

Nº 3
REV



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO

Facultad de Química

PROPUESTA DE MEJORAMIENTO DEL TREN DE
RECUPERACION DE VAPORES DE LA PLANTA
CATALITICA DE TULA

TESIS MANCOMUNADA

Que para obtener el Título de
INGENIERO QUIMICO
p r e s e n t a n

ANTONIO ALONSO LOPEZ
FRANCISCO GIRAL LOPEZ



México, D. F. Ciudad Universitaria 1992

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

CAPITULO 1. INTRODUCCION	0
CAPITULO 2. GENERALIDADES SOBRE SIMULACION	3
A.- Ingeniería de procesos: antecedentes	4
B.- Síntesis, análisis y optimización de procesos	5
C.- Simulación de procesos químicos	9
D.- Sistemas de cómputo en la ingeniería de procesos	13
E.- Enfoques de los sistemas de simulación	15
CAPITULO 3. PLANTA CATALITICA DE TULA (FCC)	28
A.- Introducción	29
B.- Fraccionamiento catalítico	29
C.- Unidades FCC	31
D.- Proceso existente en la refinería de Tula	34
CAPITULO 4. SIMULADOR ASPEN-PLUS	43
A.- Introducción	44
B.- Modelos	45
C.- Algoritmos	48
D.- Soporte computacional	50
E.- Interfase con el usuario	51
F.- Aplicaciones	53

CAPITULO 5. SIMULACION DEL TREN DE RECUPERACION DE VAPORES	55
A.- Pasos a seguir en una simulación	56
B.- Resultados de la simulación	60
CAPITULO 6. PROPUESTA DE MEJORAMIENTO DEL PROCESO Y SU SIMULACION	69
A.- Destilación	70
B.- Columnas de destilación con bombas de calor	72
C.- Consideraciones generales de la simulación	79
D.- Resultados de la simulación	81
CAPITULO 7. ANALISIS DE LA PROPUESTA	89
A.- Trabajo perdido y análisis termodinámico	90
B.- Fundamentos termodinámicos	91
C.- Metodología utilizada	93
D.- Resultados	95
E.- Aspectos económicos	97
CAPITULO 8. CONCLUSIONES	100
A.- Simulación del tren de recuperación de vapores	101
B.- Análisis de la propuesta de mejoramiento	102
C.- Trabajos futuros	104
BIBLIOGRAFIA	105
APENDICE. ECUACIONES DE ESTADO	

CAPITULO 1

INTRODUCCION

El presente trabajo debe entenderse como un texto en el que se exponen a lo largo de todas sus páginas ciertos aspectos sobre la ingeniería de procesos, mostrando su aplicación mediante la propuesta de mejoramiento del tren de recuperación de vapores de la planta catalítica de Tula.

En el capítulo 2 se presentan generalidades sobre la ingeniería de procesos; se habla del crecimiento de esta disciplina y la importancia que ha tenido en las últimas décadas. Se ubica a la simulación dentro de la ingeniería de procesos, describiendo las bases teóricas y los elementos que la constituyen. Por último se define un *sistema de simulación de procesos* y las diferentes partes que lo conforman.

El capítulo 3 es la descripción general del proceso de la planta catalítica de la refinería de Tula, se describe el proceso completo para situar el tren de recuperación de vapores en un contexto más amplio.

Debido a que la herramienta más importante para el desarrollo de este trabajo lo constituye el simulador de procesos ASPEN-PLUS, el capítulo 4 hace una descripción completa del mismo. Lo sitúa dentro de los sistemas de simulación de procesos y describe cada una de sus partes utilizando el criterio desarrollado en el capítulo 2.

En el capítulo 5 se presenta la simulación del tren de recuperación de vapores de Tula. Se describe detalladamente la aplicación del simulador ASPEN-PLUS a este proceso y se comparan los resultados con los datos de diseño del mismo.

El capítulo 6 hace una revisión de la destilación, que es uno de los procesos más utilizados en la industria química, para explicar después el funcionamiento de la bomba de calor, dispositivo termodinámico cuya aplicación en algunas columnas de destilación hace que el sistema tenga un uso de energía más eficiente. Por último se muestran los resultados de aplicar dos de éstos sistemas a la torre separadora de propano y propileno del tren de recuperación de vapores.

El capítulo 7 presenta algunos conceptos sobre eficiencia termodinámica, los cuales son utilizados después para analizar la factibilidad de las propuestas en función de la disponibilidad energética de cada una comparada con la del proceso existente.

En el capítulo 8 se analizan los resultados obtenidos a lo largo del trabajo y se presentan las conclusiones que con ellos se obtienen.

Es posible utilizar cada capítulo por separado si se desea obtener información sobre algún tema en específico. Los capítulos 4 y 5 se pueden utilizar como guía para el empleo del simulador ASPEN-PLUS recién adquirido por el Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Química.

CAPITULO 2
GENERALIDADES SOBRE SIMULACION

A.- INGENIERIA DE PROCESOS: ANTECEDENTES.

Antes de 1950, la ingeniería química era el resultado de diseños intuitivos, basados en la experiencia de sus creadores. Los pocos métodos de cálculo que por aquella época se conocían no eran muy precisos y requerían de mucho tiempo para su elaboración. Por lo anterior, el diseño de procesos químicos no se consideraba como una disciplina formal dentro de la ingeniería, era más bien el resultado de la necesidad de nuevos productos. Con el tiempo, el diseño de procesos fue requiriendo de bases formales con el propósito de mejorar los ya existentes y crear otros nuevos que ayudaran al desarrollo económico de las naciones.

La ingeniería de procesos es una de las ramas más nuevas dentro de la ingeniería química. Surge a partir de la segunda mitad de este siglo como resultado de los nuevos procedimientos y técnicas que han permitido abandonar el enfoque empírico para dar lugar al científico, y de la necesidad de reordenar la cantidad de información existente y fijar las pautas para el diseño de nuevos procesos. Hoy en día, el significado de la ingeniería de procesos ha crecido hasta el punto de considerarse la rama encargada de planear, diseñar, operar y controlar cualquier clase de operación unitaria o proceso químico.

El nacimiento de la ingeniería de procesos como una disciplina formal dentro de la ingeniería química va de la mano con el desarrollo de nuevas metodologías de cálculo y el uso de computadoras para llevarlas a cabo. El avance tecnológico en materia de computación plantea amplias perspectivas para ayudar a la creación de procesos químicos. La computación comenzó siendo una herramienta útil para la solución de operaciones simples dentro de un proceso; posteriormente se aplicó a las diferentes operaciones unitarias por separado y procesos químicos específicos y pequeños. Actualmente se utilizan grandes sistemas para manejar los procesos más complejos; de hecho, es posible afirmar que hoy en día ninguna planta química o petroquímica importante es construida sin la simulación y diseño del proceso con la ayuda de una computadora.

B.- SINTESIS, ANALISIS Y OPTIMIZACION DE PROCESOS

La transformación de una materia prima en producto se da gracias a los diferentes fenómenos naturales que permiten los cambios físicos y químicos de las sustancias. Estos fenómenos fundamentales están comprendidos en las diferentes ciencias de la ingeniería química como lo son la termodinámica, los fenómenos de transporte, la dinámica de fluidos etc. La adecuada comprensión de los fenómenos fundamentales ha permitido la elaboración de las diferentes operaciones unitarias existentes. Los procesos químicos, a su vez, están compuestos por un número relativamente pequeño de operaciones unitarias, si se compara con la cantidad de combinaciones (o procesos) posibles. Siguiendo con esta cadena, los procesos están diseñados para cubrir un sistema aún mayor que es el de las necesidades del hombre (sociales, económicas, ecológicas etc.).



PAPEL DE LA INGENIERIA QUIMICA EN LA VIDA DEL HOMBRE

Figura 2.1

Como se puede apreciar, el fin último, que consiste en satisfacer las necesidades del hombre, está relacionado con lo más elemental que son los fenómenos naturales. La conexión entre estos dos polos ha sido posible, en gran parte, gracias a la Ingeniería química. La elaboración de los diferentes procesos se ha tenido que ajustar, por un lado, a las leyes fundamentales que los gobiernan y por otro, a las limitaciones y requerimientos que el hombre ha impuesto. Para satisfacer lo anterior, ya no sólo se requiere hacer un proceso, sino que cada día es más necesario analizarlo para su optimización. Estas tres partes (la síntesis, el análisis y la optimización) son las que conforman lo que hoy se conoce como diseño de procesos, que es

una de las etapas fundamentales dentro de un proyecto para la realización de una planta química. A continuación se definen los tres subsistemas que conforman al diseño de procesos.

SINTESIS: Para abordar esta primera parte, se puede decir que todo proceso nace de una necesidad social y/o una oportunidad económica, a partir de las cuáles surgen las diferentes ideas en cuanto a las materias primas, rutas químicas etc. En esta etapa se decide la estructura del proceso, es decir, la secuencia de operaciones unitarias y las diferentes interconexiones entre ellas; y se proponen los flujos de materia y energía necesarios para obtener los productos deseados.

ANALISIS: Cuando se ha elegido la ruta química y se ha generado el esquema del proceso (arreglo de las operaciones unitarias involucradas), es necesario comprobar si las propuestas son factibles técnica y económicamente. Para ello se realizan una serie de pasos que conforman el análisis del proceso.

Primeramente, se establecen las bases de diseño que consisten en la elección de todas las variables involucradas en el proceso; se fijan los modelos matemáticos para cada una de las operaciones y cálculos de propiedades termofísicas así como los requerimientos de servicios auxiliares. Con lo anterior, se procede a establecer una estrategia de diseño que consiste en asignarle los valores adecuados a las variables independientes o manipulables del proceso y en determinar los métodos de convergencia a utilizar.

Con la información anterior se establecen los balances de materia y energía, se calculan todas las corrientes del proceso, los parámetros de los diferentes equipos, el resumen de servicios auxiliares y el diagrama de flujo de proceso para el estado estacionario. También se comprueba si el proceso es factible termodinámicamente.

Con los resultados de los cálculos anteriores, es posible hacer un estudio económico preliminar. En él se deben incluir aspectos como el capital requerido, la rentabilidad, los costos

de operación etc.. El siguiente paso es la confrontación de aspectos técnicos y económicos mediante la consideración de factores tales como la eficiencia termodinámica e impacto ambiental.

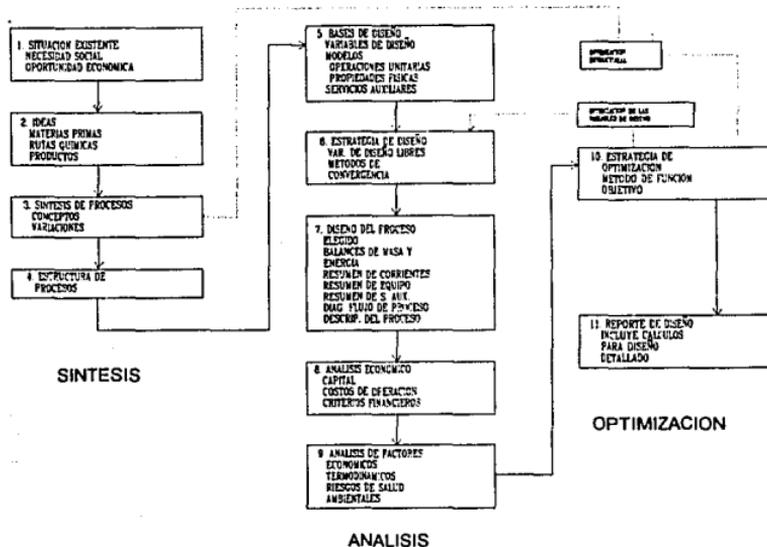


Figura 2.2: Etapas en el desarrollo del diseño de procesos: Síntesis, análisis y optimización

Como se puede apreciar, el análisis del proceso consiste en descomponer el sistema propuesto en la etapa de síntesis, en varios subsistemas (corrientes de proceso, operaciones unitarias, ciclos de recirculación, etc.), definiendo las relaciones entre cada uno de ellos. Es importante saber descomponer al sistema ya que, al estar formado de muchos elementos, se puede llegar a generar un número muy grande de subsistemas, lo cual hace casi imposible su manejo.

OPTIMIZACION: Con toda la información generada en la síntesis y análisis del proceso se propone una función objetivo adecuada para mejorar el proceso. Ahora bien, la optimización se puede llevar a cabo en dos niveles: en la estructura del proceso y en las condiciones de operación del mismo (Fig.2.2).

En ocasiones, en el análisis se puede descubrir que la alteración de algunos de los niveles en las condiciones de operación pueden influir en el dimensionamiento del equipo. De esta manera, conservando la estructura propuesta en la etapa de síntesis, se pueden modificar algunas de las condiciones de operación en la estrategia de diseño para el mejoramiento del proceso.

Por otro lado, una optimización estructural sería aquella en que se modifica el número de equipos de proceso o la manera en que éstos se interconectan. Con lo anterior se modifica la parte correspondiente a la síntesis lo que, por extensión, altera también el análisis del proceso.

Existen dos formas de atacar el problema de la optimización: la primera consta de dos ciclos iterativos anudados, uno para la optimización de los parámetros y el otro para la estructura; y la segunda consiste en realizar la optimización simultánea de los parámetros y la estructura.

Para todo lo anterior, se puede apreciar que el uso de métodos eficientes de cálculo es una de las bases principales. La computación ha ayudado notablemente en este aspecto, y gracias a su gran crecimiento, el diseño de procesos es una de las disciplinas que avanza más rápido. Debido a que las necesidades actuales del hombre son más y en ocasiones poco flexibles, el camino que se sigue actualmente en el diseño de procesos va dirigido a obtener los mejores procesos industriales.

C.- SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS

La simulación se puede definir en términos generales como la representación de un fenómeno y/o proceso mediante modelos matemáticos. En el caso de los procesos químicos, dicha representación se basa en las leyes naturales o empíricas que los describen. Es evidente que cuanto mejor sea el modelo, más eficiente y confiable resulta la simulación y, por lo tanto, la interpretación del fenómeno. La simulación es una de las partes principales del análisis de procesos.

Los dos tipos más comunes de simulación de procesos son los relativos a la simulación en estado estacionario y la simulación dinámica de procesos. El primero consta del estudio y representación de un proceso a régimen permanente, en el que se contemplan situaciones dentro de los límites considerados como normales en su diseño y operación. Con la simulación en estado estacionario se obtienen los balances de materia y energía del proceso, a partir de los cuales es posible obtener las dimensiones de los equipos y hacer una evaluación económica.



Figura 2.3: Etapas de la simulación de procesos

La simulación dinámica consiste en representar aquellas situaciones poco frecuentes o fuera de los límites normales de operación de un proceso químico. Tales situaciones son típicas del arranque o paro de una planta, de la operación de la misma bajo condiciones de emergencia o para el diseño de las estrategias de control. En estos tres casos se estudia el comportamiento de las variables de proceso con respecto al tiempo.

Debido a que la representación de un proceso químico con modelos matemáticos es una tarea que requiere una gran cantidad de cálculos numéricos, es imprescindible la ayuda de

una computadora para realizarlos. El avance en materia de computación ha permitido que se vaya ampliando el margen de cobertura de la máquina sobre el proceso en cuestión; de hecho, hoy en día se utilizan grandes redes de cómputo para abarcar procesos químicos enteros. A esto se le conoce como Sistema de Simulación de Procesos (Process Flowsheeting).

Un sistema de simulación de procesos se define (Evans, 1981) como aquél que acepta información sobre un proceso al nivel del diagrama de flujo del mismo y desarrolla los análisis relativos a su desempeño, diseño y operación. Las entradas típicas de un sistema de simulación de procesos son las que están descritas en el diagrama de flujo de proceso; las salidas que se obtienen son las condiciones de todas las corrientes del sistema, los parámetros y dimensiones de los principales equipos de proceso, y la evaluación económica del mismo.

Todos los sistemas de simulación de procesos contienen cinco elementos principales: Modelos, Algoritmos, Soporte computacional (lógico o "software" y físico o "hardware"), Interfase con el usuario y Aplicaciones.

Los *modelos* utilizados por un sistema de simulación son todas las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, ecuaciones de velocidad de reacción, correlaciones de propiedades termodinámicas, relaciones de conexión y restricciones de diseño y control. Estos modelos matemáticos se representan por ecuaciones algebraicas y/o diferenciales que definen el proceso. Lo más importante de estos modelos es que deben ser apropiados en términos de rigor, nivel de detalle, precisión, validez y generalidad para las aplicaciones que se desean.

Para que un modelo sea adecuado, es necesario que se entiendan los principios que rigen al proceso que se desea describir, ya que de esta manera se puede saber con exactitud la validez de la información que arroja el modelo. Cuanto más preciso sea el modelo, mejor es la representación de la realidad que se obtiene. En ocasiones no es necesario utilizar modelos muy

exactos ya que la información que se quiere obtener es global o aproximada, y en consecuencia el tiempo de cómputo para estos casos es considerablemente menor.



Figura 2.4: Elementos de un Sistema de Simulación de Procesos

Los *algoritmos* resuelven los problemas matemáticos que generan los modelos. De hecho, un algoritmo es el conjunto de operaciones que nos permiten llegar a este fin. El tipo de problema matemático que se presenta en simulación es muy variable; contiene ecuaciones algebraicas (lineales y no lineales) y diferenciales. Por lo tanto, se requiere que los algoritmos sean robustos, tan generales como sea posible, eficientes en términos de ejecución y almacenamiento, transparentes y elegantes. En ocasiones, estas necesidades se contraponen por lo que se debe hacer una elección adecuada para que los algoritmos exploten al máximo los recursos disponibles.

Para la simulación de procesos químicos se han desarrollado básicamente dos clases de algoritmos que se describirán con más detalle en la siguiente sección. Éstas son: la Orientación Modular y la Orientación hacia las Ecuaciones.

El siguiente bloque dentro del sistema de simulación de procesos es el relativo al *soporte computacional*. Las dos partes que lo conforman son el soporte lógico o "software" y el soporte físico o "hardware". Ambos incluyen todos los implementos necesarios para que se

lleven a cabo los algoritmos en una computadora, bajo cierto sistema operativo. Dentro del soporte computacional se encuentra todo lo relativo a los programas, lenguajes de programación, codificación, estructura de datos, interfase con el sistema de archivo, documentación y arquitectura del sistema. Los requerimientos de un buen soporte computacional se basan en que debe ser fácilmente interpretado, manejado y tan transportable como sea posible.

