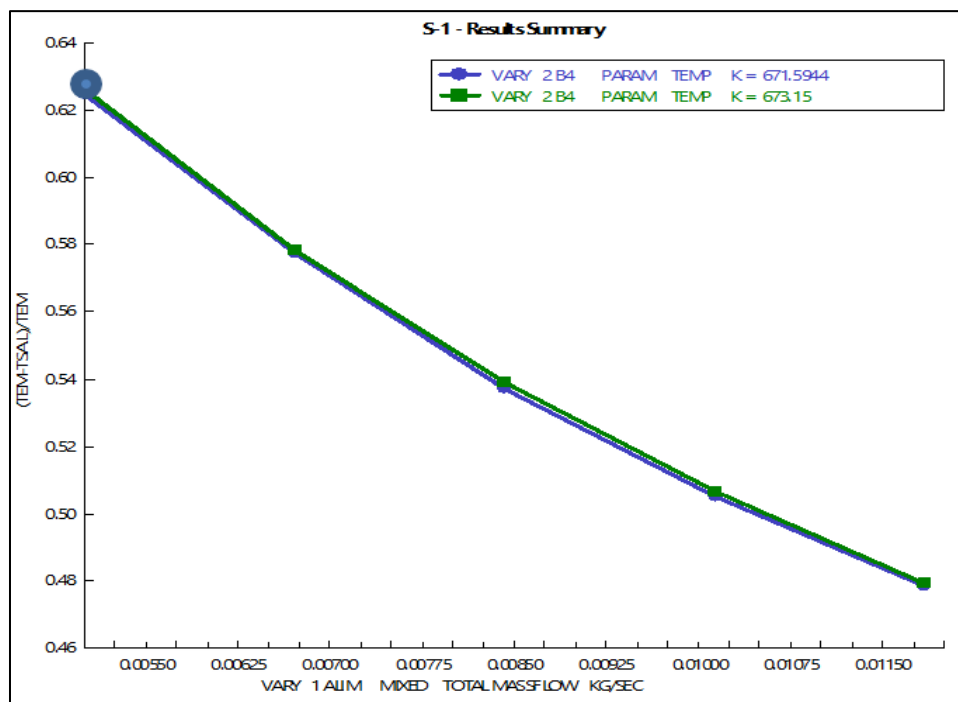


Figura 4.36 Relación entre la fracción conversión del Tolueno con la temperatura y el flujo, en un reactor de lecho fluidizado.

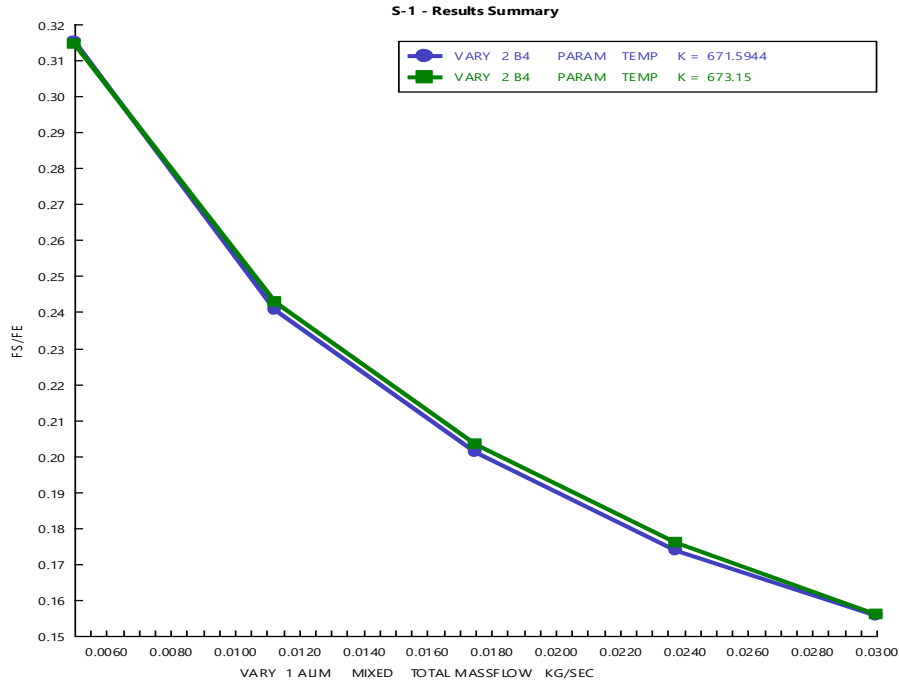


Figura 4.37 Relación entre el rendimiento del Xileno, con la temperatura y el flujo, en un reactor de lecho fluidizado.

En relación al precio del reactor, se observa que con base a las condiciones mencionadas en el apartado 3.6.5 en el cual se indicó que el reactor iba a tener un diámetro de 6.5617ft, con altura de 14.76 ft y una envoltura de 5000lb, el costo del reactor fue de \$ 910,000.00 (Figura 4.37); al mismo tiempo se demostró en la Figura 4.37 que con un flujo másico de 0.01185kg/s y a una temperatura de 673.15K, la producción anualmente de Xileno fue de \$1,047,000.00. Por lo tanto se demostró que es preferible utilizar el flujo de 0.01185kg/s y a una temperatura de 673.15K, con el propósito de obtener mayores ganancias.

