

ISOMERIZACIÓN DE N-BUTANO A ISOBUTANO

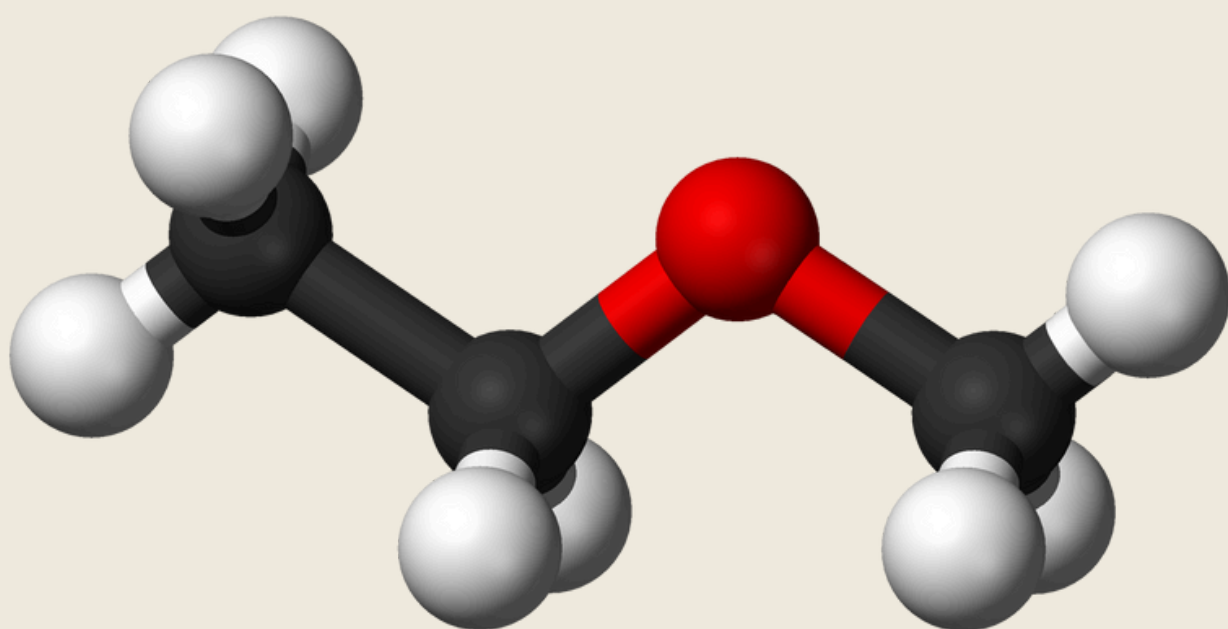
AUTORES

OLIVAS MENDOZA ALMENDRA,
BARBOSA GAXIOLA DANAH

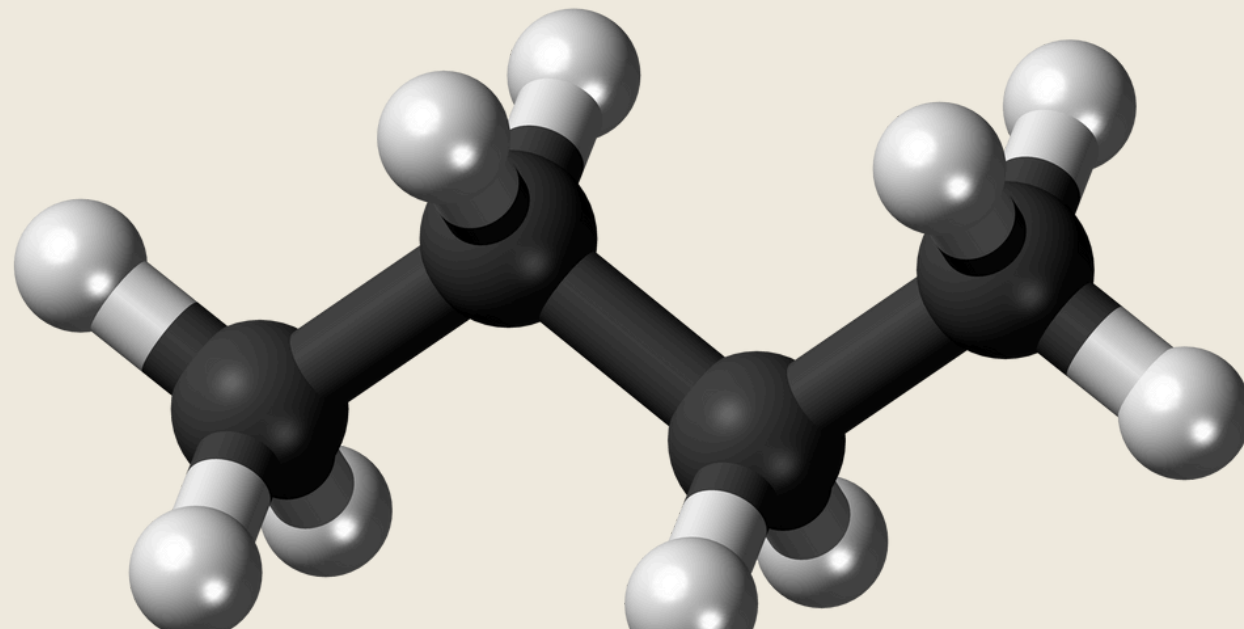
SIMULACIÓN DE PROCESOS

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CHIHUAHUA

La isomerización del n-butano es un proceso clave en la industria petroquímica, fundamental en la producción de gasolinas de alto octanaje y compuestos intermedios de gran valor comercial.