El penúltimo elemento del sistema de simulación lo constituye la *interfase con el usuario*. Ésta incluye el lenguaje de entrada por medio del cuál el usuario describe su problema particular; los reportes que resumen los resultados; la documentación adecuada para el uso del sistema y los protocolos para la interacción con otros programas y sistemas. Una buena interfase con el usuario debe ser capaz de aceptar los datos de entrada en la manera más natural posible y generar los resultados de la forma más útil y práctica para el usuario.

Las *aplicaciones* son el último elemento dentro del sistema de simulación. Son, de hecho, la razón de existir de dicho sistema. Las adecuadas aplicaciones del sistema de simulación justifican todo el desarrollo del mismo; es necesario conocer de antemano algunas de las formas en que un sistema de simulación se va a utilizar para sentar las bases sobre las cuales se diseñan todos los elementos anteriores. Evidentemente se ha tratado de hacer los diferentes sistemas de simulación de forma que se puedan aplicar en un rango muy amplio de situaciones; los progresos en materia de computación (tanto en la parte lógica como en la física) han permitido que los diferentes sistemas actuales presenten cada día mayor versatilidad en sus aplicaciones.

D.- SISTEMAS DE COMPUTO EN LA INGENIERIA DE PROCESOS

En la última década, ha habido un aumento casi explosivo en el uso de los sistemas de diseño auxiliado por computadora (CAD). Se estima que hoy en día el 50% de las partes mecánicas de las diversas máquinas y equipos se diseñan con sistemas de este tipo. La Ingeniería química, desde el punto de vista del diseño de procesos, no utiliza los sistemas CAD por las razones que se verán más adelante.

Típicamente un buen sistema CAD sirve para elaborar el modelo de alguna pieza mecánica; puede calcular esfuerzos, peso y costos de manufactura. Cuando el diseñador ha terminado su trabajo, el sistema CAD es capaz de producir una serie de planos y dibujos necesarios para la construcción de la pieza diseñada. En cuanto a sistemas de computación, un paso más adelante lo constituyen los denominados sistemas de manufactura auxiliada por computadora (CAM). Éstos toman la información que se produce en el CAD y por medio de máquinas digitalmente controladas y operadas, y procesos de ensamblado automáticos, pueden elaborar al menos el prototipo de la pieza diseñada.

Ahora bien, debido a las limitaciones de los sistemas CAD, la Ingeniería química ha tenido que recurrir a otros sistemas para el diseño de procesos. Los llamados sistemas de diseño de procesos auxiliados por computadora (CAPD) son aquellos que reciben, como información a la entrada, el diagrama de flujo del proceso y el ingeniero puede desarrollar la simulación y el análisis del proceso con estos sistemas. La información de salida de los CAPD es el diseño del proceso, incluyendo la configuración del mismo, la dimensión y patrón de funcionamiento de los equipos más importantes; los balances de materia y energía completos y un estimado de la economía del proceso.

El sistema análogo al CAM dentro de la Ingeniería de procesos es el CAPM (sistema de operación de procesos auxiliada por computadora). Éste utiliza el mismo modelo del proceso

empleado en el diseño como una ayuda en el manejo de las operaciones de la planta una vez arrancada.

La principal diferencia entre el sistema tradicional CAD/CAM y las aplicaciones a la ingeniería de procesos CAPD/CAPM, es que el primero se refiere al diseño de un producto mientras que el segundo se encarga del diseño del proceso que hace el producto. La diferencia es tan grande que amerita el manejo de dichos sistemas por separado.

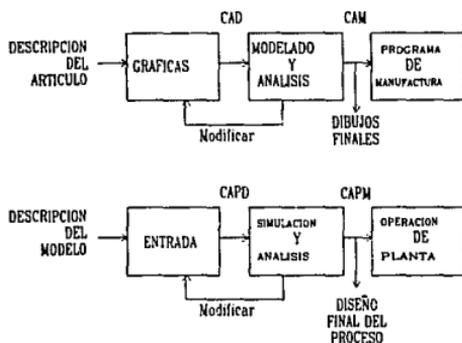


Figura 2.5: Flujo de información en los sistemas CAD y CAPD

En los sistemas CAD/CAM, la apariencia física del producto en cuestión es de central importancia. Los dibujos y planos son el principal medio de comunicación; por esto, dichos sistemas tienen una capacidad considerable para elaborar gráficas. Los cálculos de que son capaces estos sistemas son tales que las subrutinas no son muy complicadas si se comparan con aquellas relacionadas con los cálculos de un proceso químico.

Por otro lado, lo central y más importante en los sistemas CAPD/CAPM lo constituye la estructura y diagrama de flujo del proceso ya que representan las interrelaciones entre los flujos de materia y energía del mismo. En este caso los medios de comunicación los constituyen

precisamente los balances de materia y energía. La parte gráfica no es tan importante y se utiliza únicamente como una herramienta para apreciar el diagrama de flujo del proceso o algún otro aspecto del mismo. Los cálculos de que son capaces estos sistemas son de un alto nivel de complejidad, ya que manejan modelos matemáticos muy elaborados. Es necesario que tengan subrutinas eficientes con las que se puedan desarrollar enormes cálculos en poco tiempo.

Las aplicaciones del sistema CAPD se han venido desarrollando cada vez con más fuerza. La simulación de procesos es la rama de la ingeniería que más utiliza estos sistemas; de hecho, la arquitectura de los mismos viene dada por los requerimientos surgidos en las áreas de simulación y diseño de procesos químicos.

Desde el punto de vista computacional, un sistema de simulación es un típico sistema CAPD cuyo funcionamiento está estructurado bajo alguno de los enfoques que se describen en la siguiente sección.

E.- ENFOQUES DE LOS SISTEMAS DE SIMULACION

El primer problema a resolver en la simulación de procesos en estado estacionario es el de largos sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. En esta sección se describen las diferentes orientaciones encaminadas a resolver estos sistemas. El punto de partida para la simulación en estado estacionario es el diagrama de bloques que representa los modelos de todas las operaciones unitarias involucradas en el proceso; en dichos modelos se encuentran todas las ecuaciones que se deben resolver. Existen dos diferentes orientaciones para resolver las ecuaciones generadas por los modelos: la Orientación Modular y la Orientación hacia Ecuaciones.

Las ecuaciones que describen a un proceso son independientes de la orientación que se utilice para resolverlas; lo que varía es la manera en que estas ecuaciones son manejadas y

resueltas para llegar a la solución final del sistema. Es muy común encontrar que un proceso se puede describir adecuadamente por algunos cientos de ecuaciones; o, en ocasiones, el número de éstas puede sobrepasar las cien mil.

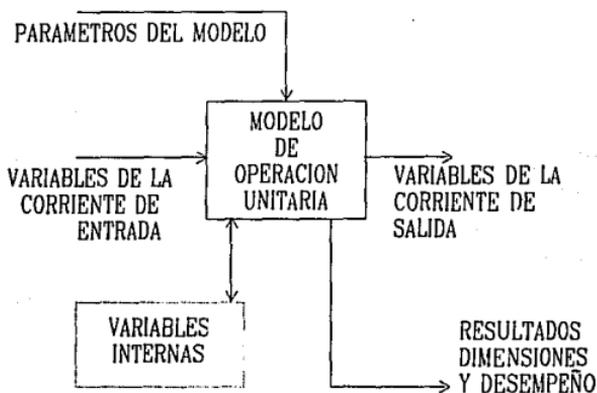


Figura 2.6: Modelo de operación unitaria

Por lo anterior, es conveniente saber la estructura del sistema de ecuaciones con el fin de acomodarlo de manera que su manejo sea más rápido y eficiente.

Los métodos actuales de solución de matrices completas no se pueden utilizar con eficiencia en sistemas de ecuaciones tan grandes; por ello, se han desarrollado técnicas de solución de matrices dispersas (lineales y no lineales) que pueden manejar con más facilidad los sistemas de ecuaciones que describen un proceso químico.

A continuación se presentan las dos orientaciones ya mencionadas con sus respectivos enfoques:

ORIENTACION

Modular

Hacia las ecuaciones

ENFOQUE

Modular secuencial

Modular simultáneo

Con rompimiento

Con lineartización simultánea

ORIENTACION MODULAR:

En la Orientación Modular un proceso químico se representa por la unión de diferentes módulos, cada uno describiendo a una operación unitaria en particular. Las ecuaciones que generan cada uno de estos módulos se pueden resolver de dos maneras: a nivel del diagrama de flujo (proceso completo) o por bloques (cada módulo por separado).

Si las ecuaciones se resuelven para cada módulo por separado (enfoque modular secuencial), los valores de las variables de las corrientes de salida de una operación unitaria se calculan a partir de los valores conocidos de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los equipos. En cambio, si los cálculos son al nivel del diagrama de flujo (enfoque modular simultáneo), se deben resolver las ecuaciones que describen la conexión entre cada módulo y las especificaciones de diseño.

La orientación modular ha sido ampliamente utilizada en los diferentes sistemas de simulación y esto se debe a que presenta ciertas ventajas que se resumen a continuación:

-Es una orientación fácilmente comprendida por el usuario del sistema ya que existe una gran semejanza entre el diagrama de flujo de proceso y el modelo implementado por la computadora.

-Debido a que cada módulo se calcula por separado, es posible utilizar algoritmos especializados para cada uno de ellos, lo que favorece la robustez y eficiencia en cada módulo.

Además, cada bloque puede generar sus propios valores iniciales que se requieren para llegar a la solución de las ecuaciones que lo describen.

-Se pueden realizar programas aislados para cada operación unitaria, lo que añade versatilidad al sistema ya que dichos programas se pueden utilizar en diferentes arreglos de módulos.

-Con este tipo de orientación es factible obtener información de puntos muy localizados del proceso. Es decir, se pueden apreciar los comportamientos de las diferentes operaciones unitarias aun si la simulación total no ha llegado a su fin o no converge. También se pueden detectar los diferentes errores y fallas del sistema de manera muy simple.

La principal desventaja, sin embargo, que presenta la orientación modular es que la convergencia en la solución de los sistemas de ecuaciones es muy lenta debido a las grandes matrices del proceso y a los ciclos iterativos que se generan con las recirculaciones que la gran mayoría de los procesos químicos actuales contienen.

Como se mencionó anteriormente, existen dos enfoques dentro de la orientación modular: el enfoque modular secuencial y el enfoque modular simultáneo. Es conveniente aclarar que el segundo también ha sido tratado por algunos autores (Evans, 1981) como una mezcla entre las dos diferentes orientaciones. El presente trabajo se cataloga dentro de la orientación modular.

Enfoque modular secuencial:

El enfoque modular secuencial utiliza una subrutina de computadora para representar a cada operación unitaria o bloque del diagrama de flujo del proceso. El encargado de ir llamando a estas subrutinas en el orden en el que aparecen en el diagrama de flujo es un programa

principal. Cada subrutina se diseña de manera que sea capaz de calcular los valores de las variables de las corrientes de salida en función de los valores de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los equipos.

Cuando los diagramas de flujo no tienen recirculaciones, los cálculos se hacen en forma secuencial sin ningún tipo de iteración entre dos o más equipos de proceso. Pero como lo común en casi todos los procesos químicos es tener corrientes de recirculación, el cálculo se complica notablemente. Una corriente de recirculación introduce cálculos iterativos ya que está relacionada tanto con la entrada como con la salida de un módulo determinado. Cuando se encuentran, en el cálculo, módulos con recirculaciones, es necesario estimar los valores iniciales para dichas corrientes; estas estimaciones las determina el usuario o el sistema basado en ciertas reglas heurísticas.

Como se puede ver, para resolver la simulación con este enfoque, es necesario romper o cortar el diagrama de flujo y seleccionar las denominadas "corrientes de corte", que son aquellas que convierten el proceso en un sistema acíclico si se les estiman valores iniciales. Una vez determinadas las corrientes de corte del proceso, se debe determinar la mejor secuencia para realizar los cálculos. Los diferentes sistemas de simulación presentan algunos algoritmos ya implementados tanto para escoger las corrientes de corte como para establecer la mejor secuencia de cálculo.

Las ecuaciones que describen las conexiones entre los diferentes módulos se manejan de manera que el programa principal transfiere los valores de la salida de un módulo como valores de entrada del siguiente módulo. Las especificaciones simples, tales como los datos de las corrientes de entrada y los parámetros de equipos, se manejan fácilmente, transfiriendo estos valores directamente al módulo que así lo requiera. Sin embargo, otras especificaciones, tales como las de diseño y otras que afectan directamente a las variables de las corrientes de salida, no pueden ser introducidas en forma directa y requieren el uso de ciclos de control.

En problemas de diseño se utiliza lo que se conoce como simulación controlada en la que el proceso se simula en forma repetitiva hasta que se satisfagan las especificaciones de diseño. De esta manera, se dice que se manejan dos tipos de ciclos: aquellos relacionados con las recirculaciones y los derivados de las especificaciones de diseño. Ambos ciclos son iterativos, lo que hace que los cálculos se vuelvan más largos y complicados.

Para el manejo de los ciclos existe cierta jerarquía: los ciclos de control, con los que se logra la convergencia de las especificaciones de diseño, son los más externos. En su interior se encuentran los ciclos necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de recirculación (corrientes de corte). Dentro de los anteriores están los ciclos específicos de cada operación unitaria y finalmente se manejan los ciclos destinados a la estimación de propiedades termofísicas

La tendencia actual en los sistemas de simulación consiste en obtener el resultado óptimo para cualquier problema. En el enfoque modular secuencial, la optimización se llevaría a cabo en otro ciclo exterior, lo que complica de manera considerable los cálculos y requiere de mayor uso del soporte computacional.

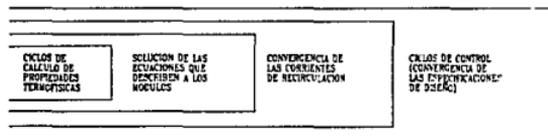


Figura 2.7: Ciclos múltiples de iteración

Actualmente el enfoque modular secuencial no resulta muy eficiente puesto que se requiere mayor optimización en los diferentes procesos. Éstos, además, se han vuelto más complicados debido al aprovechamiento necesario de materias primas y energía, lo que introduce mayores ciclos por recirculaciones y control.

Enfoque Modular Simultáneo:

El enfoque modular simultáneo ha demostrado ser uno de los más eficientes y sus aplicaciones se han venido desarrollando últimamente. Surge de las ideas presentadas en los trabajos en los que ha sido llamado enfoque de doble rompimiento o "Two tier" (Rosen, 1962); o como una diferente aproximación a la convergencia del enfoque modular secuencial (Perkins, 1979).

En el enfoque modular simultáneo se conserva la estructura de módulos descrita para el enfoque anterior. La variante consiste en que las ecuaciones de las corrientes de conexión, así como las variables de diseño, se resuelven simultáneamente y no en ciclos diferentes.

Dentro de este enfoque se utilizan dos tipos de modelos: simples y rigurosos. Los modelos rigurosos son aquellos que describen una operación unitaria con el modelo completo de ecuaciones (como en el enfoque modular secuencial), sin embargo, en el modular simultáneo éstos se utilizan para determinar parámetros dentro de la otra clase de modelos: los simples (que constan de un juego aproximado de ecuaciones que describen a la operación unitaria). Los modelos simples se resuelven con cualquier técnica de solución de sistemas de ecuaciones para obtener todos los valores de las variables de las corrientes de proceso con las que es posible, si así se plantea, volver a llamar a los modelos rigurosos; esto último se discute a continuación.

Una vez resuelto el modelo simple, se obtienen valores aproximados para cada variable de las corrientes de proceso; con ellos se verifica la convergencia. Si ésta no se obtiene, existen dos posibilidades: modificar los valores de los parámetros en el modelo simple o volver a llamar al modelo riguroso para obtener valores mucho más precisos. El procedimiento acaba cuando no se obtienen cambios importantes (bajo cierta tolerancia) en los valores de los parámetros del modelo simple.

Cuando se modifican los valores de los parámetros en el ciclo interno es porque se plantea lo que se conoce como un problema de optimización reducido, en el que el modelo simple contiene las restricciones de igualdad. El modelo simple se encarga de resolver el problema de optimización reducido para los parámetros producidos por los modelos rigurosos.

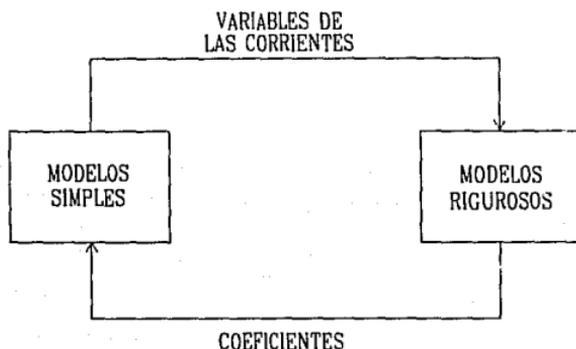


Figura 2.8: Concepto básico del enfoque modular simultáneo

El éxito del enfoque modular simultáneo radica en tener modelos simples eficientes. Estos pueden ser lineales cuyos coeficientes son obtenidos por medio de una perturbación numérica de los modelos rigurosos. También pueden ser modelos no lineales, representados comúnmente por modelos aproximados de ingeniería. De cualquier modo, el modelo simple genera un sistema de ecuaciones de simulación equivalente al del modelo riguroso, pero con menos variables; también utilizan correlaciones sencillas para el cálculo de propiedades termofísicas. Es por esta "sencillez" que se puede hablar de un problema reducido, cuya optimización (como se mencionó anteriormente) es más fácil de llevar a cabo gracias a que requieren menos recursos computacionales.

El hecho de que se resuelva un sistema de ecuaciones que describe a todo el proceso hace que este enfoque haya querido ser clasificado como una mezcla entre el enfoque modular secuencial y los enfoques de la orientación hacia las ecuaciones que se describirán más adelante.