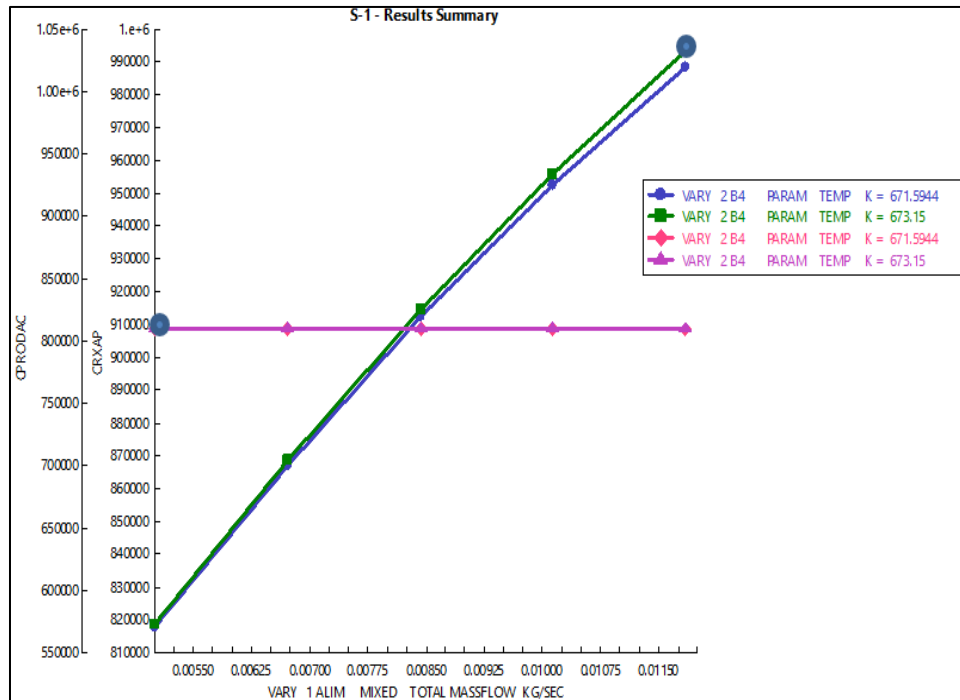


Figura 4.38 Relación entre costo del reactor del lecho fluidizado y el costo del Xileno con la temperatura y el flujo másico en la alimentación.

En cuanto al costo energético, se denoto que a medida que se aumentó el flujo disminuyo el costo energético, tal es el caso de a un flujo másico de 0.01185kg/s y a una temperatura de 673.15K, se obtuvo un costo de energético de \$5,769.1 anualmente (Figura 4.39); esto se debió a que las ecuaciones reportadas por Ulrich, et al., 2006, menciona que a mayores flujos, menor será el costo del servicio auxiliar. A pesar de que también no se tomó en cuenta el agua de enfriamiento debido a que la reacción es ligeramente exotérmica.

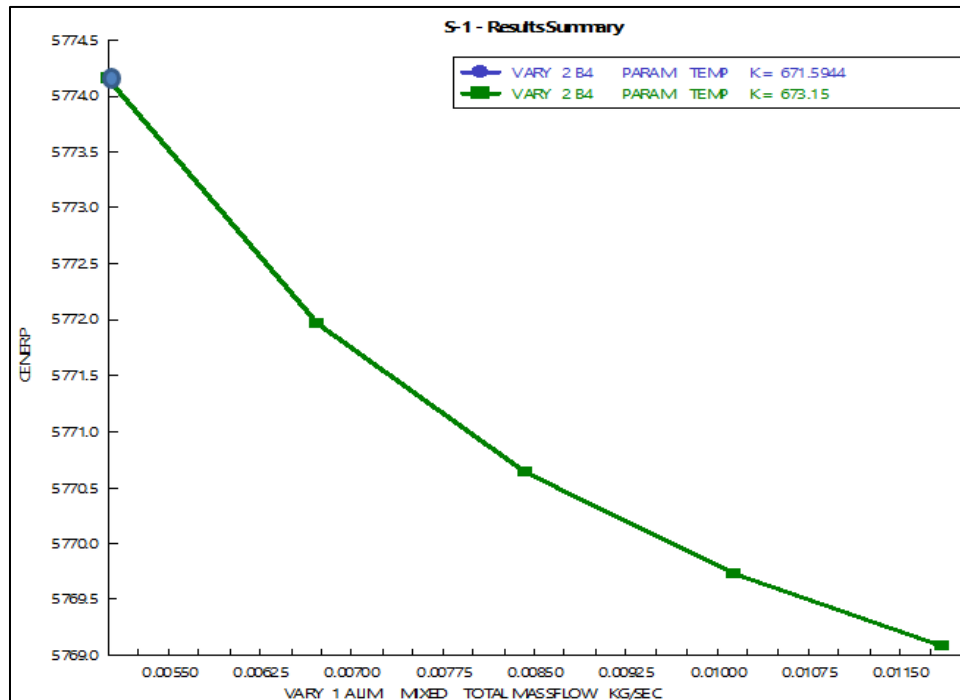


Figura 4.39 Relación entre costo energético con la temperatura y el flujo másico en la alimentación en un reactor de lecho fluidizado.