molécula de isobutano



molécula de n-butano

01. Introducción

La isomerización de n-butano a iso-butano representa una operación unitaria crítica en la industria petroquímica moderna, con implicaciones estratégicas en múltiples sectores

Aplicaciones Estratégicas

- Combustibles de alto octanaje: Incremento de 15-20 puntos en índice octano
- Sector de refrigerantes: Crecimiento anual del 6.3% en aplicaciones HVAC
- Petroquímica intermedia: Materia prima para MTBE y alquilatos

02. Objetivo

Cuantificar conversión de equilibrio y demanda energética en proceso de isomerización mediante simulación DWSIM, evaluando esquemas de separación y recirculación para maximizar eficiencia global.

LITERATURA RELACIONADA

- Johnson y Miller (2021) reportaron conversiones del 54% en reactores catalíticos de lecho fijo.
- Chen et al. (2022) analizaron la separación criogénica de isómeros C4 alcanzando purezas mayores al 95%.
- Brown y Nocera (2023) validaron el uso del modelo SRK para el equilibrio vapor-líquido en sistemas de hidrocarburos ligeros, confirmando su alta precisión.

03. Metodología

El proceso fue simulado en DWSIM versión 9.0.5, utilizando el modelo termodinámico SRK por su alta confiabilidad en sistemas de hidrocarburos ligeros (C4). La alimentación de n-butano se somete a precalentamiento, reacción en equilibrio químico (RGibbs), separación por destilación y recirculación del n-butano no reaccionado.

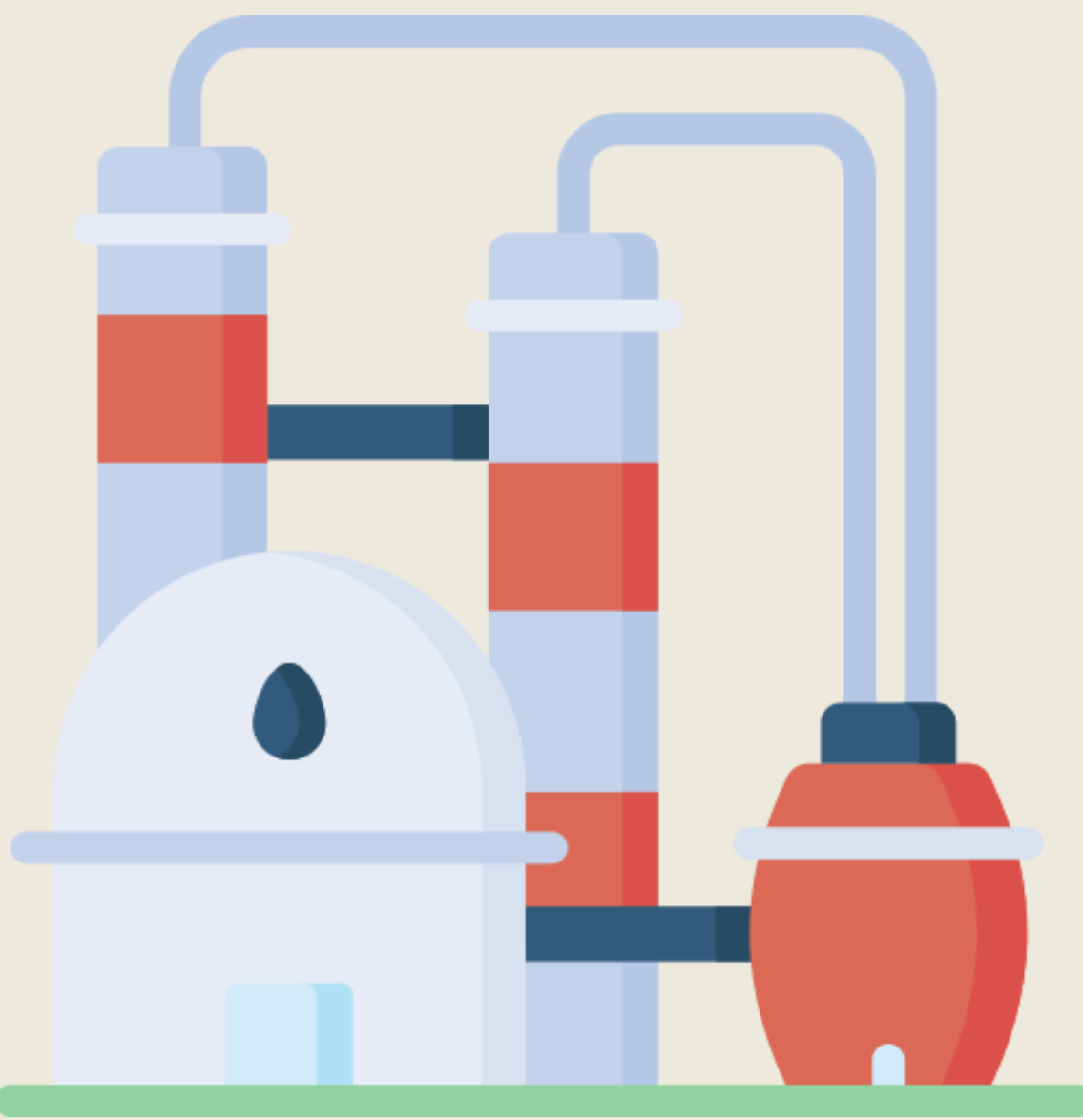
Etapas principales:

- Mezcla de alimentación y recycle
- Calentamiento a 723 K
- Reactor RGibbs (equilibrio químico)
- Columna de destilación
- Sistema de purga y recirculación

04. Resultados y hallazgos

- Conversión a isobutano: 91.69 %
- Pureza del producto: 91.70 % mol
- Flujo de producto: 999.139 mol/s
- El fondo de la columna presenta 70.53 % de n-butano, el cual se recircula eficientemente.

El sistema alcanzó estabilidad numérica, cierre de balances y comportamiento consistente con modelos industriales.



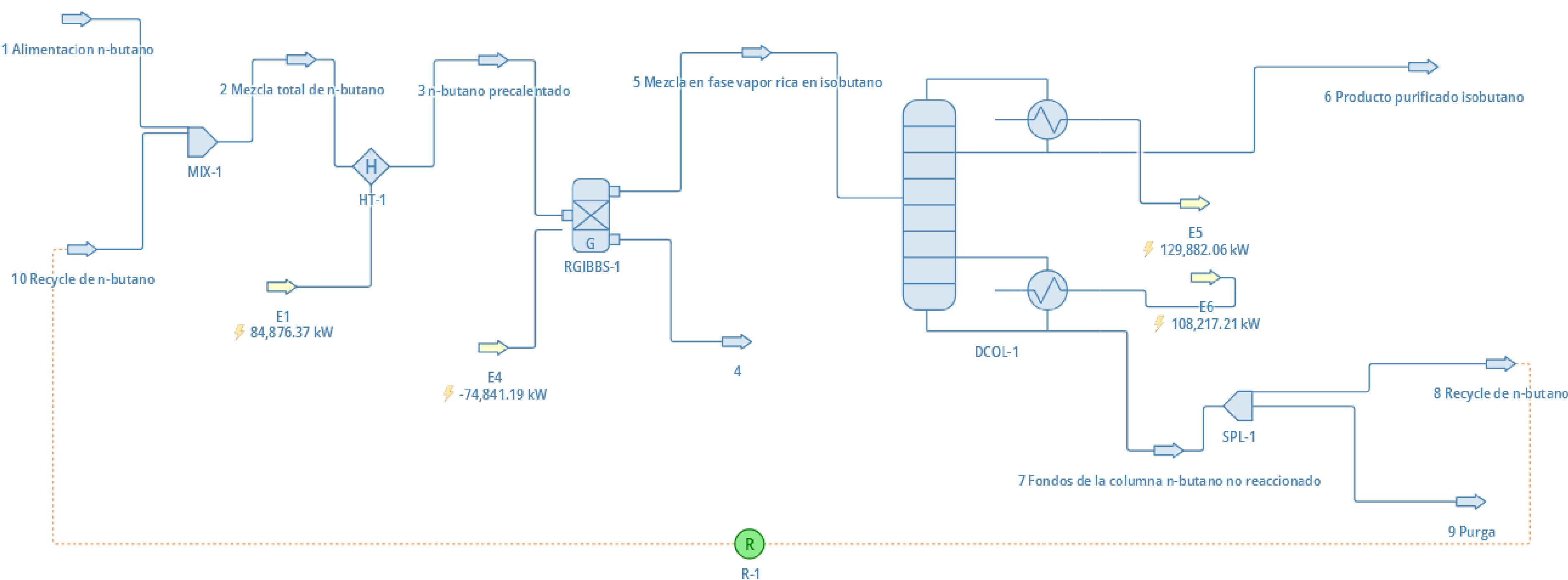
05. Análisis

La simulación mostró que el aumento de temperatura favorece la reacción, pero al ser exotérmica, existe un límite de equilibrio.

El uso de recirculación incrementa significativamente la conversión global.

El modelo SRK presentó excelente comportamiento en los cálculos de equilibrio vapor-líquido.

El sistema se comporta de manera estable bajo las condiciones establecidas.



06. Conclusiones

El proceso de isomerización de n-butano a isobutano presenta una alta eficiencia de conversión y separación bajo condiciones de equilibrio. El uso de simulación con DWSIM permitió evaluar el comportamiento térmico, químico y de separación del sistema. El reciclaje del n-butano no convertido mejora notablemente el rendimiento global del proceso. La metodología empleada es adecuada para analizar procesos reales de la industria petroquímica.