Una de las ventajas que presenta este enfoque frente al modular secuencial es el hecho de que las especificaciones de diseño se calculan paralelamente a todo el proceso, lo que elimina los ciclos iterativos relativos a los ciclos de control. Adicionalmente, el enfoque modular simultáneo puede aprovechar la gran cantidad de trabajo computacional que se ha desarrollado para el enfoque modular secuencial: se tienen ya probados los diferentes modelos de las operaciones unitarias y las técnicas de estimación de valores iniciales por medio de reglas heurísticas. La estructura que maneja este enfoque es muy similar a la forma en que el ingeniero químico resuelve los problemas: lleva a cabo análisis preliminares aproximados y luego los verifica con modelos rigurosos.

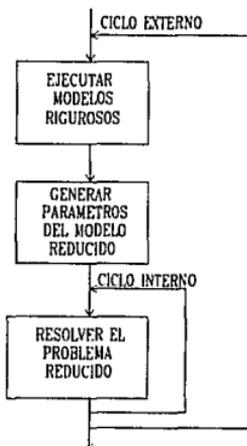


Figura 2.9: Ciclos interno y externo del enfoque modular simultáneo

Pero el éxito o fracaso del enfoque modular simultáneo depende de los métodos empleados para resolver los sistemas de ecuaciones de todo el proceso. Si bien estos sistemas son "simples", pueden contener un gran número de ecuaciones para las que se requiere un buen método de convergencia. Actualmente los sistemas de simulación tienden a integrar el enfoque modular simultáneo en su estructura. Ésto se debe a las grandes ventajas antes mencionadas y al poco éxito que ha tenido hasta el momento la orientación hacia las ecuaciones aplicada a procesos complejos.

ORIENTACION HACIA ECUACIONES:

La idea principal de la orientación hacia las ecuaciones es la de resolver todas las ecuaciones que describen al proceso químico (operaciones unitarias, corrientes de conexión y especificaciones de diseño) simultáneamente como un enorme sistema de ecuaciones no lineales que se puede representar matemáticamente como:

$$\text{Resolver} \quad F(X,U) = 0$$

$$\text{con} \quad G(X,U) = 0$$

donde: X es el vector de las variables de estado (dependientes).

U es el vector de las variables de decisión (independientes).

$F(X,U)$ son las ecuaciones que modelan al proceso.

$G(X,U)$ son las restricciones de igualdad o desigualdad del proceso.

Las variables de decisión son los parámetros de equipos y variables de corrientes de entrada que usualmente se especifican en las diferentes operaciones unitarias. Las variables de estado son las variables internas y las relativas a las corrientes de salida de las operaciones unitarias.

Alternativamente, el problema se puede formular matemáticamente como un problema de optimización:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & H(X,U) \\ \text{con} & F(X,U) = 0 \\ & G(X,U) = 0 \end{array}$$

en donde $H(X,U)$ es la función objetivo y $F(X,U)$ y $G(X,U)$ son los mismos conjuntos de ecuaciones planteados anteriormente, con algunas restricciones adicionales inherentes a la optimización. Para este tipo de problemas las variables de decisión ya no se especifican arbitrariamente, sino que se seleccionan con el fin de minimizar la función objetivo.

En los últimos años se ha manejado el hecho de que un problema de diseño se formula más naturalmente si se trata como una optimización. Sin embargo, la dificultad que se ha presentado es la falta de algoritmos eficientes para manejar adecuadamente grandes cantidades de restricciones de igualdad.

La orientación hacia las ecuaciones no ha sido muy utilizada en los sistemas de simulación comerciales porque presenta varias desventajas. En primer lugar, ha sido muy complicado encontrar algoritmos que puedan resolver de forma general los sistemas tan grandes de ecuaciones que genera un proceso químico (decenas de miles de ecuaciones). Además, es posible que aparezcan inconsistencias termodinámicas en el sistema de ecuaciones planteado, lo que impide su solución o lleva a soluciones físicamente inexistentes. En segundo lugar, se requiere de valores iniciales razonables, los cuales son difíciles de obtener sin un recorrido secuencial a través de las diferentes operaciones unitarias del proceso. Por último, la orientación hacia las ecuaciones no permite un fácil diagnóstico de los posibles problemas que resulten de su operación; además es imposible obtener resultados parciales ya que todo el proceso se maneja simultáneamente.

Dentro de la orientación hacia las ecuaciones se manejan dos enfoques principalmente, mismos que se describen brevemente a continuación:

Enfoque basado en las ecuaciones con rompimiento:

En este enfoque se suponen los valores iniciales para un número suficiente de variables como para permitir el cálculo directo de las variables restantes. Con éstos se calculan los nuevos valores de las variables supuestas utilizando ciertos procedimientos de sustituciones sucesivas, siempre y cuando las ecuaciones que las contengan estén en forma explícita. Si este no fuera el caso, los residuales en las ecuaciones que contienen las variables supuestas pueden utilizarse para aplicar algún otro método de evaluación de raíces.

La ventaja que presenta este enfoque es que un sistema del tipo ecuación-variable muy extenso, puede ser reducido a un sistema mucho menor del tipo ecuación supuesta - variable supuesta, lo que facilita su solución simultánea.

Enfoque basado en las ecuaciones con linearización simultánea:

Este enfoque se basa en la linearización simultánea de todas las ecuaciones y la iteración sobre todas las variables, utilizando para ello métodos del tipo Newton-Raphson, Quasi-Newton o alguna combinación de ambos. Las ecuaciones se pueden resolver en cualquier orden ya que todas las variables se manejan al mismo tiempo; ésto evita el problema de flujo de información de los enfoques modulares.

La principal dificultad que presenta este enfoque es que genera un sistema muy extenso de ecuaciones, lo que implica un requerimiento computacional muy alto en su solución. Además, las técnicas conocidas para la solución de matrices dispersas todavía no son capaces de resolver eficientemente sistemas de estas dimensiones en forma simultánea. Como en el enfoque anterior, es posible (y de hecho, frecuente) que se obtengan soluciones

matemáticamente correctas pero físicamente inexistentes debido a la facilidad que se da para formular incorrectamente las ecuaciones descriptivas del proceso. Por lo anterior, es necesario que los sistemas de simulación que incorporen este procedimiento tengan un generador de ecuaciones de proceso realmente eficiente.

CAPITULO 3

PLANTA CATALITICA DE TULA (FCC)

A.- INTRODUCCION.

El proceso químico que se aborda en el presente trabajo es el correspondiente a la sección de recuperación de vapores de la refinería de Tula. En esta parte del capítulo se presentan las principales características del proceso para el cual se lleva a cabo la simulación así como algunas de las secciones previas: la parte relativa a la reacción catalítica y la fraccionadora principal. De estas dos secciones se habla en términos más generales con el fin de proporcionar una idea del origen del proceso simulado, y situarlo dentro de un contexto más amplio.

Acerca del proceso simulado se describirán ciertos detalles técnicos necesarios para una mejor comprensión del mismo en el momento de la simulación. A grandes rasgos, la recuperación de vapores de una planta catalítica consiste en separar hidrocarburos ligeros, desde etano hasta gasolinas, bajo ciertas condiciones de pureza. Anexo a estas plantas recuperadoras de vapores se encuentran diferentes procesos de eliminación de contaminantes, como ácido sulfhídrico; dichos procesos sólo serán mencionados y su simulación no se llevará a cabo.

B.- DESINTEGRACION CATALITICA.

La desintegración catalítica es uno de los procesos más ampliamente utilizados dentro de las refinerías para convertir aceites pesados en gasolinas y productos ligeros, con más alto valor en el mercado por su mayor octanaje. Originalmente la desintegración se llevaba a cabo térmicamente pero estos procesos han sido desplazados por los catalíticos debido a que con éstos últimos se obtienen gasolinas de más alto octanaje y menos residuos de componentes pesados y gases insaturados.

Los procesos de desintegración catalítica utilizados hoy en día se pueden clasificar dentro de dos categorías principales: unidades de lecho móvil y unidades de lecho fluidizado. Existe un gran número de modificaciones para cada una de las categorías que dependen del diseñador o de la compañía constructora pero, a grandes rasgos y dentro de cada categoría, las operaciones son muy similares. El proceso conocido como desintegración catalítica Termofor (TCC) es representativo de las unidades de lecho móvil mientras que el desintegrador catalítico fluidizado (FCC) es el representante más común de las unidades de lecho fluidizado; sobre este último se profundizará más adelante ya que es el proceso existente en la refinería de Tula.

Los catalizadores empleados en los dos tipos de procesos son químicamente similares pero con diferencias en su estructura física. Las unidades de lecho móvil utilizan cilindros o esferitas de aproximadamente 0.3 a 0.7 cm de diámetro, y las unidades de lecho fluidizado usan partículas con un tamaño promedio de 50 micras.

El proceso de desintegración produce carbón o coque que se queda dentro del catalizador, disminuyendo su actividad. Para mantener esta actividad en un nivel útil, es necesario regenerar el catalizador quemando el coque con aire. Por lo anterior, el catalizador tiene que ser continuamente removido del reactor y llevado a un regenerador para ser devuelto otra vez al lugar de reacción. La reacción catalítica es endotérmica y la de regeneración exotérmica. Algunas unidades son diseñadas para aprovechar el calor de regeneración en la reacción catalítica y para llevar la mezcla de alimentación a la temperatura de reacción.

Los diagramas de flujo de ambos procesos son similares: el gasóleo caliente se pone en contacto con el catalizador ya sea en el elevador de la alimentación o en el reactor. Conforme avanza la reacción, el catalizador se desactiva por la formación de carbón en su superficie. El catalizador y los vapores de hidrocarburos se separan mecánicamente y el gasóleo que permanece sobre el catalizador se remueve por medio de agotamiento con vapor

antes de que las partículas catalíticas entren al regenerador. Los vapores de hidrocarburos se obtienen por la parte superior del equipo y son enviados a una torre fraccionadora para iniciar su separación.

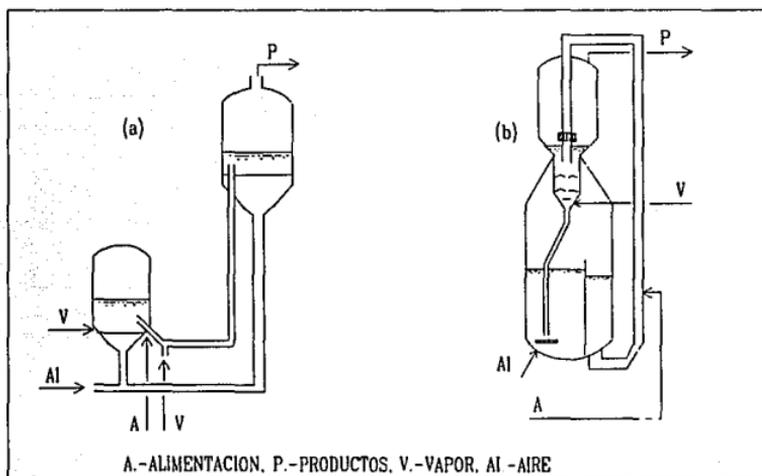
El catalizador gastado fluye en el regenerador y se vuelve a activar quemando los depósitos de coque con aire. La temperatura del regenerador es controlada con mucha precaución con el propósito de no desactivar al catalizador por sobrecalentamiento. Esto se hace generalmente mediante el control del flujo de aire para producir la relación CO_2/CO deseada en la salida ya que la conversión de CO en CO_2 no ayuda a remover el coque sino que sólo produce calor en exceso. Los gases de combustión y el catalizador se separan por medio de ciclones; posteriormente se limpia el catalizador con vapor para quitar el oxígeno antes de entrar en contacto de nuevo con la alimentación del gasóleo.

C.- UNIDADES FCC.

Los procesos FCC emplean el catalizador en forma de partículas muy finas que se comportan como un fluido al ser acarreadas por un vapor. El catalizador fluidizado circula continuamente entre la zona de reacción y la de regeneración, y actúa como vehículo para transferir calor desde el regenerador hasta la alimentación del gasóleo en el reactor. Dos clases de unidades FCC se utilizan comúnmente: las denominadas "lado a lado", donde el reactor y el regenerador son recipientes separados que se colocan uno junto al otro; y los apilados, en los que el reactor se coloca sobre el regenerador (Fig. 3.1).

Una de las diferencias más importantes entre los distintos procesos FCC es la ubicación y control de la reacción catalítica. Hasta 1965, las unidades se diseñaban de modo que había un lecho de catalizador en fase densa en el recipiente de reacción, lo que provocaba que la mayoría de la reacción ocurriera en ese lugar. La cantidad de desintegración se

controlaba variando la profundidad del lecho en el reactor (tiempo) y la temperatura. Aunque se sabía que parte de la reacción ocurría en el elevador de la alimentación ya que en ese lugar la actividad del catalizador y la temperatura están en sus niveles más altos, no se hacían intentos por regular la reacción modificando las condiciones de dicho elevador. Con la llegada de catalizadores de zeolita más reactivos, la cantidad de desintegración producida en el elevador o línea de transmisión aumentó a niveles que requerían cambios operacionales en las unidades existentes.



**Figura 3.1: Unidades de desintegración catalítica FCC
(a) Modelo "lado a lado", (b) Modelo apilado tipo "riser"**

Como resultado de lo anterior, las unidades construidas durante los últimos años han sido diseñadas para operar con un mínimo de reacción en el lecho del reactor y con más control de reacción variando la velocidad de circulación del catalizador. Otras unidades antiguas se han modificado para maximizar y controlar la reacción en el elevador.

En términos generales, una unidad FCC opera de la siguiente manera: la mezcla fresca y las corrientes de recirculación son precalentadas con intercambiadores de calor o un horno para entrar a la unidad en la base del elevador, en donde se mezclan con el catalizador caliente proveniente del regenerador. El calor del catalizador se aprovecha para vaporizar la alimentación y llevarla a la temperatura de reacción. La mezcla de catalizador y vapores de hidrocarburos viaja a través del elevador rumbo a los reactores. Las reacciones de desintegración o rompimiento comienzan cuando la alimentación entra en contacto con el catalizador caliente en el elevador y continúan hasta que los vapores son separados del catalizador al final del reactor. Los vapores de hidrocarburos se envían hacia una serie de separadores en donde se obtienen productos líquidos y gaseosos.

El catalizador que abandona el reactor es conocido como catalizador agotado ya que contiene hidrocarburos adsorbidos sobre su superficie. Éstos se eliminan con vapor antes de que el catalizador entre al regenerador, dentro del cual se quema el carbón depositado con aire, controlándose la temperatura mediante la variación del flujo del mismo. El calor de combustión eleva la temperatura del catalizador arriba de 600°C y la mayor parte de este calor se transfiere al gasóleo fresco en la entrada del elevador.

Los gases de combustión que abandonan el regenerador contienen una gran cantidad de monóxido de carbono que se oxida en un horno de CO para dar dióxido de carbono con lo que se recupera algo de energía. Los gases calientes pueden usarse para generar vapor, o para activar turbinas que generen energía eléctrica.

D.- PROCESO EXISTENTE EN LA REFINERIA DE TULA

El proceso que actualmente se utiliza en la refinería de Tula consta de varias secciones que se describen a continuación. En la figura 3.2 se pueden apreciar las operaciones de la planta catalítica.

EL CONVERTIDOR CATALITICO

El desintegrador o convertidor de la refinería de Tula es del tipo "riser" que consiste en un tubo elevador (reactor), un separador, un agotador, un regenerador y los medios de transporte para la circulación del catalizador.

El gasóleo fresco entra a la planta con una temperatura de 188°C proveniente de la planta combinada o bien a 65°C desde los tanques de almacenamiento. La carga fresca se bombea a través de intercambiadores de calor y de un calentador en donde adquiere la temperatura requerida para el inicio de la reacción. La corriente de recirculación se agrega al gasóleo fresco y el conjunto se manda al elevador de desintegración.

La reacción ocurre principalmente en la parte vertical del elevador, después de la cuál la mezcla fluye hacia la línea horizontal para descender finalmente hasta la parte inferior de la cámara de separación. En este lugar se lleva a cabo una separación burda del catalizador y de los vapores mediante un separador ranurado. La mayor parte de los vapores fluyen horizontalmente por las ventanas laterales del separador mientras que la mayoría del catalizador fluye hacia abajo por el fondo abierto del elevador (Fig. 3.3).