El reactor fue comprado con un préstamo de 20 años y con un interés del 5%, por lo consiguiente, se observó en la Figura 4.40, que si usaba un flujo de 0.01185 kg/s y una temperatura de 673.15 K anualmente se generaba un costo de \$78,672.00, el cual se encontraba por debajo de la producción anual, que fue de \$1,047,000.00 (Figura 4.38), siendo así que a estas condiciones el proceso es rentable, debido a que se obtuvo una utilidad bruta de \$968,328.00 anualmente (Figura 4.41).

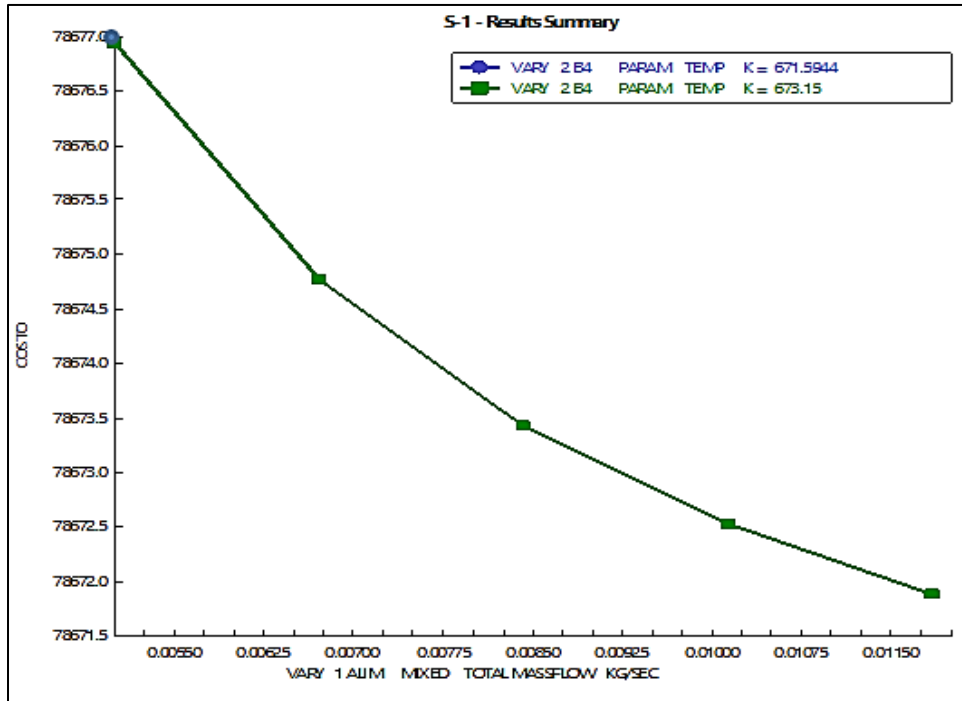


Figura 4.40 Relación entre costo de operación con la temperatura y el flujo másico en la alimentación, en un reactor de lecho fluidizado.

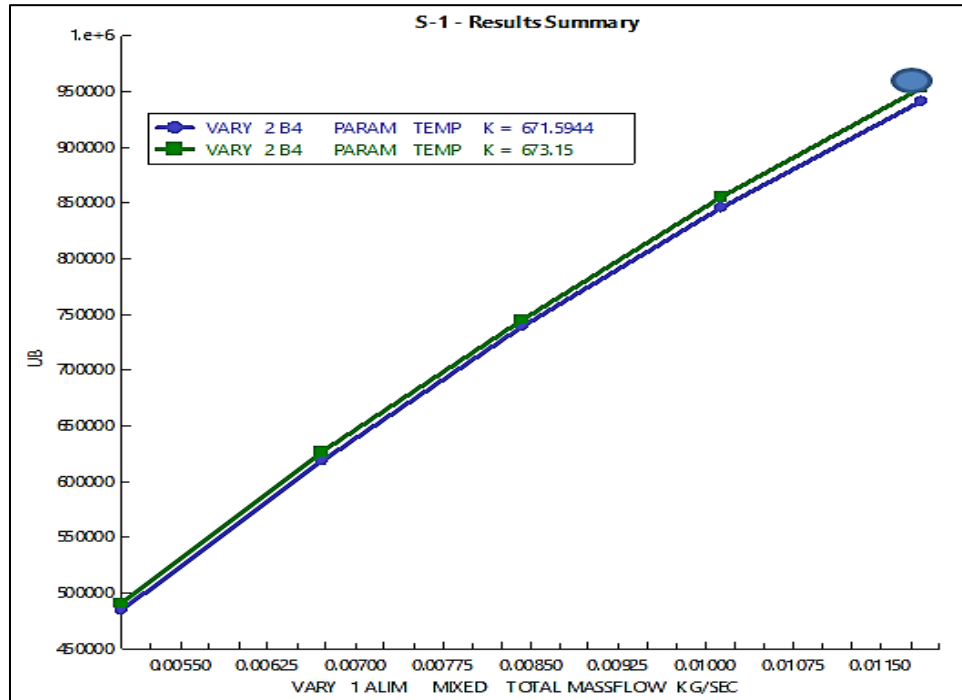


Figura 4.41 Relación entre costo de operación con la temperatura y el flujo másico en la alimentación, en un reactor de lecho fluidizado.