Los vapores de hidrocarburos desintegrados, inertes, vapor de dispersión y el vapor de agotamiento del catalizador entran a cuatro juegos de ciclones de dos pasos al salir del

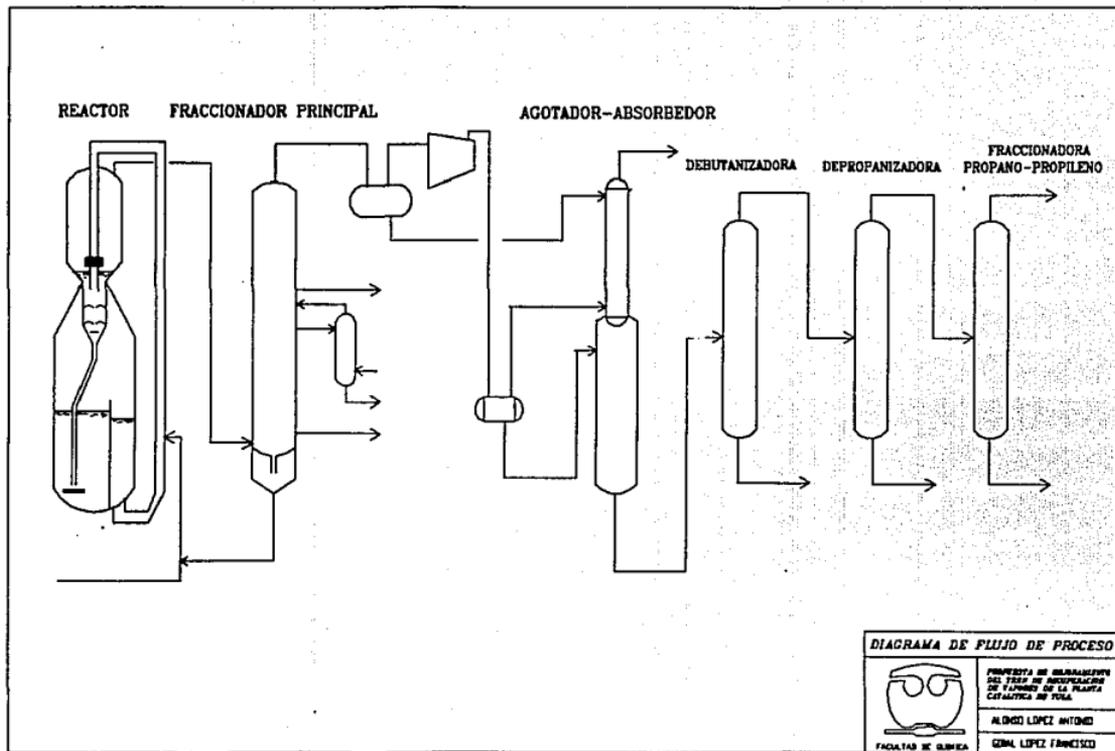
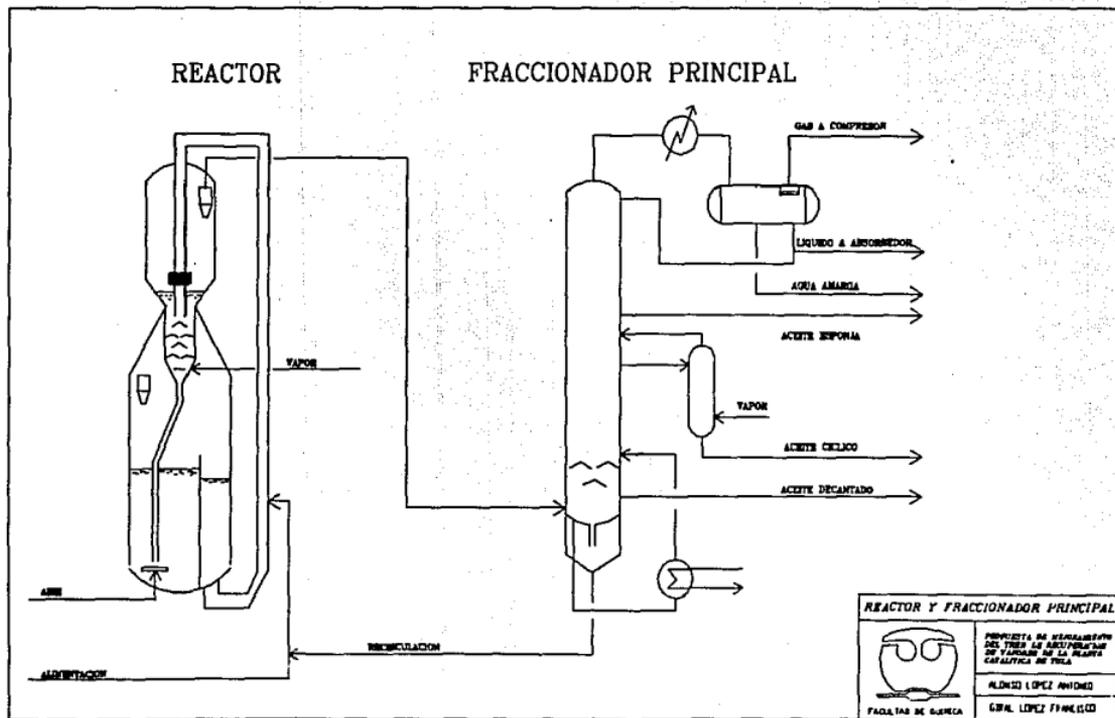


FIGURA 3.2
DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO DE LA PLANTA CATALITICA



separador. La función de dichos ciclones es la de separar el catalizador arrastrado por los vapores y regresarlo al fondo del separador.

El catalizador agotado que contiene el coque o carbón formado durante la reacción de desintegración entra al agotador que se localiza directamente abajo de la cámara de separación. Dentro de éste, el catalizador fluye hacia abajo mientras que el vapor de agotamiento lo hace en contracorriente; la función de este equipo es la de remover los restos de hidrocarburos ligeros que quedaron atrapados en el catalizador. Después de este paso, el catalizador pasa al regenerador, en donde el carbón depositado durante la desintegración se quema con aire hasta alcanzar un contenido muy bajo de coque en el catalizador regenerado. El catalizador regenerado se dirige de nuevo hacia la parte inferior del elevador para unirse con la carga fresca y la recirculación.

SECCION DE LA FRACCIONADORA

La fraccionadora principal es la encargada de separar los productos del convertidor en hidrocarburos ligeros y aceites cíclicos ligeros y decantados. Es la primera separación de los productos desintegrados en el reactor. También cuenta con una sección de recuperación de restos de catalizador (Fig. 3.3).

Los vapores efluentes del convertidor consisten en hidrocarburos desintegrados catalíticamente, vapor y gas inerte. Estos vapores entran por el fondo de la fraccionadora y fluyen en contracorriente con el producto de los fondos de la misma fraccionadora, que fue recirculado a cierta altura de la torre. La función de esta recirculación es la de enfriar los vapores entrantes y condensar el producto de aceite decantado que forma la corriente de fondos de la fraccionadora.

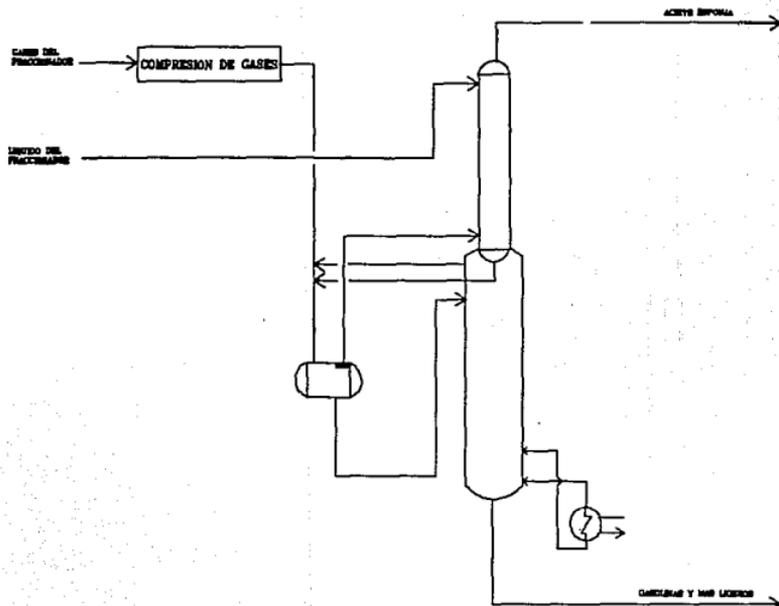
Por medio de extracciones laterales de la fraccionadora se obtiene el aceite decantado, el aceite cíclico y el aceite esponja. Los vapores del domo de la fraccionadora fluyen a condensadores enfriados con agua, obteniéndose corrientes de gases, hidrocarburos líquidos y agua amarga. La corriente de gases fluye al compresor de la sección de recuperación de vapores; los hidrocarburos líquidos se bombean a la misma sección y el agua amarga se dirige a un sistema de aguas amargas. El reflujo de la fraccionadora se hace con una fracción de los hidrocarburos líquidos.

SECCION DE RECUPERACION DE VAPORES

La sección recuperadora de vapores de una planta catalítica consiste en una serie de fraccionadoras que van separando los hidrocarburos ligeros en corrientes con una cierta pureza definida. Con excepción de la primera parte del tren (que se describe a continuación) las fraccionadoras en esta sección son torres de destilación de platos en las que se utilizan condensadores y rehervidores convencionales. Los principales productos que se obtienen en las separaciones son materia prima para otra gran cantidad de procesos. La gasolina es el producto final más importante, y por esto muchas de las plantas recuperadoras se enfocan a la obtención de más y mejores gasolinas.

La primera parte del tren de recuperación está formada por un agotador-absorbedor (Fig. 3.4). El absorbedor es una torre que está montada directamente sobre el agotador con una tapa sólida que divide las dos secciones. Como se mencionó anteriormente, del domo de la fraccionadora principal se obtienen hidrocarburos en fase líquida y gaseosa; la corriente líquida entra en la parte superior del absorbedor mientras que los gases son comprimidos y separados en dos fases: la fase gaseosa se alimenta al absorbedor en flujo ascendente de manera que fluye en contracorriente al líquido antes mencionado; y la segunda, que es la

AGOTADOR-ABSORBEDOR



AGOTADOR-ABSORBEDOR	
	PROYECTO DE RECONSTRUCCION DEL TRAMO DE ABSORCION DE VAPORES DE LA PLANTA CATALITICA DE PULA
	ALONSO LOPEZ ANTONIO
	DRAL LOPEZ FRANCISCO

FIGURA 3.4
AGOTADOR-ABSORBEDOR DE LA PLANTA CATALITICA

fracción condensada después de la compresión, es alimentada al agotador. La corriente del fondo del absorbedor se junta con la del domo del agotador y se recirculan hacia el separador de fases previo al agotador. La corriente del domo del absorbedor, rica en gases ligeros, es enviada a límites de batería. La corriente de los fondos del agotador se dirige hacia la torre debutanizadora.

La función principal de la torre debutanizadora es la de separar los butanos y componentes más ligeros, de los pentanos e hidrocarburos más pesados. La corriente que sale del fondo del agotador, rica en los componentes antes mencionados (principalmente pentanos y más pesados) se precalienta con la corriente de fondos de la debutanizadora y posteriormente se alimenta a la misma en un plato intermedio (los detalles técnicos de ésta y las siguientes secciones se especifican en el siguiente capítulo, en el cuál se presentan los resultados de la simulación de esta parte de la planta). La torre opera con un rehevador a base de vapor para los fondos y un condensador con agua de enfriamiento para la corriente del domo. Los productos del fondo de la debutanizadora, después de precalentar la alimentación, se dirigen a límites de batería; estos compuestos son tratados posteriormente para producir gasolinas.

Los productos del domo de la debutanizadora (butano y más ligeros) se bombean a una unidad de remoción de mercaptanos conocida como unidad MEROX; en ella se eliminan los contaminantes de azufre que contiene la corriente de proceso. Una vez "limpia" la corriente, se bombea hacia la torre depropanizadora, pero antes de llegar a ésta, se precalienta con la corriente de fondos de la depropanizadora (columna que no pertenece al tren de recuperación de vapores de la planta catalítica). Los medios de calentamiento y enfriamiento de la columna depropanizadora son los mismos que para la debutanizadora (vapor y agua respectivamente). El producto del fondo de la depropanizadora está constituido principalmente por butano y residuos de pentano o más pesados; esta corriente se dirige a límites de batería para ser tratada como gas LPG.

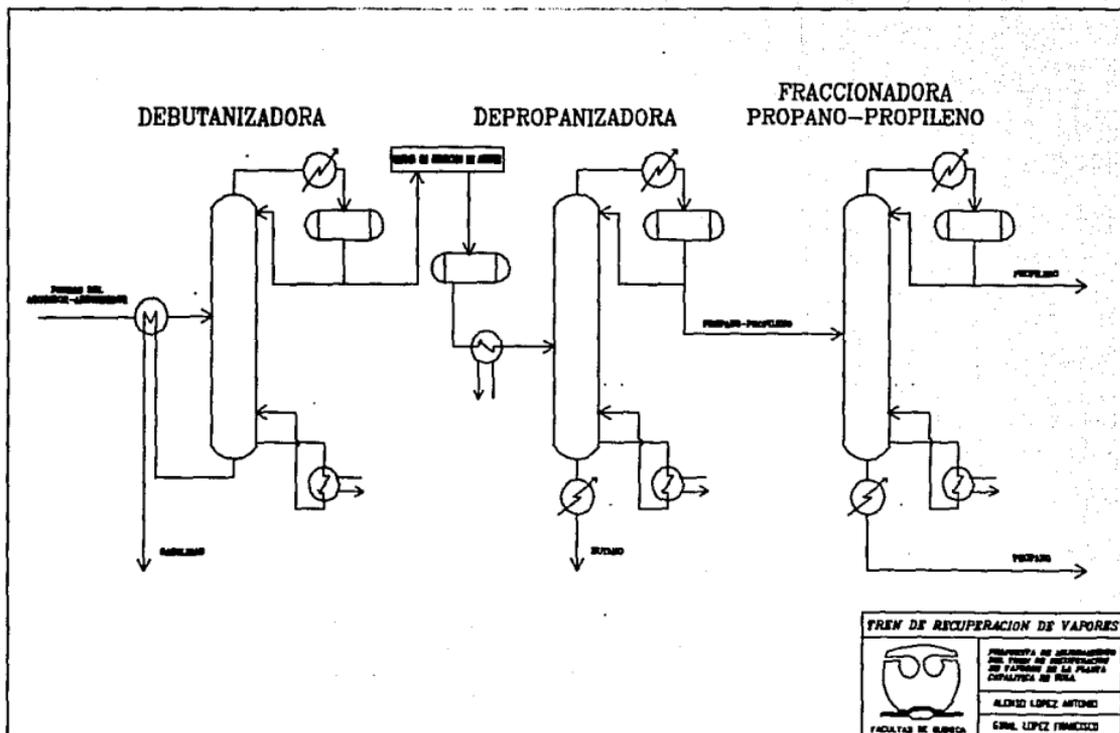


FIGURA 3.5
DEBUTANIZADORA, DEPROPANIZADORA Y FRACCIONADORA PROPANO-PROPILENO

Por el domo de la torre depropanizadora se obtienen propano, propileno y muy pequeñas cantidades de hidrocarburos más ligeros. Anteriormente esta corriente se enviaba a límites de batería como gas LPG, pero actualmente se separa el propano del propileno ya que principalmente este último tiene enormes aplicaciones industriales. Por lo anterior, la corriente rica en propano y propileno se bombea a la última torre del tren de recuperación de vapores: la denominada fraccionadora (o splitter) propano-propileno. La separación de estos dos compuestos requiere de muchas etapas de equilibrio debido a que los puntos de ebullición de ambos son muy parecidos; la fraccionadora tiene, por tanto, muchos platos y es considerablemente alta. Por el domo de la fraccionadora se obtiene el propileno y por la parte inferior el propano. Actualmente se utiliza agua de enfriamiento como medio de condensación y vapor en el rehervidor de los fondos.

Los dos productos obtenidos se envían a límites de batería. El propano se utiliza como gas LPG mientras que el propileno, como se mencionó anteriormente, sirve de materia prima para diferentes procesos, entre los que destaca la producción de polipropileno.

CAPITULO 4

SIMULADOR ASPEN-PLUS

A.- INTRODUCCION.

En los inicios de la década de los sesentas las computadoras dejan de ser una curiosidad científica para pasar a ser una herramienta de la industria. De la mano del desarrollo en el soporte físico de las computadoras, las firmas de ingeniería, compañías operadoras e instituciones académicas empiezan a preparar la primera generación de programas simuladores de proceso.

Alrededor de 1961 la compañía Monsanto comienza a preocuparse por unir modelos computacionales de operaciones unitarias individuales para formar un sistema de simulación de procesos. En 1964 esta tarea se ve complementada con el desarrollo de rutinas para simulación, cálculos de propiedades termofísicas, entrada y salida de datos, y documentación para el usuario; dos años más tarde Monsanto cuenta con el simulador FLOWTRAN cuyo nombre se deriva de "FLOWsheet TRANslator" (traductor de diagramas de proceso) indicando además su compatibilidad con el lenguaje FORTRAN.

En 1969 Monsanto ofrece como servicio el uso de FLOWTRAN en locales abiertos al público. En el lapso de 4 años, más de 70 clientes en más de 100 diferentes localidades usaban este servicio. Al inicio de 1972 se licencia y comercializa FLOWTRAN, un año más tarde se cierra el servicio de locales. En 1978, FLOWTRAN es seleccionado por el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) y licenciado a éste para servir de base en el desarrollo de ASPEN, un simulador de procesos avanzado, contratado por el Departamento de Energía de los Estados Unidos para simular procesos basados en el carbón, ya que el petróleo presentaba constantes alzas en sus precios.

Desde su introducción en 1981, el simulador de procesos ASPEN, "Advanced System for Process Engineering" (Sistema avanzado para Ingeniería de procesos), ha sido ampliamente conocido. Aunque en sus principios ASPEN se desarrolló para conversión de combustibles fósiles, ha demostrado ser aplicable para diversas industrias de proceso, universidades, firmas

de Ingeniería, compañías consultoras, centros de tecnología del gobierno de E.U., entre otros usuarios.

En 1981 se funda Aspen Technology a un lado del MIT para realizar nuevos esfuerzos junto con más de 20 compañías líderes en la industria de proceso. En 1983 la creación de más de 600 subrutinas enteras y nuevos cambios en más de 300 rutinas ya existentes dan como resultado el simulador de procesos ASPEN PLUS; una versión expandida, mejorada y soportada comercialmente del simulador ASPEN; con mayor calidad, eficiencia y facilidad en su uso. Desde 1983 ASPEN PLUS se ha mejorado año tras año para ofrecer más y mejores aplicaciones, que hacen de este simulador una herramienta cada vez más poderosa y fácil de usar.

En 1992 la Facultad de Química de la UNAM adquiere la versión 8.5 del ASPEN PLUS, versión con la que se desarrolla éste trabajo y la cual se explica en el presente capítulo. Siguiendo los lineamientos propuestos por Evans (Evans, 1981), explicados en el capítulo 2, todos los sistemas de simulación de procesos contienen cinco elementos principales: Modelos, Algoritmos, Soporte computacional, Interfase con el usuario y Aplicaciones. A continuación se habla de cada uno de estos elementos de la versión antes mencionada del ASPEN PLUS.

B.- MODELOS

El punto de partida para la simulación en estado estacionario es el diagrama de bloques que representa las operaciones unitarias involucradas en el proceso; cada bloque es un modelo en el que se encuentran todas las ecuaciones que se deben resolver para dicha operación unitaria. ASPEN-PLUS ofrece una biblioteca completa de modelos generalizados para simular cualquier tipo de proceso, incluyendo procesos con sólidos, electrolitos o sustancias complejas; además, mediante el implemento de subrutinas, el Ingeniero puede definir modelos de sus propias operaciones unitarias.

En la tabla 4.1 se muestran los modelos de operaciones unitarias que se pueden simular con ASPEN-PLUS. Estos modelos no tienen ninguna limitación dimensional ya que pueden manejar cualquier número de componentes, alimentaciones, etapas, reacciones, etc. y prácticamente todos pueden manejar sólidos.

ASPEN-PLUS genera automáticamente las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, las relaciones de conexión, y acepta fácilmente ecuaciones de velocidad de reacción y restricciones de diseño y control. En los capítulos 10 - 16 de la guía del usuario de ASPEN-PLUS se encuentra información específica sobre cada uno de éstos modelos.

MODELOS DE OPERACIONES UNITARIAS DEL ASPEN PLUS	
MEZCLADORES, DIVISORES Y SEPARADORES	BOMBAS Y COMPRESORES
- Mezclador general MIXER	- Bomba PUMP
- Divisor de flujo FSPLIT	- Compresor de una etapa COMPR
- Divisor de componentes SEP	- Compresor de etapas multiples MCOMPR
- Separador de dos productos SEP2	
SEPARADORES FLASH	MANEJO DE SOLIDOS
- Flash de dos fases FLASH2	- Ciclón CYCLONE
- Flash de tres fases FLASH3	- Precipitador electrostático ESP
	- Filtro de tela FABFL
CALENTADORES Y CAMBIADORES DE CALOR	- Limpiador Vénturi VSCRUB
- Calentador general de proceso HEATER	- Triturador CRUSH
- Cambiador de calor HEATX	- Pantalla/clasificador SCREEN
	- Hidrociclón HYCYC
SEPARACION MULTITAPA	- Filtro de tambor rotatorio FILTER
- Fraccionamiento riguroso RADFRAC	- Filtro centrífugo CFUGE
- Col. de fracc. riguroso múltiple MULTIFRAC	- Lavador de sólidos SWASH
- Absorción rigurosa ABSBR	- Decantador contracorriente CCD
- Extractor riguroso EXTRC	
- Destilación, diseño DSTNU	MANIPULADORES DE CORRIENTES
- Destilación, simulación DISTL	- Multiplicador MULT
	- Duplicador DUPL
REACTORES	
- Reactor de selección RYIELD	
- Reactor estequiométrico RSTOIC	
- Reactor de tanque continuo agitado RCSTR	
- Reactor de flujo tampón RPLUG	
- Equilibrio químico a dos fases REQUIL	
- Equilibrio de fases y químico RQIBBS	

Tabla 4.1: Modelos de operaciones unitarias

Los modelos y datos de propiedades termodinámicas son la clave para obtener buenos resultados en la simulación. El sistema de propiedades de ASPEN-PLUS calcula todas las propiedades termodinámicas y de transporte requeridas para simular todos los modelos de operaciones unitarias, para dimensionar los equipos y para producir reportes y tablas. Dicho sistema ofrece un amplio rango de modelos termodinámicos, basado en ecuaciones de estado y aproximaciones por coeficientes de actividad, permitiendo definir diferentes modelos a utilizar en cada parte del proceso.

Para la solución de estos modelos, ASPEN-PLUS cuenta con cuatro diferentes bancos de datos, que contienen diversos datos físicos (como peso molecular o punto de ebullición) para más de 1,500 compuestos químicos. Si el valor de algún parámetro no se encuentra, se puede suministrar directamente, o si se desea definir algún parámetro especial, se puede alimentar en un banco de datos creado. Además es posible definir cualquier modelo deseado mediante rutinas en FORTRAN, o alimentar datos directamente para todas las propiedades termodinámicas y de transporte que dependen de la temperatura, éstos pueden ser suministrados como valores numéricos que el usuario define sin límite de número o como coeficientes polinomiales. Los datos de entalpía pueden ser basados en cualquier condición de referencia. En la página siguiente se muestran los modelos de propiedades termodinámicas que maneja ASPEN-PLUS.

En el capítulo 5 de la guía del usuario de ASPEN-PLUS y más detalladamente en la guía de propiedades físicas, se encuentra información sobre los modelos para el cálculo de propiedades. La información sobre los bancos de datos y sus componentes se encuentra en el capítulo 4 de la misma guía.

C.- ALGORITMOS

Los algoritmos son los conjuntos de operaciones que permiten al simulador resolver los problemas matemáticos generados por los modelos. ASPEN-PLUS, como la gran mayoría de simuladores comerciales, utiliza algoritmos de simulación modular secuencial (ver capítulo 2), en donde a partir de la definición de las corrientes de alimentación y las condiciones de operación, se van calculando de forma secuencial las operaciones unitarias.

ASPEN-PLUS cuenta con rutinas para detectar los ciclos de recirculación, seleccionar las corrientes de corte, generar bloques de convergencia y definir la secuencia de cálculo, sin importar el orden en que se introduzcan las operaciones unitarias. Alternativamente se pueden alimentar especificaciones propias de convergencia, o crear un amplio rango de aplicaciones con módulos escritos en FORTRAN.

Como se vió en el capítulo 2, sección E, existe una jerarquía en el manejo de los ciclos de la simulación modular secuencial: los ciclos de control, con los que se logra la convergencia de las especificaciones de diseño son los más externos. ASPEN-PLUS genera automáticamente las secuencias de convergencia para las especificaciones de diseño y realiza dicha convergencia mediante el método de la secante para una sola especificación o el método de Broyden para dos o más especificaciones simultáneas; también acepta cualquier especificación de convergencia que el usuario quiera definir. Con esta poderosa herramienta se puede definir cualquier cantidad de valores deseados para especificar el resultado de un bloque, el flujo o cualquier propiedad de una corriente, la pureza de un componente, o alguna función de estas variables; incluso se puede designar un rango dentro del cual deba ser manipulada alguna variable.

Para la convergencia de los ciclos internos, necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de recirculación, ASPEN-PLUS ofrece muchos métodos que se pueden aplicar simultáneamente a cualquier número de corrientes. Entre estos métodos se encuentra la

modificación del método quasi-Newton de Broyden que utiliza información sobre la interacción de las variables de las corrientes de corte.

MODELOS DE CALCULO DE PROPIEDADES FISICAS EN ASPEN PLUS

ECUACIONES DE ESTADO

- Redlich-Kwong
- Redlich-Kwong-Soave
- Redlich-Kwong-ASPEN
- Peng-Robinson
- Cadena dura perturbada (polar)
- Cadena dura perturbada (no polar)
- Peng-Robinson (agua/hidrocarburo)
- Lee-Kesler
- BWR
- Hayden-O'Connell
- Noltnagel
- Tablas de vapor ASME, 1967

COEFICIENTES DE FUGACIDAD

- Grayson-Streed
- Chao-Seader
- Chao-Seader/Prausnitz-Shair

COEFICIENTES DE ACTIVIDAD

- Scalchard-Hildebrand extendido
- Ecuación de Wilson
- Ecuación de Van Laar
- Ecuación NRTL
- UNIQUAC
- UNIFAC
- Electrolito de composición local

VOLUMEN MOLAR

- Líquido saturado Cavett
- Líquido saturado Rackett
- Líquido comprimido Chueh-Prausnitz
- Liq. molar parcial Brelvi-O'Connell
- Sólido, polinomial
- Vol. electrolitos Debye-Huckel
- Polinomial modificada

ENTALPIA/ENTALPIA LIBRE/ENTROPIA

- Liq. y vapor Yen-Alexander
- Líquido saturado Cavett
- Sólido, polinomial
- Ec. de Watson modificada
- Fusión sólida polinomial
- Sublimación sólida polinomial
- Sublimación sólida generalizada
- Polinomial modificada
- Entalpía de electrolitos Criss-Cobble

PRESION DE VAPOR

- Presión liq. vapor de Antoine
- Presión liq. vapor de Cavett
- Presión sólido vapor de Antoine
- Polinomial modificada

RELACION DE EQUILIBRIO LIQ-VAP

- Datos de entrada
- Polinomial modificada

CONSTANTE DE HENRY

- Datos de entrada
- Polinomial modificada

DENSIDAD DE SÓLIDOS COMPLEJOS

- Modelo de sólidos secos IGT
- Modelo de densidad generalizado

ENTALPIA DE SÓLIDOS COMPLEJOS

- Correlación de Bole
- Correlación de Dulong
- Corr. de Grummel y Davis
- Corr. del calor de combustión
- Corr. de Chang-Jirapongphan-Boston
- Correlación de Kirov
- Ecuación cúbica de temperatura
- Modelo generalizado de entalpía

CONDUCTIVIDAD TERMICA

- Presión de vapor baja WMS
- P_v de vapor alta de Stiel-Thodos
- Líquido de Sato-Reidel
- Sólidos polinomial

TENSION SUPERFICIAL

- Hakim-Steinberg-Stiel (liq. puro)
- Hakim-Steinberg-Stiel (mezcla liq.)

VISCOSIDAD

- Chapman-Enskog-Brokaw
- Dean-Stiel
- Liq. modificado de Andrade
- Latsou-Stiel (liq.)

COEFICIENTE DE DIFUSION

- Chapman-Enskog/Wilke-Lee
- Dawson-Khoury-Kobayashi
- Wilke-Chang

Tabla 4.2: Modelos de cálculo de propiedades

Además, ASPEN-PLUS cuenta con una modificación apropiada del método de Broyden, que permite realizar la convergencia de las especificaciones de diseño (ciclos externos), y de las corrientes de recirculación (ciclos internos) de manera simultánea. Con este método se pueden resolver problemas en los cuales los ciclos externos e internos estén fuertemente relacionados, como un tren de precalentamiento o de evaporadores, o un proceso de cogeneración.

Todas estas herramientas hacen que el sistema de simulación utilizado por ASPEN-PLUS aumente los beneficios del enfoque modular secuencial y ofrezca alternativas para cubrir las deficiencias de este enfoque. En los capítulos 17 - 25 de la guía del usuario, o en forma más detallada en la guía de simulación interactiva, se encuentra información específica sobre los distintos algoritmos.

D.- SOPORTE COMPUTACIONAL

El soporte computacional está formado por dos partes: el soporte físico o "hardware" y el soporte lógico o "software". En el caso de ASPEN-PLUS, el soporte físico se debe adquirir por cuenta propia, la versión 8.5 requiere del siguiente sistema:

- * Una computadora personal (PC) con procesador 386 - 486 compatible con IBM.
- * 640 KB de memoria base, de la cual deben estar disponibles por lo menos 480 KB.
- * 8 - 10 MB de memoria extendida. Se recomiendan de 12 a 14 MB.
- * Un coprocesador matemático 803087 (o equivalente).
- * Monitor a color (EGA, VGA) o Hercules monocromático para utilizar el sistema gráfico.
- * Un ratón "mouse" para utilizar el sistema gráfico.
- * Un puerto paralelo.
- * Un mínimo de 70 MB de espacio en disco duro.
- * Un dispositivo de seguridad para conectar en el puerto paralelo, sin el cual ASPEN-PLUS no funciona.

El soporte lógico está formado principalmente por dos partes: el sistema operativo, (en el caso del sistema operativo DOS, se requiere una versión 3.3 o mayor y se debe configurar al sistema para que maneje por lo menos 50 archivos) y los programas que conforman al simulador, en el caso de ASPEN-PLUS se encuentran agrupados en tres paquetes:

- * ASPEN-PLUS para computadoras 386 con todas las rutinas necesarias para efectuar la simulación.

- * Model Manager, interfase con el usuario, cuenta con un sistema gráfico experto que ayuda a crear fácilmente los diagramas de flujo de proceso, correr las simulaciones, y a interpretar y editar los resultados.

- * La Tercera Parte del sistema incluye el compilador NDP-FORTRAN, el Phar Lap 386|ASM / 386|LINK y el DOS extender.

E.- INTERFASE CON EL USUARIO

Como se vió en el capítulo 2, sección C, la interfase con el usuario incluye el lenguaje por medio del cual la persona describe su problema particular, los reportes que resumen los resultados, la documentación adecuada para el uso del sistema, y los protocolos para la interacción con otros programas y sistemas. En esta sección se describe el funcionamiento de dichos elementos en la interfase del simulador ASPEN-PLUS.

El **lenguaje de entrada** consiste en una descripción del proceso con la información disponible en el diagrama de flujo. Esta información incluye los flujos y composiciones de las corrientes de alimentación, los parámetros de los equipos del proceso y la interconexión entre éstos. En ASPEN-PLUS dicha información puede ser introducida de tres formas: con un editor de textos utilizando el lenguaje de entrada, mediante el llenado de formas, y utilizando gráficos; las últimas dos a través de ModelManager (Interfase con el usuario).

El **reporte de resultados** incluye información sobre todas las corrientes y sus propiedades, las operaciones unitarias y de manera opcional los costos y economía del proceso. Dichos reportes pueden incluir información tan específica como los flujos, composiciones y

propiedades de cada plato de una torre; pueden generar gráficas como las curvas de calor en un intercambiador y si se desea, se puede generar hasta el diagrama de flujo del proceso con la información requerida en la tabla de balances. Todos los reportes y diagramas pueden ser editados e impresos de manera directa o desde casi cualquier procesador de palabras, hoja de cálculo o sistema CAD.

La **documentación adecuada para el uso del sistema** se encuentra organizada en diferentes manuales dirigidos a todos los niveles de usuario, desde principiantes hasta gente experta en versiones antiguas de ASPEN. A continuación se citan los principales manuales del sistema y se explica brevemente la información que contienen:

- * **ModelManager Getting Started and Tutorial for the PC** introduce al usuario al manejo del ModelManager a través de tutoriales en donde se enseñan, paso a paso, los conceptos básicos para crear y usar modelos en ASPEN-PLUS.

- * **ModelManager and ASPEN PLUS, Installation and Reference for the PC** explica como configurar el sistema y como instalar las tres partes que conforman el soporte lógico del simulador, tanto en una PC como en una estación de trabajo.

- * **ASPEN-PLUS User Guide** contiene toda la información necesaria para empezar a utilizar ASPEN-PLUS en el modelado de procesos líquido-vapor, típicos en la industria química y del petróleo.

- * **ASPEN-PLUS Interactive Simulation** es una guía completa de las habilidades de la simulación interactiva en ASPEN-PLUS; incluye dos ejemplos con tutoriales.

- * **ASPEN-PLUS Costing Manual** describe el uso de los sistemas de costos (modelos de costos de equipos, costos de capital, costos de operación, evaluaciones económicas, etc), así como su simulación y el reporte de los resultados.

- * **ASPEN-PLUS Data Regression Manual** es una guía completa del uso del sistema de regresión lineal de ASPEN-PLUS, incluyendo ejemplos y parámetros recomendados para problemas de regresión comunes.

* **ASPEN-PLUS Electrolytes Manual** describe y ejemplifica el uso de ASPEN-PLUS en el modelado de procesos que involucran electrolitos en soluciones acuosas y no acuosas.

* **ASPEN-PLUS Solids Manual** es un suplemento de la guía del usuario, donde se describe el uso de corrientes y propiedades de compuestos sólidos y compuestos no convencionales, así como las operaciones unitarias que los manejan.

* **ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties** es una guía para usuarios avanzados, donde se explican las habilidades de ASPEN-PLUS en el cálculo y uso de propiedades termofísicas.

* **ASPEN-PLUS Notes on Interfaces and User Models** es una guía para aprender como escribir y aplicar modelos y subrutinas definidas por el usuario, también se discute sobre los diferentes archivos de interfase con que cuenta ASPEN-PLUS.

* **ASPEN-PLUS Stream Libraries and Insert Libraries** describe como usar la biblioteca de corrientes para almacenar información entre distintas corridas y como almacenar fragmentos comunes usados en el lenguaje de entrada.

* **ASPEN-PLUS Summary File Toolkit** describe como hacer programas usando toolkit. Toolkit (estuche de herramientas) es una herramienta que consiste en una serie de subrutinas en FORTRAN, las cuales se utilizan para extraer información de los resultados de la simulación.

Una vez terminada la simulación, ya que se generaron todos los datos y gráficos que se requieren, es fácil comunicarse con otros programas para realizar diversas actividades. ASPEN-Plus cuenta con *protocolos para la interacción con otros programas* tales como: bases de datos, hojas de cálculo o sistemas CAD/CAM.

F.- APLICACIONES

Durante el desarrollo de un proceso, se pueden utilizar datos preliminares para preparar un modelo. A esta altura, el diagrama de flujo de proceso se usa en ASPEN-PLUS para evaluar las configuraciones alternativas de proceso, analizar la adición, eliminación o sustitución de equipos y para comparar procesos alternativos con bases comunes. El modelo puede ayudar a la

interpretación de los datos de la planta piloto y a darnos una buena idea del comportamiento y la economía del proceso.

Para el diseño de plantas nuevas o la modernización de las ya existentes, ASPEN-PLUS permite a los ingenieros determinar con detalle los balances de materia y energía, analizar alternativas de cambio y evaluar las condiciones de operación. Es posible construir una serie de casos de estudio para asegurarnos que la planta puede enfrentarse a un amplio rango de condiciones de operación.

En plantas ya existentes, se puede utilizar ASPEN-PLUS para reducir los costos de operación, mejorar el rendimiento y la eficiencia de energía. En caso de que las materias primas o los productos cambien de especificaciones, se pueden determinar fácilmente las modificaciones en las condiciones de operación. Con ASPEN-PLUS se pueden eliminar los cuellos de botella del proceso o los problemas causados por algunos equipos.

En pocas palabras ASPEN-PLUS tiene aplicaciones en la síntesis, análisis, optimización y operación de cualquier proceso, en cualquier etapa y en cualquier nivel que se efectúe.

CAPITULO 5

**SIMULACION DEL TREN DE
RECUPERACION DE VAPORES**

A.- PASOS A SEGUIR EN UNA SIMULACION.

Para llevar a cabo la simulación de un proceso en cualquier simulador, es necesario realizar cada uno de los pasos que se muestran a continuación. En cada uno de ellos se explica la manera específica en que se definió la simulación del tren de recuperación de vapores, cuyos resultados se muestran en la siguiente sección. Los pasos están numerados en el orden lógico en que se deben realizar, aunque no es necesario seguir la misma secuencia. Las opciones que se mencionan a continuación se utilizaron en todas las simulaciones que se reportan a lo largo de este trabajo.