Por lo tanto si se utiliza un flujo de 0.01185kg/s , teniendo en cuenta que el es volumen es de 2.278975m<sup>3</sup> y un flujo volumetrico de 0.00392916m<sup>3</sup>/s con base a la Ecuación 4.1 se obtiene un TRH de 589.015s o 9.66min. Y a estas condiciones se obtiene un costo de venta de \$1, 047,000.00.

$$TRH = \frac{V}{\dot{V}} \quad \text{Ec. 4.1}$$

Donde:

$TRH$  =Tiempo de retención hidráulica.

$V$  = Volumen.

$\dot{V}$  =Flujo volumétrico.

---

## ***5. CONCLUSIONES.***

---

1. Se recomienda la Ecuación de estado de Peng- Robinson para el proceso químico de TDP, ya que con base a la literatura es el más aplicado para procesos con hidrocarburos.
2. Se demostró que a flujos pequeños con altas temperaturas, aumenta la conversión y el rendimiento.
3. El proceso no es rentable, cuando es a flujos pequeños, debido a los diversos gastos que se deben de hacer con base a la producción, como son: el costo energético, el costo del catalizador y el costo del reactor.
4. Los análisis de sensibilidad demuestran que el diámetro y la longitud no son factores que afecten en la conversión, a pesar de que estudios demuestran que esto aumenta el tiempo de retención y al mismo tiempo aumenta la conversión.
5. A pesar de que el diámetro y la longitud no afectan la conversión, si afectan los costos del reactor, debido a que a mayor uso de material, mayor costo.
6. La presión no es una variable que afecte la conversión en los reactores CSTR y PFR, pero si es importante en la compra de los equipos, debido a que con base a los costos de Walas, 2010 para recipientes, el peso del envolvimento está en función de la presión.
7. El peso del catalizador en los reactores CSTR y PFR no afecta la conversión de del proceso TDP, es decir que aunque se introduzca más masa del catalizador, la conversión sigue siendo la misma en las distintas cantidades de masa del catalizador.
8. La H-M demuestra ser un buen catalizador para aumentar la conversión en un reactor de lecho fluidizado.
9. Debido a que la reacción es ligeramente exotérmica, se puede omitir el agua de enfriamiento.
10. Un reactor CSTR genera menor conversión y rendimiento que la utilización de un reactor PFR.
11. Para el reactor de lecho fluidizado, se tiene que dimensionar el reactor a distintos diámetros a lo largo de nuestro reactor, con el fin de generar una caída de presión, y al mismo tiempo aumentar la conversión.
12. Para aumentar más la conversión, el reactor de lecho fluidizado tiene que tener una recirculación del 90%.

13. Con el fin de obtener utilidades, el flujo másico mínimo recomendable para la alimentación del TDP es de 0.01185kg/s, a una temperatura de 673.15K.

---

## ***6. BIBLIOGRAFÍA.***

---

- Al-Khattaf S** Xylenes Reactions and Diffusions in ZSM-5 Zeolite-Based Catalys [Journal]. - [s.l.] : Ind. Eng Chem , 2007. - 59-69.
- Allow wire internacional** Allow wire internacional [Online]. - Abril 09, 2016. - [http://www.alloywire.com/spanish/alloy\\_stainless\\_steel\\_304.html](http://www.alloywire.com/spanish/alloy_stainless_steel_304.html).
- Arellanos Cárdenas Sofia [et al.]** Apuntes científicos [Online]. - Abril 28, 2016. - <http://apuntescientificos.org/ecuacion-estado-ibq.html>
- Ashraf Muhammad Tahir** Analysis and optimization of p-xylene production process. - Sharjah : [s.n.], 2013. - pp. 59-69.
- AspenPlus** APrSystem Help. - 2016.
- aspentech** Reaction in fluidized beds (guide to the fluidized bed reactor Demo) [Publicación periódica]. - Burlington : Aspen Technology, 2013. - págs. 35-46.
- Carlson Eric C.** Don't gamble with physical properties for simulations [Journal]. - [s.l.] : Chemical Engineering Progress, 1996. - pp. 35-46.
- Cengel Yunus A., Boles Michael A** Termodinámica [Libro]. - [s.l.] : Mc Graw Hill, 2007.
- Choudhury Mina, Borthakur P C and T Bora** Synthesis and characterisation of silicious mordenite [Journal]. - Dibrugarh : Indian Journal of chemical technology, 1997. - 1-6 : Vol. 5.
- Dooley Kerry M, Brignac Stephen D and Price Geoffrey L** Kinetics of zeolite- Catalyzed Toluene Disproportionation [Journal]. - Louisiana : American Chemical Society , 1990. - 789-795.
- Encyclopaedia Britannica** [Online]. - 05 11, 2016. - <http://global.britannica.com/science/mordenite>.
- Fogler Scott H** Elementos de ingeniería de las reacciones químicas [Book]. - [s.l.] : Pearson Prentice Hill, 2007.
- García Gonzáles Juan Manuel** La simulación de procesos en ingeniería química [Journal]. - zacatecas : Investigación científica, 2008. - 2 : Vol. 4. - pp. 1-9.
- Holman H.P.** Transferencia de calor [Book]. - [s.l.] : Mc Graw Hill, 1998.
- Iborra Montserrat, Tejero Javier and Cunill Fidel** Reactores Multifásicos [Online]. - 2013. - Abril 20, 2016. - <http://diposit.ub.edu/dspace/bitstream/2445/33262/1/APUNTES%20RM.pdf>.