1.- Definición del diagrama de flujo de proceso y su alcance: El primer paso para realizar la simulación de un proceso es definir sus límites, ya que es común que éste no se encuentre como una entidad independiente, sino que tenga flujos de materia y/o energía interconectados con otros procesos, de forma que si se altera el proceso en cuestión, se alteran los demás o viceversa. Es por esto que no siempre resulta fácil definir que parte del proceso o que procesos se deben simular. En el presente trabajo se propone un sistema de integración térmica en la torre separadora de propano y propleno, pero es necesario simular el tren de recuperación de vapores completo (Figura 3.5), ya que puede resultar que al cambiar las condiciones en las primeras dos torres, exista una configuración del proceso tal que la propuesta dejara de ser viable.

2.- Selección de unidades: Se deben seleccionar las unidades en las que se van a especificar las variables de entrada y en las que se desean obtener los reportes de salida. Es posible escoger unidades de diferentes sistemas para las variables, incluso se pueden especificar diferentes unidades en cada operación unitaria y no es necesario que las unidades de entrada y salida sean iguales. En el presente trabajo se utilizan las unidades pertenecientes al sistema inglés; la razón por la que se escogió este sistema se basa en el hecho de que la información que obtuvimos del proceso real está reportada en dichas unidades.

3.- Selección del método o modelo para calcular las propiedades termodinámicas: Este es un paso clave para una buena simulación ya que desafortunadamente no existe una ecuación de estado o modelo para predecir las propiedades de todos los compuestos y todas las condiciones. Es por esta razón que se debe elegir el modelo que calcule con mayor precisión las propiedades de los compuestos que maneja el proceso a simular; de hecho, es posible utilizar diferentes ecuaciones de estado o modelos termodinámicos en las distintas operaciones unitarias según lo requieran las condiciones de éstas, lo que le da mayor flexibilidad a la simulación.

El proceso de recuperación de vapores maneja principalmente hidrocarburos, que son compuestos no polares; para ellos existen varias ecuaciones de estado que predicen sus propiedades con bastante exactitud, en nuestro caso se eligió la ecuación de estado de Peng y Robinson, desarrollada en 1976 a partir de la ecuación de Soave. Para cerciorarnos de que realmente esta ecuación es la que mejor representa a nuestro sistema, se realizaron simulaciones calculando las propiedades con diferentes ecuaciones de estado. Los resultados obtenidos demostraron que las ecuaciones de Redlich-Kwong-Soave, Redlich-Kwong-Aspen y Peng-Robinson son las más adecuadas, siendo la última la que arrojó los resultados muy similares a los del proceso real.

Con excepción de la primera parte del proceso, en la que se maneja una cantidad muy pequeña de ácido sulfúrico, todas las corrientes son mezclas de hidrocarburos, por lo que consideramos que no es necesario incluir ninguna regla de mezclado en la ecuación de estado.

4.- Partir el proceso en bloques de operaciones unitarias y escoger el modelo para cada bloque: Este paso se realizó en dos etapas: primero se simuló el proceso considerando a las torres con condensador, rehervidor y demás accesorios como una sola entidad; posteriormente, con los datos arrojados por esta simulación se procedió a partir las torres en cada una de las operaciones unitarias que las conforman, con el fin de obtener una simulación del proceso más

apropiada. La figura 5.1 muestra el ejemplo de como queda una columna al partirla en las operaciones unitarias que la conforman.

Los modelos usados en la simulación de las operaciones unitarias fueron: RADFRAC para columnas de destilación; HEATX para intercambiadores de calor con corrientes de proceso; HEATER para condensadores, rehedidores, válvulas e intercambiadores con servicios auxiliares; PUMP para bombas; FSPLIT para divisores; COMP para compresores y SEP para la unidad MEROX.

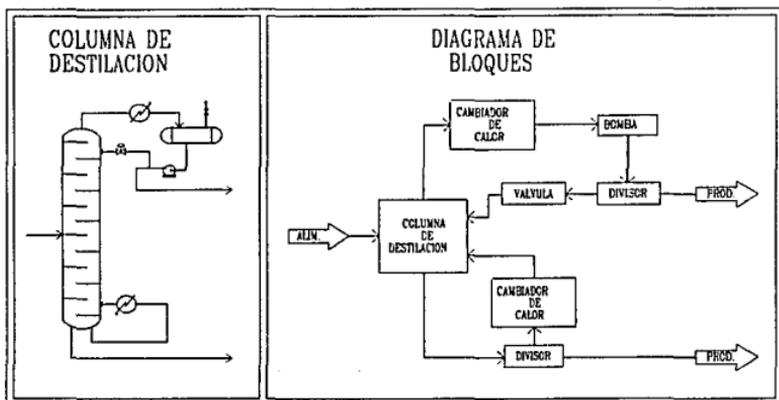


Figura 5.1: Torre de destilación dividida en las operaciones unitarias que la conforman

5.- Definición de las corrientes de entrada y sus compuestos químicos:

Aparentemente esta es una tarea fácil, pero con frecuencia, como en el caso del proceso de recuperación de vapores, los datos reportados en el diagrama de flujo no están completos, por ejemplo, las gasolinas aparecen como C_5^+ cuando en realidad son una mezcla de hidrocarburos desde C_5 hasta C_9 . Para determinar una composición que represente a la mezcla de gasolinas adecuadamente partiendo de los datos que aparecen en el diagrama, fue necesario realizar varias

simulaciones de la torre debutanizadora, suponiendo composiciones diferentes en cada caso. Finalmente se encontró una mezcla que representa bastante bien a la gasolina del proceso, ya que los resultados se ajustaron con bastante precisión a los reportados en el diagrama de flujo, aunque como se verá más adelante, los errores más grandes de la simulación se obtienen para este compuesto. Esto no representa mucho problema para las siguientes torres, ya que casi toda la gasolina sale del proceso por los fondos de la debutanizadora.

6.- Especificación de las condiciones de operación: En esta parte se deben definir cuales de las variables de operación se van a especificar en cada operación unitaria. El número de variables que se deben especificar depende de la operación que deseamos representar. El simulador ofrece opciones de grupos de variables para especificar en cada operación unitaria. Lo importante, y no tan sencillo, es elegir el conjunto de variables adecuado, de forma que la simulación converja, y lo haga de la manera más adecuada posible, ya que el hecho de definir variables permitidas no garantiza que el sistema llegue a la convergencia.

7.- Especificación de condiciones de diseño: Muchas veces existen condiciones en el diseño que es importante conservar, ya que una pequeña alteración puede cambiar el comportamiento del proceso o las propiedades de los productos. En este caso sólo se debe tener cuidado con la determinación de dichas condiciones para no sobre-especificar el proceso. Se puede dar el caso de que si se añade una condición al proceso sea necesario modificar las condiciones de operación definidas, para que no existan redundancias que imposibiliten la convergencia.

8.- Definición de los métodos de convergencia: El simulador genera automáticamente las secuencias de convergencia para las especificaciones de diseño y realiza dicha convergencia mediante el método de la secante para una sola especificación o el método de Broyden para dos o más especificaciones simultáneas; también acepta cualquier especificación de convergencia que el usuario quiera definir. Para la convergencia de los ciclos internos existe una amplia gama de

métodos que se pueden aplicar simultáneamente a cualquier número de corrientes, entre éstos se encuentra la modificación del método quasi-Newton de Broyden que utiliza información sobre la interacción de las variables de las corrientes de corte. La definición de métodos adecuados, además de garantizar la convergencia (en caso de que los datos estén alimentados correctamente), puede representar un ahorro de tiempo considerable, sobre todo en procesos con grandes dimensiones.

La torre separadora de propano y propileno maneja pocos compuestos en muchos platos (125), esto trae como consecuencia que el sistema no converja con las especificaciones definidas por ASPEN-PLUS; para resolver este problema fue necesario definir una secuencia de convergencia adecuada: se probaron varias alternativas resultando la mejor opción una convergencia en las diferentes partes de la torre por separado, primero en el domo y después en el fondo. Para que las corrientes de corte convergieran, se especificó el método de Broyden.

9.- Estudio de casos o análisis de sensibilidad: Una vez que la simulación se realiza adecuadamente, se puede hacer un estudio de sensibilidad en donde se varían algunos parámetros para analizar que tanto se altera el proceso; también se puede alterar la estructura del proceso para analizar distintas opciones, lo que nos permite conocer profundamente al proceso y si se desea, modificar las condiciones de operación o el proceso mismo de forma que se obtenga un mayor rendimiento de éste, o en muchos casos la solución a algún problema específico.

B.- RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la simulación del tren de recuperación de vapores. Primero se muestra el diagrama de flujo de proceso (DFP) completo, acompañado de una tabla con los valores de las corrientes reportadas, los valores de las corrientes obtenidas en la simulación y una comparación entre estas; a continuación se muestra un

diagrama de bloques del proceso, el cual representa la simulación del proceso incluyendo todos los equipos y accesorios reportados en el DFP.

En una simulación es difícil obtener con toda precisión los valores de las variables del proceso real; es por esto que existen ciertos rangos dentro de los cuales las diferencias entre los valores reales y los obtenidos en la simulación son aceptables. En la tabla siguiente se encuentra un criterio comúnmente utilizado:

<p>FLUJOS: $\pm 2\%$ TEMPERATURAS: $\pm 5^{\circ} F$ PRESIONES: $\pm 2\%$</p>
--

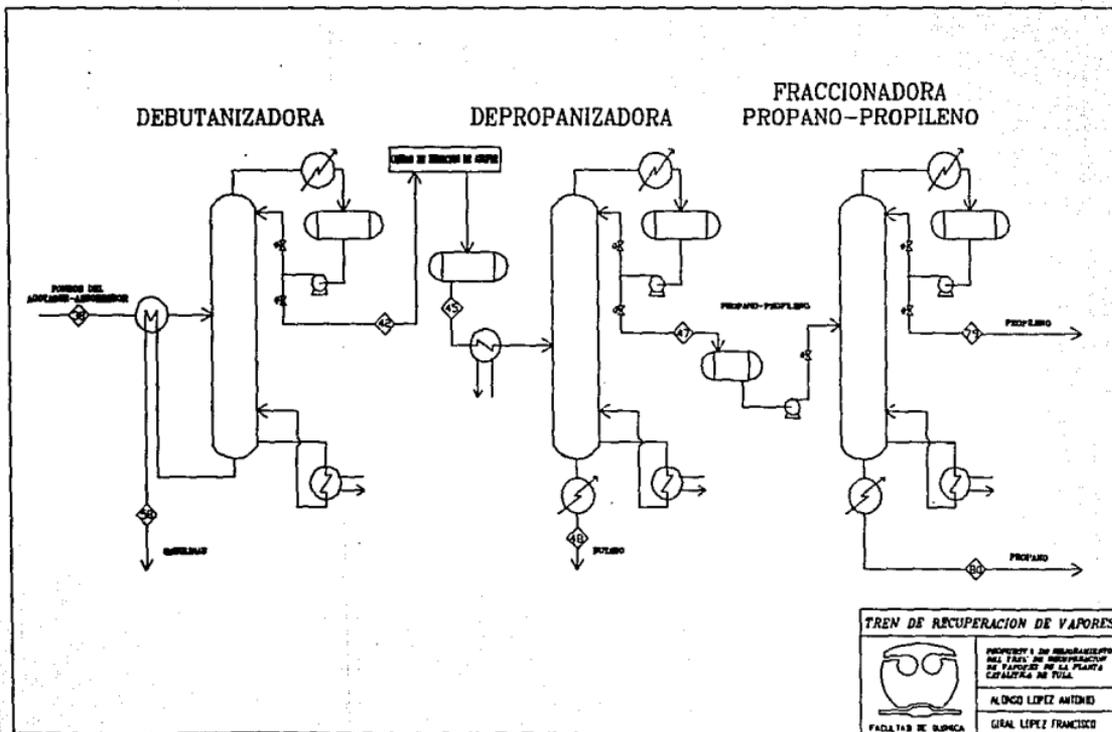


FIGURA 5.2
PRINCIPALES CORRIENTES DEL TREN DE RECUPERACION

Corriente número:	38		42		58		45					
Fase:	SIMUL LIQ	REAL LIQ	SIMUL LIQ	REAL LIQ	SIMUL MEZ	REAL MEZ	SIMUL LIQ	REAL LIQ				
Componentes Lb/hr:												
-Etano	163.00	163.00	163.00	163.00	0.00	0.00	163.00	161.00				
-Propano	6208.00	6208.00	6207.99	6208.00	0.01	0.00	6207.99	6208.00				
-Propileno	22974.00	22974.00	22974.00	22974.00	0.01	0.00	22974.00	22974.00				
-Butano	60805.00	60805.00	57131.00	59161.00	3673.61	1644.00	57131.00	59177.00				
-Gasolina	288043.00	288042.00	526.70	380.00	287516.00	287662.00	421.37	369.00				
-H ₂ S	757.00	757.00	756.99	757.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
Flujo total:		ERROR		ERROR		ERROR		ERROR				
-Lbmol/hr	4655.00	4645.40	0.2	1704.58	1760.00	3.14	2950.59	2894.40	1.94	1680.90	1737.70	3.20
-Lb/hr	378950.00	378950.00	0.0	87760.00	89644.00	2.10	291190.00	289306.00	0.65	86898.00	88886.00	2.20
Temp. °F	259.44	259.44	0.0	110.76	109.00	+1.76	284.00	284.42	-0.42	110.00	110.90	-0.90
Presión psia	247.70	247.70	0.0	245.00	245.00	0.0	57.00	57.00	0.0	172.0	172.30	0.17

Corriente número:	47		48		791		80A					
Fase:	SIMUL LIQ	REAL LIQ	SIMUL LIQ	REAL LIQ	SIMUL LIQ	REAL LIQ	SIMUL LIQ	REAL LIQ				
Componentes Lb/hr:												
-Etano	163	161.00	0.00	0.00	163.00	161.00	0.00	0.00				
-Propano	6207.67	5690.00	0.32	518.00	3146.08	630.00	3060.16	5060.00				
-Propileno	22974.00	22974.00	0.10	0.00	22972.00	22722.00	4.00	252.00				
-Butano	333.11	327.00	56798.00	58850.00	0.00	0.00	333.24	327.00				
-Gasolina	0.00	0.00	421.36	369.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
-H ₂ S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
Flujo total:		ERROR		ERROR		ERROR		ERROR				
-Lbmol/hr	697.87	685.90	1.75	983.04	1051.90	6.50	622.66	75.22	ERROR			
-Lb/hr	29678.00	29154.00	1.79	57220.00	59731.00	4.20	26281.00	23513.00	11.00	3397.40	5639.00	39.75
Temp. °F	103.50	100.00	+3.5	100.22	100.31	-0.09	108.67			134.62		
Presión psia	265.60	261.33	1.63	116.33	116.33	0.0	375.00			271.16		

TABLAS 5.1 Y 5.2: ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS DE LA SIMULACION

DIAGRAMA DE BLOQUES DE LA SIMULACION DEL TREN DE RECUPERACION DE VAPORES

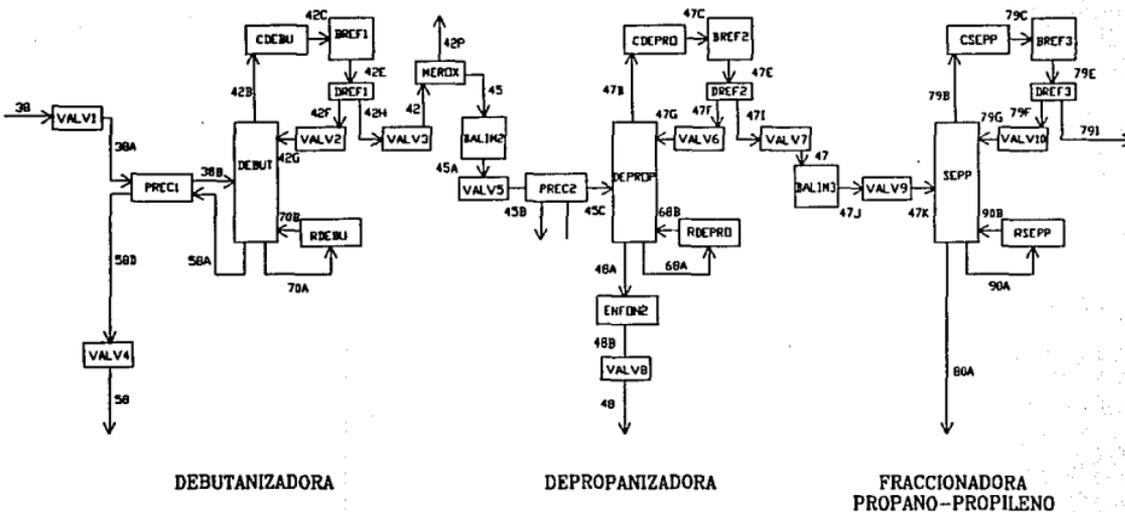


FIGURA 5.3

Corriente número:	38	38A	38B	42	42B	42C	42E	42F	42G	42H
De:	LB	VALV1	PREC1	VALV3	DEBUT	CDEBU	BREF1	DREF1	VALV2	DREF1
A :	VALV1	PREC1	DEBUT	MEROX	CDEBU	BREF1	DREF1	VALV2	DEBUT	VALV3
Fase:	LIQ	NEZ	NEZ	LIQ	VAP	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ
Componentes Lb/hr:										
-Etano	163.00	163.00	163.00	163.00	445.35	445.35	445.35	282.35	282.35	163.00
-Propano	6208.00	6208.00	6208.00	6207.99	16962.00	16962.00	16962.00	10754.00	10754.00	6207.99
-Propileno	22974.00	22974.00	22974.00	22974.00	62770.00	62770.00	62770.00	39796.00	39796.00	22974.00
-Butano	60805.00	60805.00	60805.00	57131.00	156100.00	156100.00	156100.00	98965.00	98965.00	57131.00
-Gasolina	288043.00	288043.00	288043.00	526.70	1439.09	1439.09	1439.09	912.39	912.39	526.70
-H ₂ S	757.00	757.00	757.00	756.99	2068.30	2068.30	2068.30	1311.30	1311.30	756.99
Flujo total:										
-Lbmol/hr	4655.00	4655.00	4655.00	1704.58	4657.32	4657.32	4657.32	2952.74	2952.58	1704.58
-Lb/hr	378950.00	378950.00	378950.00	87760.00	239780.00	239780.00	239780.00	152020.00	152020.00	87760.00
-ft ³ /hr		24253.00	43111.00	2561.15	165540.00	7018.91	6989.91	4431.96	4461.96	2558.30
Temp. $^{\circ}$ F	259.44	236.00	245.00	110.76	145.99	109.31	110.78	110.78	110.65	110.78
Presión psia	247.70	161.70	151.70	245.00	149.7	144.70	265	265	144.70	265.00
Frac. vapor	0.00	0.075	0.168	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Frac. líquido	1.00	0.925	0.832	1.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Entalpia:										
-BTU/lbmol		-67541.00	-66433.00	-39825.00	-31845.00	-39869.00	-39825.00	-39825.00	-39825.00	-39825.00
-BTU/lb		-829.70	-816.09	-773.00	-618.53	-774.39	-773.54	-773.54	-773.54	-773.00
-BTU/hr		-3.14e8	-3.09e8	-6.79e7	-1.48e8	-1.86e8	-1.85e8	-1.18e8	-1.18e8	-6.79e7
Entropia:										
-BTU/lbmol-R		-127.28	-125.69	-81.34	-67.82	-81.37	-81.35	-81.35	-81.29	-81.35
-BTU/lb-R		-1.56	-1.54	-1.57	-1.32	-1.58	-1.58	-1.58	-1.58	-1.58
Densidad:										
-Lbmol/ft ³		0.19	.11	0.66	.028	0.66	0.67	0.67	0.66	0.67
-Lb/ft ³		15.62	8.79	34.26	1.449	34.16	34.303	34.303	34.07	34.30
PH promedio:	81.40	81.40	81.40	51.48	51.48	51.48	51.48	51.48	51.48	51.48

TABLA 5.3: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número:	45	45A	45B	45C	47	47B	47C	47E	47F	47G
De:	MERX	BALIM2	VALV5	PREC2	VALV7	DEPROP	CDEPRO	BREF2	DREF2	VALV6
A :	BALIM2	VALV5	PREC2	DEPROP	BALIM3	CDEPRO	BREF2	DREF2	VALV6	DEPROP
Fase:	LIQ	LIQ	LIQ	MEZ	LIQ	VAP	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ
Componentes Lb/hr:										
-Etano	163.00	163.00	163.00	163.00	163	823.23	823.23	823.23	660.23	660.23
-Propeno	6207.99	6207.99	6207.99	6207.99	6207.67	31352.00	31352.00	31352.00	25144.00	25144.00
-Propileno	22974.00	22974.00	22974.00	22974.00	22974.00	116030.00	116030.00	116030.00	93056.00	93056.00
-Butano	57131.00	57131.00	57131.00	57131.00	333.11	1682.30	1682.30	1682.38	1349.27	1349.27
-Gasolina	421.37	421.37	421.37	421.37	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-H ₂ S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo total:										
-Lbmol/hr	1680.90	1680.90	1680.90	1680.90	697.67	3524.59	3524.59	3524.59	2826.72	2826.72
-Lb/hr	86898.00	86898.00	86898.00	86898.00	29678.00	149890.00	149890.00	149890.00	120210.00	120210.00
-ft ³ /hr	2546.29	2537.69	2541.21	9971.50	958.64	66080.00	4893.11	4877.78	3911.98	3933.45
Temp. °F	110.00	111.47	111.45	169.38	103.50	109.24	102.59	103.72	103.72	103.29
Presión psia	172.0	280.00	255.0	245.00	265.60	242.00	237.00	299.30	299.30	237.00
Fracc. vapor	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Fracc. líquido	1.00	1.00	1.00	0.78	1.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Entalpia:										
-BTU/lbmol	-40159.00	-40114.00	-40114.00	-36782	-8876.52	-3185.57	-8898.43	-8876.52	-8876.52	-8876.55
-BTU/lb	-776.81	-775.93	-775.94	-711.49	-208.73	-74.91	-209.29	-208.73	-208.73	-208.73
-BTU/hr	-6.75e7	-6.75e7	-6.74e7	-6.18e7	-6.79e6	-1.12e7	-3.14e7	-3.13e7	-2.51e7	-2.51e7
Entropia:										
-BTU/lbmol-R	-82.46	-82.43	-82.42	-76.95	-55.06	-45.02	-55.08	-55.07	-55.07	-55.07
-BTU/lb-R	-1.59	-1.59	-1.59	-1.49	-1.29	-1.06	-1.30	-1.30	-1.30	-1.30
Densidad:										
-Lbmol/ft ³	0.66	0.66	0.66	0.17	0.72	0.053	0.72	0.72	0.72	0.72
-Lb/ft ³	34.13	34.24	34.20	8.71	30.64	2.27	30.63	30.72	30.73	30.56
PW promedio:	51.70	51.70	51.70	51.7	42.53	42.52	42.52	42.53	42.53	42.53

80

TABLA 5.4: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número:	471	48	48A	48B	58	58A	58D	68A	68B	70A	70B
Des:	DREF2	VALV1	DEPROP	ENFOW2	VALV4	DEBUT	PREC1	DEPROP	RDEPRD	DEBUT	RDEBU
A :	VALV7	LB	ENFOW2	VALV8	LB	PREC1	VALV4	RDEPRD	DEPROP	RDEBU	DEBUT
Fase:	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ	MEZ	LIQ	LIQ	LIQ	VAP	LIQ	VAP
Componentes lb/hr:											
-Etano	163.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-Propano	6207.67	0.32	0.32	0.32	0.01	0.01	0.01	0.97	0.97	0.01	0.01
-Propileno	22974.00	0.10	0.10	0.10	0.01	0.01	0.01	0.32	0.32	0.01	0.01
-Butano	333.11	56798.00	56798.00	56798.00	3673.61	3673.61	3673.61	175030.00	175030.00	4329.86	4329.86
-Gasolina	0.00	421.36	421.36	421.36	287516.00	287516.00	287516.00	1298.49	1298.49	338881.00	338881.00
-H ₂ S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo total:											
-lbmol/hr	697.87	983.04	983.04	983.04	2950.59	2950.59	2950.59	3029.36	3029.36	3477.72	3477.72
-lb/hr	29678.00	57220.00	57220.00	57220.00	291190.00	291190.00	291190.00	176330.00	176330.00	343210.00	343210.00
-ft ³ /hr	965.80	1566.81	2029.63	1559.19	129520.00	9416.08		6254.58	63617.00	11098.00	165220.00
Temp. °F	103.72	100.22	220.82	100.00	284.00	357.12	332.27	220.82	220.84	357.12	415.47
Presión psia	299.30	116.33	244.92	239.92	57.00	152.6	142.60	244.92	244.42	152.60	152.10
Fracc. vapor	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00	1.00
Fracc. líquido	1.00	1.00	1.00	1.00	0.64	1.00	1.00	1.00	0.00	1.00	0.00
Entalpía:											
-BTU/lbmol	-8876.52	-62774.00	-57985.00	-62774.00	-80285.00	-78804.00	-80552.00	-57985.00	-51815.00	-78804.00	-65571.00
-BTU/lb	-208.73	-1078.46	-996.17	-1078.45	-813.52	-798.51	-816.22	-996.17	-890.18	-798.51	-664.42
-BTU/hr	-6.19e6	-6.17e7	-5.70e7	-6.17e7	-2.37e9	-2.32e8	-2.38e8	-1.67e8	-1.57e8	-2.74e8	-2.28e8
Entropía:											
-BTU/lbmol-R	-55.07	-104.85	-97.21	-104.92	-151.65	-150.12	-152.29	-97.21	-88.14	-150.13	-134.51
-BTU/lb-R	-1.29	-1.80	-1.67	-1.80	-1.54	-1.52	-1.54	-1.67	-1.51	-1.52	-1.36
Densidad:											
-lbmol/ft ³	0.72	0.63	0.68	0.63	0.023	0.31	0.33	0.48	0.047	0.31	0.021
-lb/ft ³	30.72	36.52	28.19	36.70	2.25	30.92	32.38	28.19	2.77	30.92	2.08
PM promedio:	42.52	58.21	58.21	58.21	98.69	98.69	98.69	58.21	58.21	98.68	98.69

TABLA 5.5: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número:	47J	47K	79B	79C	79E	79F	79G	79I	80A	90A	90B
De:	BALIM3	VALV9	SEPP	CSEPP	BREF3	DREF3	VALV10	DREF3	SEPP	SEPP	RSEPP
A :	VALV9	SEPP	CSEPP	BREF3	DREF3	VALV10	SEPP	LB	LB	RSEPP	SEPP
Fase:	LIQ	LIQ	VAP	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ	LIQ	VAP
Componentes Lb/hr:											
-Etano	163.00	163.00	1917.64	1917.64	1917.64	1754.64	1754.64	163.00	0.00	0.00	0.00
-Propano	6207.67	6207.67	37013.00	37013.00	37013.00	33867.00	33867.00	3146.08	3060.16	302960.00	302960.00
-Propileno	22974.00	22974.00	270280.00	270260.00	270260.00	247280.00	247280.00	22972.00	4.00	396.19	396.19
-Butano	333.11	333.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	333.24	32991.00	32991.00
-Gasolina	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.28	0.28
-H ₂ S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo total:											
-Lbmol/hr	697.87	697.87	7325.42	7325.42	7325.42	6702.76	6702.76	622.66	75.22	7447.22	7447.22
-Lb/hr	29678.00	29678.00	309190.00	309190.00	309190.00	282910.00	282910.00	26281.00	3397.40	336340.00	336340.00
-ft ³ /hr	965.36	967.02	126060.00	10215.00	10147.00	9284.27	9374.42	862.47	122.29	12107.00	125740.00
Temp. °F	105.40	105.26	111.92	106.48	108.67	108.67	107.84	108.67	134.62	134.62	140.49
Presión psia	353.20	333.20	260.00	255.00	375.00	375.00	270.00	375.00	271.16	271.16	270.66
Fracc. vapor	0.00	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
Fracc. líquido	1.00	1.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00
Entalpía:											
-BTU/lbmol	-8836.31	-8836.32	1928.85	-3610.12	-3570.82	-3570.82	-3571.07	-3570.82	-50585.00	-50585.00	-45157.00
-BTU/lb	-207.78	-207.78	45.70	-85.53	-84.60	-84.60	-84.61	-84.60	-1120.04	-1120.04	-999.86
-BTU/hr	-6.17e6	-6.17e6	1.41e7	-2.64e7	-2.62e7	-2.39e7	-2.39e7	-2.22e6	-3.81e6	-3.77e6	-3.36e6
Entropía:											
-BTU/lbmol-R	-55.02	-55.02	-42.45	-52.15	-52.13	-52.13	-52.08	-52.13	-79.54	-79.54	-70.44
-BTU/lb-R	-1.29	-1.29	-1.01	-1.24	-1.24	-1.23	-1.23	-1.24	-1.76	-1.76	-1.56
Densidad:											
-Lbmol/ft ³	0.72	0.72	0.058	0.72	0.72	0.72	0.715	0.72	0.62	0.615	0.06
-Lb/ft ³	30.74	30.69	2.45	30.27	30.47	30.47	30.18	30.47	27.78	27.78	2.67
PH promedio:	42.53	42.53	42.21	42.21	42.21	42.21	42.21	42.21	45.16	45.16	45.16

TABLA 5.6: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

CAPITULO 6

PROPUESTA DE MEJORAMIENTO DEL PROCESO Y SU SIMULACION

A.- DESTILACION

La destilación es un proceso de separación que se basa en el aprovechamiento de la diferencia de los puntos de ebullición de los componentes a separar. Al calentar una mezcla líquida de dos o más materiales volátiles, se evapora primero el componente de menor punto de ebullición y se establece un equilibrio entre las dos fases. De manera inversa, si se enfría un vapor multicomponente, el compuesto de mayor punto de ebullición se condensa en mayor proporción que el de menor punto de ebullición.

Si se pone en contacto un vapor con un líquido cuya concentración de componentes más volátiles es mayor que la del líquido en equilibrio con ese mismo vapor, éste tenderá a establecer el equilibrio mediante la condensación de los componentes menos volátiles y la evaporación de los más ligeros. Si se repite esta operación con vapor y líquido a contracorriente durante muchas etapas de equilibrio, el vapor se irá enriqueciendo de los componentes más volátiles mientras que el líquido lo hará de los compuestos menos volátiles, hasta alcanzar una concentración determinada.

Estas operaciones se llevan a cabo industrialmente en las columnas de destilación. Como el proceso consiste en poner en contacto vapor con líquido y a la columna no entra más que la alimentación (normalmente como líquido), el vapor se genera evaporando parte del producto del fondo, y el líquido retomando parte de la corriente del domo, que son las mezclas más pobres y más ricas en los componentes más volátiles respectivamente. Una columna de destilación consta entonces de un destilador o rehevador donde se evapora parte del producto del fondo, un condensador donde se obtiene el destilado, parte del cual se retorna a la columna como reflujo, y una serie de platos o etapas con empaques, donde se ponen en contacto el vapor y el líquido, en uno de los cuales se alimenta la mezcla por rectificar.

En la industria química y petroquímica, la destilación es por mucho el método más usado para separar mezclas y en muchas plantas las columnas de destilación consumen un gran

porcentaje de energía. En las plantas con columnas de destilación convencionales, la mayor parte de energía es requerida para el funcionamiento del rehervidor y el 95% de ésta se pierde en el medio de enfriamiento del condensador. Durante décadas los ingenieros han tratado de reducir el consumo de energía requerido por una columna de destilación, ya que desde los años cincuentas se sabe que la energía teórica requerida para estos sistemas es un pequeño porcentaje del consumo actual.

La posibilidad de ahorro de energía sin modificar la estructura de un proceso es mínima, modificar las condiciones de operación puede provocar una disminución máxima de un 10% en el consumo de energía; aproximadamente el mismo porcentaje resultaría de implementar un sistema de control adecuado y en muchos casos estas medidas ya han sido tomadas. Sólomente mediante modificaciones del proceso, como la recuperación del calor extraído al destilado en el condensador, se logra una alta recuperación de la energía requerida. Esto puede realizarse de dos maneras distintas:

1.- Con **columnas acopladas**, donde el calor disponible en el domo de una columna se utiliza como medio de calentamiento en otra columna. La energía total de entrada al proceso es inversamente proporcional al número de columnas acopladas; por ejemplo, acoplando dos columnas en serie se puede ahorrar hasta un 50% del consumo de energía. En sistemas de separación a temperaturas altas, el calor del destilado puede ser utilizado en la producción de vapor. Este sistema presenta la desventaja de que al estar acopladas las columnas, si alguna tiene que parar, todas lo tienen que hacer, además de que existen ciertas restricciones de temperatura en algunas corrientes, que por sus propiedades podrían polimerizarse o descomponerse a temperaturas mayores, o cristalizarse a temperaturas menores.

2.- Con **bombas de calor**. Mediante circuitos auxiliares, recompresión del vapor del domo o del producto del fondo previamente expandido, se transfiere el calor extraído en el domo al fondo de la columna. Con este sistema la energía ahorrada es muy grande ya que además de reutilizarla

en la misma torre, el sistema de refrigeración permite operar la torre a una presión menor, lo cual favorece la separación disminuyendo indirectamente la energía requerida en el rehedor.

Para la propuesta de mejoramiento del proceso presentada en este trabajo se eligió la segunda opción aplicada a la última columna, ya que las torres se encuentran actualmente acopladas con otras torres de la refinería y no se pretende modificar la estructura global del proceso. Además, la torre separadora de propano y propileno es un sistema apto para la aplicación de bombas de calor ya que cualquiera de estos productos puede ser utilizado como refrigerante y la diferencia entre los puntos de ebullición de ambos es muy poca, lo cual garantiza que el ciclo de refrigeración trabaja en un rango pequeño de temperaturas, haciendo energéticamente viable esta opción.

B.- COLUMNAS DE DESTILACION CON BOMBAS DE CALOR

La teoría sobre bombas de calor se conoce desde hace mucho tiempo; incluso en los años treinta, durante la depresión en Estados Unidos se instalaron columnas de destilación con este sistema; pero hasta hace pocos años, debido a los incrementos sustanciales en los costos de los energéticos y a la evolución en el diseño de compresores (componente clave en las bombas de calor), se justifica el implemento de bombas de calor para un uso eficiente de energía .

Una bomba de calor es por definición un dispositivo termodinámico utilizado para mover calor de una región de baja temperatura a una región de mayor temperatura; la dirección del flujo de calor es opuesta a la dirección establecida por la segunda ley de la termodinámica, por lo tanto se debe suministrar energía externa. Sin embargo, el calor neto de salida de la bomba de calor es igual a la suma de la energía de entrada más la energía transportada, siendo en muchos casos desde una hasta tres veces mayor que la que se suministra.

En términos generales se puede decir que para que una bomba de calor sea justificable en una columna de destilación, se requiere cumplir con los siguientes puntos:

- Las temperaturas de ebullición del producto del fondo y del destilado deben ser cercanas.
- La carga del rehedidor, en operación convencional, debe ser mayor que 7 MMBTU/h.
- El incremento de temperatura al comprimir el vapor debe ser menor que 108 °F (60 °C).
- No debe existir una fuente de calor que se pueda utilizar gratuitamente en el rehedidor, por ejemplo un calor desperdiciado.

Obteniendo como beneficio de su aplicación:

- Una notable disminución en los gastos de operación.
- Requerimientos bajos o nulos de agua de enfriamiento y/o vapor.
- Torres con menor número de etapas de equilibrio, o disminución de reflujo y/o obtención de mayor pureza en el destilado para torres ya existentes.
- Disminución en la emisión de partículas contaminantes normalmente asociadas al rehedidor.

Existen muchos tipos de bombas de calor para diversas aplicaciones; en el caso de columnas de destilación sólo algunos tipos son aplicables y éstos se resumen a grandes rasgos a continuación. A partir de ahora se usará el término de bomba de calor para referirnos al conjunto del dispositivo termodinámico y la columna de destilación, ya que es así como se le llama comúnmente.