- Kelly Kevin P and Butler James R.** Procedimiento de desproporcionación de tolueno [Patent]. - España, 05 16, 2004.
- Khattaf S. Al** Xylenes reactions and diffusions in ZSM-5 zeolite- based Catalysts [Journal]. - Saudi : American Chemical Society, 2007. - Vol. 46. - pp. 59-69.
- Levenspiel Octave** Ingeniería de las reacciones químicas [Book]. - [s.l.] : Repla, S.A, 1986. - Vol. 8.
- López Bahamonde J. M.** La industria petroquímica de los aromáticos en el siglo XXI [Journal] // Artículos de petroquímica / ed. CEPSA. - [s.l.] : America actual , 2010. - pp. 99-102.
- Martínez Sifuentes Victor Hugo [et al.]** Simulación de procesos en ingeniería química [Book]. - México : Plaza y Valdés, 2000.
- Martínez Toledo Angeles and Cuevas Diaz M. del C.** Producción de btx en México: usos, toxicología y análisis [Journal]. - [s.l.] : Eumed.net, 2011.
- Menard Kevin P** [Online] // Cosden Technology, Inc.. - Abril 26, 2016. - <http://www.google.com.mx/patents/US4761514>.
- Mineralogy Database** mindat.org [Online]. - Hudson Institute of minerology. - abril 1, 2016. - <http://www.mindat.org/min-2779.html>.
- Muhammad Tahir Ashraf** Analysis and optimization of p-xylene production process [Publicación periódica]. - Sharjah : United Arab Emirates. - 1-69.
- Perry Robert, H and Green Don W** Perry's Chemical Engineers [Book]. - [s.l.] : McGraw-Hill, 2008.
- Riogen** Riogen: Catalysis for chemicals and Energy [En línea]. - 09 de Abril de 2016. - [http://shop.riogeninc.com/Mordenite-Catalysts-Si-Al-65\\_c13.htm](http://shop.riogeninc.com/Mordenite-Catalysts-Si-Al-65_c13.htm).
- Seider Warren D, Seader J.D. and Lewin Daniel R.** Product and Process Design Principles [Journal]. - [s.l.] : John Wiley and Sons, Inc, 2003.
- Tsai Tseng-Chang [et al.]** Kinetics of toluene disproportionation over fresh and coked H-mordenite [Journal]. - [s.l.] : Science Direct, 2004. - Vol. 97. - pp. 297-302.
- Turton Richard [et al.]** Analysis, synthesis, and design of chemical processes [Book]. - Michigan : Prentice Hall, 2012.
- Ulrich Gael D. and T. Vasudevan Palligarnaio** How to Estimate Utility Costs [Journal] // Chemical Engineering. - 2006. - pp. 66-69.

- Walas Stanley** Chemical Process Equipment [Libro]. - [s.l.] : Howard Brenne, 2010.
- Walas Stanley M.** Chemical Process Equipment selection and design [Book]. -  
Massachusets Institute of technology : Howard Brenner, 1990.
- Wang Ikai, Chang Tsai Tseng- and Tai Huang Sheng** Disproportion of Toluene and of  
Trimethylbenze and Their Transalkylation over Zeolite Beta [Journal]. - [s.l.] : Ind.  
Eng. Chem, 1990. - pp. 2005-2011.
- Waziri S M, Aitani A M and S Al-Khattaf** Transformation of Toluene and 1,2,4-  
Trimethylbenzene over ZSM-5 and Mordenite Catalysts: A Comprehensive Kinetic  
Model with Reversibility [Journal]. - [s.l.] : Ind. Eng. Chem., 2010. - pp. 6376-6387.
- Xiong Yusheng, Rodewald Paul G and Chang Clarence D** On the Mechanism of Toluene  
Disproportionation in a Zeolite Environment [Journal]. - [s.l.] : J. Am. Chem. Soc,  
1995. - pp. 9427-9431.

---

***ANEXO A.***

---

Tabla A.1 Síntesis antecedentes modelos cinéticos.

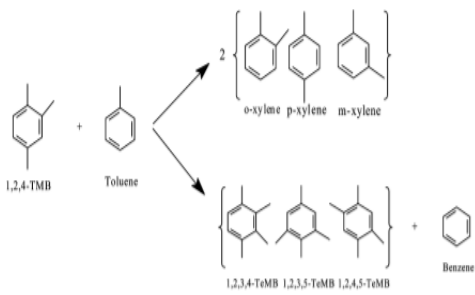
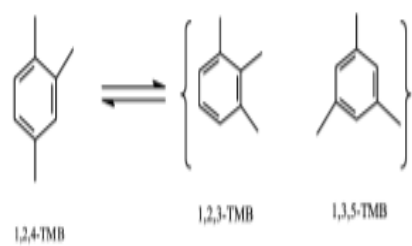
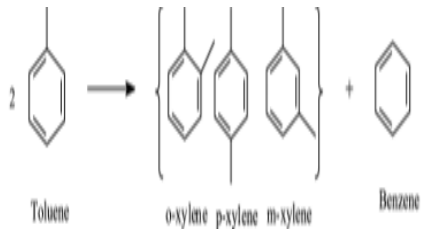
Autor y año.	Modelo estequiométrico.	Modelo cinéticos.	Catalizador.
	 <p>1,2,4-TMB + Toluene → 2 { o-xylene p-xylene m-xylene } + { 1,2,3,4-TMB 1,2,3,5-TMB 1,2,4,5-TMB } + Benzene</p>	$\frac{dy_T}{dt} = -\left\{ 2\kappa_1 y_T^2 \frac{W_c W_{hc}}{V^2 M W_T} + k_5 y_T y_{124TMB} \left( \frac{W_c W_{hc}}{V^2 M W_{124TMB}} \right) \right\} \varphi_3$	
Waziri, et al., 2010.	 <p>1,2,4-TMB ⇌ { 1,2,3-TMB 1,3,5-TMB }</p>	$\frac{dy_{124TMB}}{dt} = -\left\{ k_2 \left( y_{124TMB} - \frac{y_{123TMB}}{K_2} \right) \frac{W_c}{V} + k_3 \left( y_{24TMB} - \frac{y_{135TMB}}{K_3} \right) \frac{W_c}{V} + 2k_4 y_{124TMB}^2 \left( \frac{W_c W_{hc}}{V^2 M W_{124TMB}} \right) \right\} \varphi_2$	H-M y H-ZSM-5.
	 <p>2 Toluene → { o-xylene p-xylene m-xylene } + Benzene</p>	$\frac{dy_T}{dt} = -2\kappa_1 y_T^2 \frac{W_c W_{hc}}{V^2 M W_T} \varphi$	

Tabla A.1. Síntesis de antecedentes modelos cinéticos (continuación).

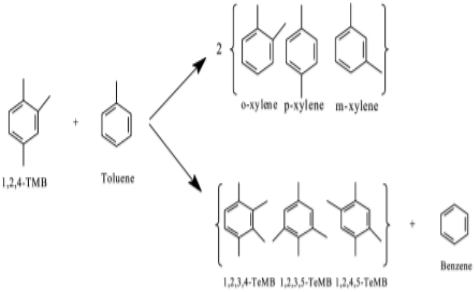
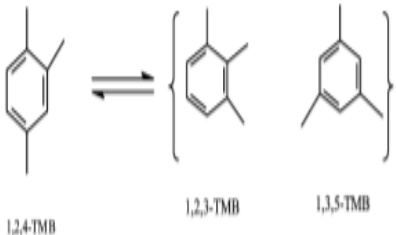
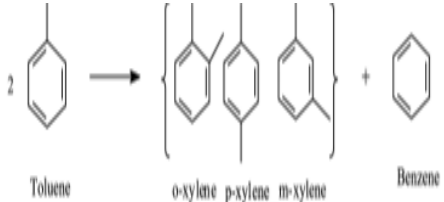
Autor y año.	Modelo estequiometrico.	Modelo cinéticos.	Catalizador.
Wang, et al., 1990.	 <p>1,2,4-TMB + Toluene → 2 { o-xylene p-xylene m-xylene } + { 1,2,3,4-TMB 1,2,3,5-TMB 1,2,4,5-TMB } + Benzene</p>	(-)	H-Beta,H-Y, USY.
	 <p>1,2,4-TMB ⇌ { 1,2,3-TMB 1,3,5-TMB }</p>		H-Beta.
	 <p>2 Toluene → { o-xylene p-xylene m-xylene } + Benzene</p>		H-M y H-ZSM-5.

Tabla A.2 Síntesis de antecedentes modelos estequiometrico y condiciones de operación.

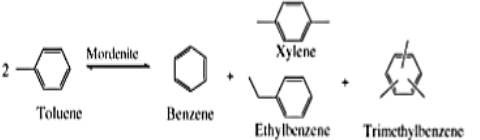
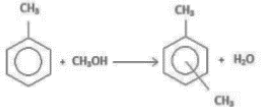
Autor y año.	Modelo estequiometrico.	Modelo cinéticos.	Catalizador.
Tsai, et al., 2004.	 <p style="text-align: center;"> <chem>2Cc1ccccc1 &gt;&gt; c1ccccc1 + Cc1ccc(C)cc1 + Cc1ccc(C)cc1 + CC1(C)C(C)C1</chem>            Toluene                      Benzene                      Xylene                      Ethylbenzene                      Trimethylbenzene         </p>	$-\frac{dA}{dt} = k[A]$ <hr/> $-\frac{dA}{dt} = k_1[A]^2 - k_2[A]^2$	H-M.
Dooley, et al., 1990.	$T + HS \leftrightarrow TS + H_2$ $TS + T \leftrightarrow DS$ $DS \leftrightarrow B + XS$ <p>T= Tolueno B= Benceno X= Xileno S= Superficie de contacto D= bifenil-alcano intermediario.</p>	(-)	Y, Ni-Y.
Khattaf, 2007.	Isomerización de Xilenos.	$-\frac{V}{W_{cr}} \frac{dy_A}{dt} = \eta_{ss} \kappa_A \ln \varphi_{in} \gamma_A$	H-ZSM-5.
Xiong, et al., 1995.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Transferencia de metilo intermolecular.</li> <li>• Reacción biomolecular invocando a-difenilmetano como intermedio.</li> </ul>	(-)	Zeolita H-ZSM-5.
Muhammad Tahir Ashraf (2013).	 <p style="text-align: center;"> <chem>Cc1ccccc1 + CO &gt;&gt; CC1=C(C)C(C)=CC1 + O</chem>            Toluene + Methanol                      1,3,5-trimethylbenzene + Water         </p>	$r_1 = k_1 p_t p_m$	Zeolita H-ZSM-5.

Tabla A.2 Síntesis de antecedentes modelos estequiometrico y condiciones de operación (continuación).

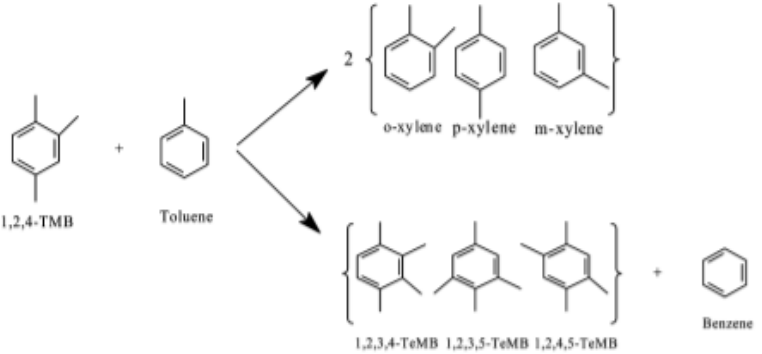
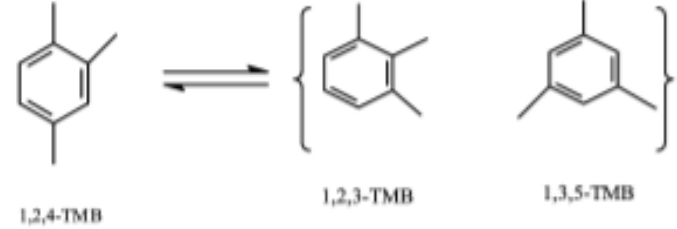
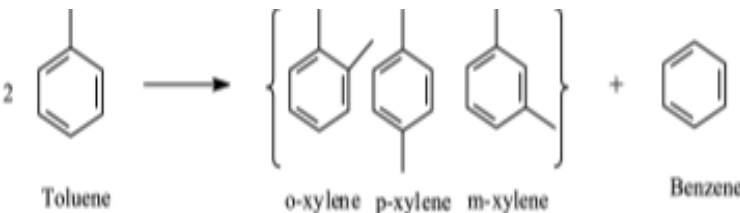
Autor y año.	Modelo estequiometrico.	Temperatura.	Presión.	Reactor.
Waziri, et al., 2010.		673.15°K.	(-)	Reactor a escala con recirculación interna, creado por LASA 1.
				
				

Tabla A.2 Síntesis de antecedentes modelos estequiometrico y condiciones de operación (continuación).

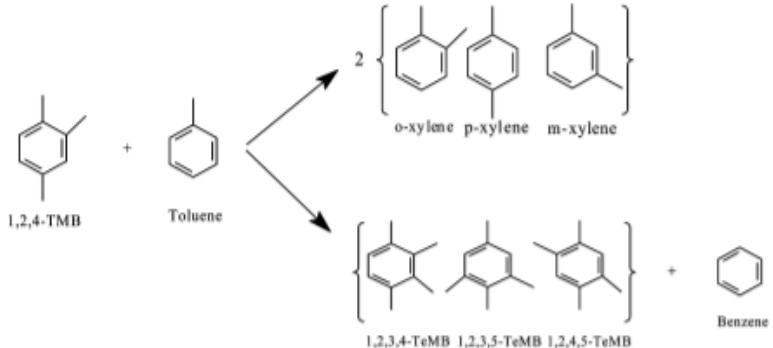
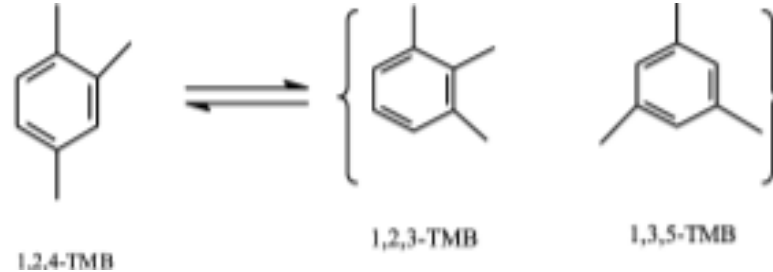
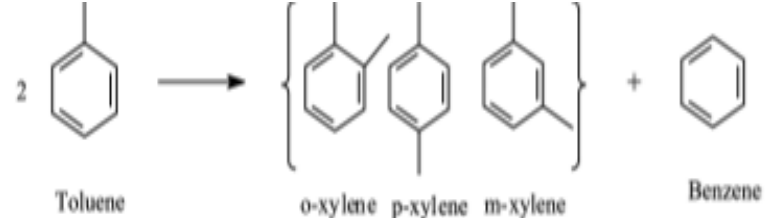
Autor y año.	Modelo estequiometrico.	Temperatura.	Presión.	Reactor.
Wang, et al., 1990.	 <p>1,2,4-TMB + Toluene → 2 { o-xylene p-xylene m-xylene } + { 1,2,3,4-TeMB 1,2,3,5-TeMB 1,2,4,5-TeMB } + Benzene</p>	573.15-679.15 K.		
	 <p>1,2,4-TMB ⇌ { 1,2,3-TMB 1,3,5-TMB }</p>	573.15-673.15 K.	(-)	(-)
	 <p>2 Toluene → { o-xylene p-xylene m-xylene } + Benzene</p>	573.15-723.15 K.		

Tabla A.3 Conversiones reportadas.

Autor			Temperatura.								
			200.	250.	300.	348.	350.	400.	405.	450.	500.
Waziri, et al., 2010.	X <sub>T</sub> .	ZSM.5.						14.6.			
		H-M.						28.			
	X <sub>1,2,4-TMB</sub> .	ZSM.5.						31.6.			
		H-M.						48.3.			
	X <sub>T-1,2,4-TMB</sub> .	ZSM.5.						20.8-36.6.			
		H-M.						28.8-49.1.			
Wang, et al., 1990.	X <sub>T</sub> .	H-Beta.			3.29.		7.53.	14.45.		20.24.	
		HZ-SM-5.							24.61.		
	X <sub>1,2,4-TMB</sub> .	H-Beta.	13.57	29.20	61.32						
		HY.					30				
		USY.					30				
	X <sub>T-1,2,4-TMB</sub> .	H-Beta.	2.99T-49.62 TMB.	9.96 T-74.4 TMB.	21.36T-81.91 TMB		29.33T-86.44 TMB.	38.27T-86.95 TMB..			
Khattaf, 2007.	X <sub>m</sub> -Xileno.	HZ-SM-5.									30.5
	X <sub>o</sub> -Xileno.										37.5.
	X <sub>p</sub> -Xileno.										42.5.

Tabla A.5. Valores de Energía de activación (kcal/kmol) reportados.

Autor y año.	Proceso.	H-M	H-ZSM-5.
Waziri, et al., 2010.	TDP.	$E_1=54.22.$	$E_1=41.61.$
	1,2,4-TMB.	$E_2=13.12.$ $E_3=7.92.$	$E_2=32.73$ $E_3=7.92.$
	Transalquilación 1,2,4-TMB y Tolueno.	$E_5=7.21.$	$E_5=63.54.$
Tsai, et al., 2004	TDP.	$E=24.5.$	
Khatf, 2007.	M-X.		$E=10.32.$
	O-X		$E=9.97.$
	P-X.		$E=4.74.$
Muhammad Tahir Ashraf (2013).			$E_1=10915.7.$ $E_2=12085.6.$ $E_3=14091.90.$ $E_4=4681.37.$ $E_5=11679.56.$

---

***ANEXO B.***

---



Hoja de especificaciones de datos para el proceso de Desproporción del Tolueno.

Fecha: 12/05/2016

Servicio de la unidad: reactor.

Trabajo: 1

No. de unidad:1.

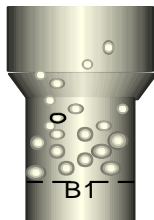
Cliente: BUAP.



Página 1 de 1

Especificaciones del reactor		Especificaciones del proceso.	
Tipo de reactor:	Lecho fluidizado.	Flujo de alimentación:	0.010499 kg/s.
Diámetros del reactor: Diámetro inferior:	1.5m	Diámetro superior	2m.
Temperatura:			673.15K.
Longitud:	4.5m.	Recirculación:	90%
Envolvente:	800lb.	Intercambiador de calor:	673.15K.
Catalizador:	H-M.		
Masa de catalizador:	0.03083kg.		

Representación del reactor de lecho fluidizado.



Observaciones:

Elaboró.

Revizó.

Aprobó.

Fecha: 12 de Mayo del 2016.