1) Bomba de calor con circuito auxiliar

Las bombas de calor con circuito auxiliar son usadas cuando los productos de fondo y destilado no son adecuados para compresión, por lo que es necesario utilizar un refrigerante como medio de transferencia de calor. Desafortunadamente los refrigerantes pueden ser utilizados solo hasta una temperatura de alrededor de 266 °F (130 °C) y en los últimos años se ha prohibido cada vez más el uso de muchos de ellos ya que son productos altamente contaminantes.

La bomba de calor con circuito externo opera con un ciclo termodinámico (mostrado en la figura 6.1) idéntico a un ciclo de refrigeración convencional, solamente difiere en que el propósito principal de este es transferir calor dentro de un sistema delimitado, en lugar de extraerlo del mismo.

Este ciclo consiste en cuatro operaciones básicas: evaporación, compresión, condensación y expansión. El compresor toma el refrigerante en forma de vapor sobrecalentado a baja presión y temperatura (paso 1) y lo comprime a una temperatura y presión mayores (paso 2). El gas con estas condiciones pasa por el condensador, donde cede el calor a la región de alta temperatura¹, cambiando de vapor a líquido a alta presión. El refrigerante sale del condensador como líquido subenfriado (paso 3) para pasar a través de un dispositivo expansor donde pierde presión y temperatura, de forma que el refrigerante puede entrar al evaporador donde toma calor de la región de baja temperatura, evaporándose totalmente para iniciar de nuevo el ciclo.

Una vez expuesto el ciclo termodinámico que realiza la bomba de calor, es sencillo entender cómo funciona ésta en una columna de destilación. El condensador del ciclo de refrigeración equivale al evaporador o rehervidor de la torre, donde el sistema de alta temperatura sería el producto del fondo, el cual se evapora con el calor liberado por la condensación del refrigerante. El evaporador del ciclo de refrigeración equivale entonces al condensador de la torre, siendo el producto del domo el sistema de baja temperatura, el cual se condensa totalmente con el calor que cede para que el refrigerante se evapore. El compresor y el dispositivo expansor (en este caso una válvula) cumplen la misma función, quedando la torre como se muestra en la figura 6.2.

¹La región de alta temperatura se refiere al sistema global (torre de destilación), no significa que se transfiera calor de una zona de menor temperatura a otra de mayor, lo que violaría la segunda ley de la termodinámica. La región de alta temperatura, en una columna de destilación, es el fondo de la torre, mientras que la de baja es el domo.

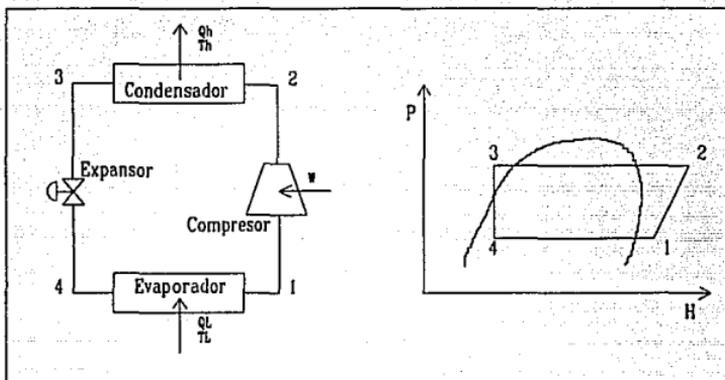


Figura 6.1: Ciclo termodinámico de refrigeración

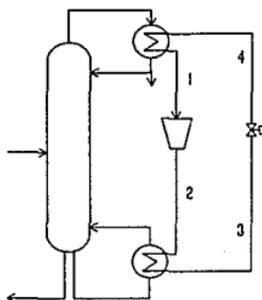


Figura 6.2: Bomba de calor con circuito auxiliar

2) Bomba de calor con recompresión de vapores

Cuando el producto del domo de la torre se puede comprimir, es factible utilizarlo como el medio de transferencia de calor, lo cual representa muchas ventajas, ya que siempre se dispone de refrigerante dentro del sistema y la función del rehedidor y el condensador se hace en un solo

equipo. Es por estas razones principalmente que este sistema es mucho más adecuado que el de circuito auxiliar, pero desafortunadamente muchos de los productos que son factibles de compresión tienen limitaciones prácticas, tales como polimerización, descomposición o corrosión.

En la bomba de calor con recompresión de vapores, se rompe el ciclo termodinámico de refrigeración y se incluye a la columna en el sistema, ya que ésta proporciona directamente el refrigerante en forma de vapor y recibe la parte correspondiente al reflujo en forma de líquido. Las operaciones básicas de compresión, condensación y expansión se conservan y la operación de evaporación la pasa a cubrir la torre, generando el vapor en forma continua (figura 6.3).

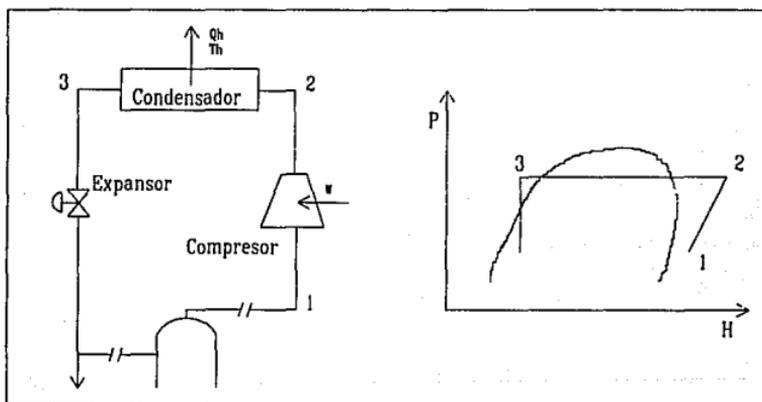


Figura 6.3

El producto del domo entra al compresor en forma de vapor a baja presión y temperatura (paso 1) en donde aumentan estas dos propiedades (paso 2). El vapor a alta presión y temperatura pasa por el condensador en el que cede el calor al sistema de alta temperatura (fondo de la torre), cambiando de vapor a líquido de alta presión. El refrigerante sale del condensador como líquido subenfriado (paso 3) para entrar al dispositivo expansor de donde sale a la presión y temperatura

adecuada para entrar a la torre como reflujo después de pasar por un divisor de corrientes donde se obtiene la parte correspondiente al destilado.

En este esquema, al ser el refrigerante el producto del domo, el condensador hace a la vez las funciones de rehervidor y condensador de la torre, el compresor y la válvula expansoras funcionan de la misma manera que en el ciclo de refrigeración externo, quedando el sistema como se muestra en la figura 6.4.

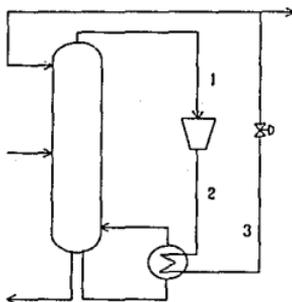


Figura 6.4: Bomba de calor con recompresión de vapores

3) Bomba de calor con expansión de líquido

Cuando el producto del fondo es más factible de compresión que el producto del domo (o es el único factible), es posible utilizarlo como el medio de transferencia de calor, lo cual representa las mismas ventajas que se mencionaron para el caso de recompresión de vapores (disposición de refrigerante y rehervidor-condensador) quedando un sistema mucho más ventajoso que el de circuito auxiliar, pero de igual forma que en la recompresión de vapores muchos de los productos factibles de compresión tienen limitaciones prácticas (polimerización, descomposición, corrosión, etc.).

En la bomba de calor con expansión de líquido, se rompe el ciclo termodinámico de refrigeración y se incluye a la columna en el sistema, en este caso la columna proporciona el producto del fondo para ser usado como el refrigerante en forma de líquido y lo recibe en forma de vapor. Las operaciones básicas de compresión evaporación y expansión se conservan, y la columna toma el lugar de la etapa de condensación del refrigerante, generando el líquido en forma continua (figura 6.5).

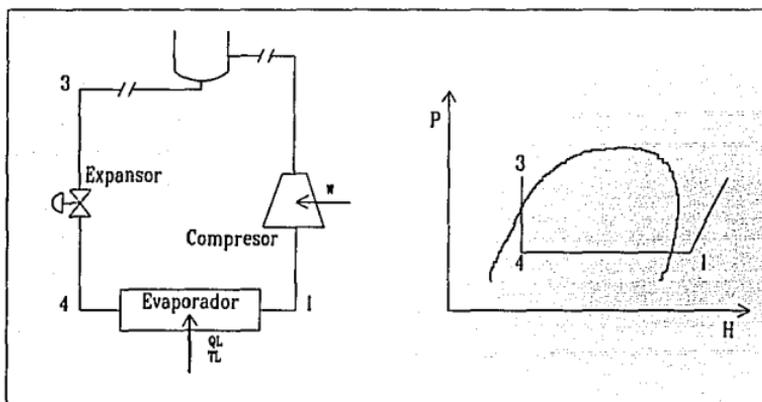


Figura 6.5

En este sistema se comienza con el líquido proveniente de los fondos (paso 3) que entra al dispositivo expansor de donde sale a la presión y temperatura adecuadas para entrar al evaporador (paso 4) donde toma calor de la región de baja temperatura (producto del domo) evaporándose totalmente. El refrigerante (producto del fondo) entra al compresor en forma de vapor a baja presión y temperatura (paso 1) donde se comprime a la presión y temperatura adecuadas para alimentarla al fondo de la columna.

En este esquema, al ser el refrigerante el producto del fondo, el evaporador hace a la vez las funciones de rehervidor y condensador de la torre, el compresor y la válvula expansoras funcionan de la misma manera que en el ciclo de refrigeración, quedando el sistema como se muestra en la figura 6.6.

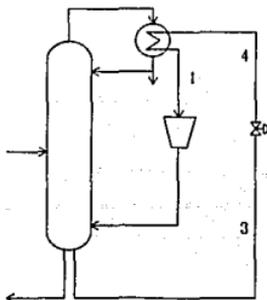


Figura 6.6: Bomba de calor con expansión del producto del fondo

C.- CONSIDERACIONES GENERALES DE LA SIMULACION

Como se mencionó al inicio de este capítulo, la propuesta de mejoramiento del tren de recuperación de vapores de la planta catalítica de Tula está enfocada a la adaptación de una bomba de calor a la columna ya existente para la separación de propano y propileno. Es posible comprimir las corrientes utilizadas sin que exista el peligro de descomposición de alguno de sus componentes, lo que permite plantear cualquiera de los dos sistemas de bombas de calor presentados al final de la sección anterior.

Las propuestas parten de la base de mantener la columna existente en la planta catalítica, lo que provoca cambios en las condiciones de operación para alcanzar la pureza deseada en el destilado. Al utilizar las corrientes de proceso como medios de transferencia de calor, es posible operar la columna a una presión mucho menor que si se utiliza agua de

enfriamiento. Al manejar presiones más bajas, se favorece la separación de los componentes y por lo tanto se puede utilizar menor reflujo de destilado. Es conveniente mencionar que si se mantiene el reflujo con que opera actualmente la torre ($L/D=10.8$) bajo el esquema de bomba de calor, se puede obtener propleno con 99% de pureza en mol, grado que se requiere para su polimerización. Para lograr la pureza reportada en el proceso real, el reflujo puede ser disminuído a $L/D=10.2$.

En la bibliografía no existe ninguna metodología para fijar las presiones de las bombas de calor, por lo que se tuvieron que realizar varias corridas en el simulador. De manera general, la presión en una bomba de calor la determina la carga del intercambiador de calor, en este caso el condensador-rehervidor. Para el caso de la bomba de calor con expansión del líquido del fondo, la corriente del domo debe ser condensada totalmente cediendo el calor a la corriente expandida del fondo; por lo anterior, la presión debe ser tal que la corriente del fondo pueda aceptar todo este calor sin que se crucen las temperaturas en el intercambiador de calor; esto quiere decir que la corriente del fondo debe tener la posibilidad de expandirse lo suficiente como para ser un buen fluido refrigerante.

En el caso de la bomba de calor con recompresión de vapores, la presión está determinada por el grado de compresión necesario para que la corriente del fondo pueda ser evaporada con la corriente del domo, de manera que ésta se acerque lo más posible a su punto de saturación para pasar por la válvula, después de la cual debe quedar con las condiciones necesarias para volverse a alimentar a la torre.

Las condiciones generales que se utilizaron para la simulación de las bombas de calor son las que se conocen como convencionales: por ejemplo, se tomó un acercamiento máximo de 10°F en los intercambiadores de calor y una caída de presión en los mismos de 5 psia para los dos fluidos. Es importante mencionar que con el uso de tecnología moderna se puede alcanzar un mayor aprovechamiento de la energía; un ejemplo de ello lo constituye el posible uso de

Intercambiadores de calor con superficie porosa en el condensador-rehervidor, lo que permite (UOP, 1991) tener acercamientos de hasta 2°F. En el presente trabajo, sin embargo, se evalúan los diferentes sistemas con los equipos tradicionales.

Las propuestas fueron simuladas con ASPEN-PLUS siguiendo todos los criterios de simulación establecidos en el capítulo 5, los resultados obtenidos se presentan en las tablas del final de este capítulo. A continuación se explican los dos sistemas elegidos de bombas de calor.

D.- RESULTADOS DE LA SIMULACION.

Bomba de calor con recompresión de vapores:

El esquema utilizado es básicamente el mismo que se expone en la sección anterior. Para llevar este esquema a la práctica fue necesario agregar dos cambiadores de calor que garanticen la adecuada operación del proceso, quedando el sistema de la siguiente manera (figura 6.7).

La corriente de alimentación (proveniente del domo de la depropanizadora) se expande sin pasar por la bomba utilizada en la estructura original y entra a la torre en el mismo plato de alimentación. La corriente del domo pasa a través de un cambiador de calor en el que se sobrecalienta 5°F lo que asegura la entrada de puro vapor al compresor, que representa la siguiente etapa. Una vez comprimida la corriente, se enfría en un cambiador de calor hasta el punto de saturación, con el fin de reducir el área del condensador-rehervidor, equipo en el que cede calor latente para evaporar la corriente del fondo de la torre. El mismo fluido es el encargado de sobrecalentar a la corriente recién salida del domo (misma corriente), para pasar por la válvula expansora de donde sale a las condiciones adecuadas para alimentarse como reflujo una parte a la torre y obtener el resto como producto destilado.

Bomba de calor con expansión del producto del fondo:

La estructura propuesta se presenta en la figura 6.8. La corriente de alimentación tiene diferentes propiedades que en el caso anterior ya que las condiciones de temperatura y presión se modificaron con el fin de obtener la composición deseada en el destilado bajo este nuevo esquema. Las características de las corrientes se pueden apreciar en las tablas 6.3 y 6.4.

A continuación se describe la ruta que sigue la corriente del fondo de la fraccionadora: sale del último plato de la torre y se expande antes de pasar al intercambiador de calor (condensador-rehervidor) en el que recibe el calor que le cede la corriente del domo de la fraccionadora. La corriente sale de este equipo como vapor sobrecalentado para ser alimentada al compresor (siguiente etapa), donde alcanza la presión suficiente, para que después de enfriarse hasta su temperatura de saturación en otro intercambiador de calor, regrese a la torre con las condiciones adecuadas. Por su parte, la corriente del domo de la torre fluye a través del condensador-rehervidor, pasando posteriormente a un tanque desde donde se bombean las partes correspondientes al producto destilado y reflujo.

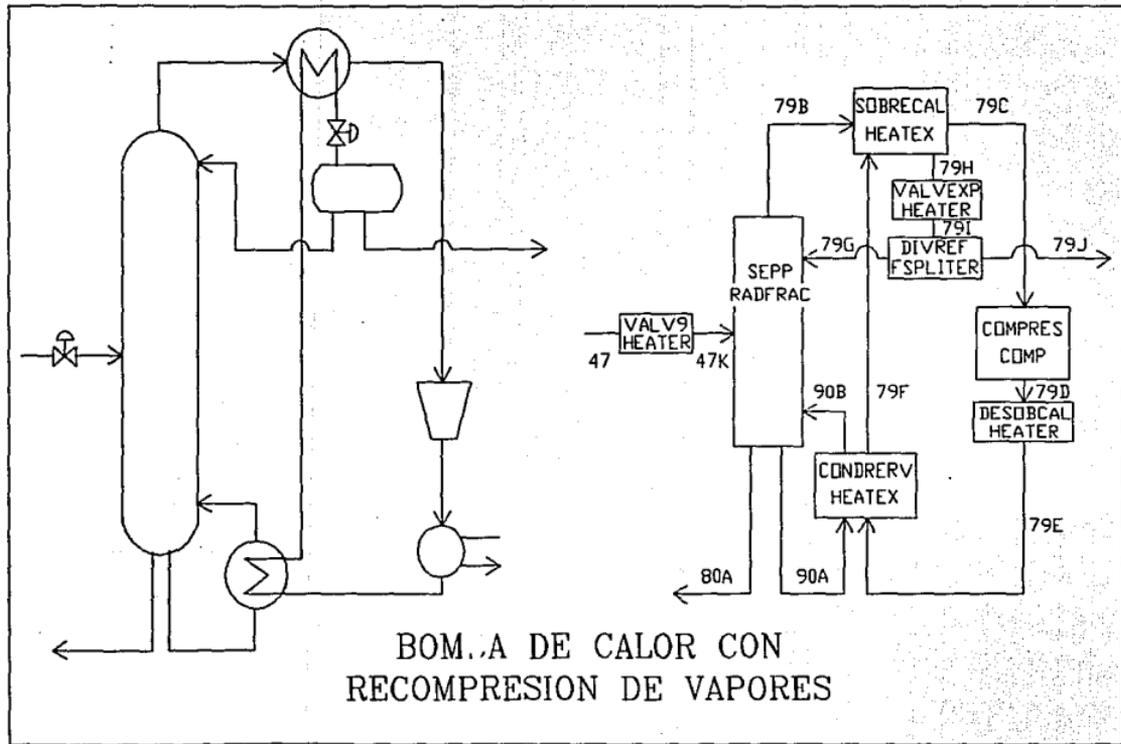


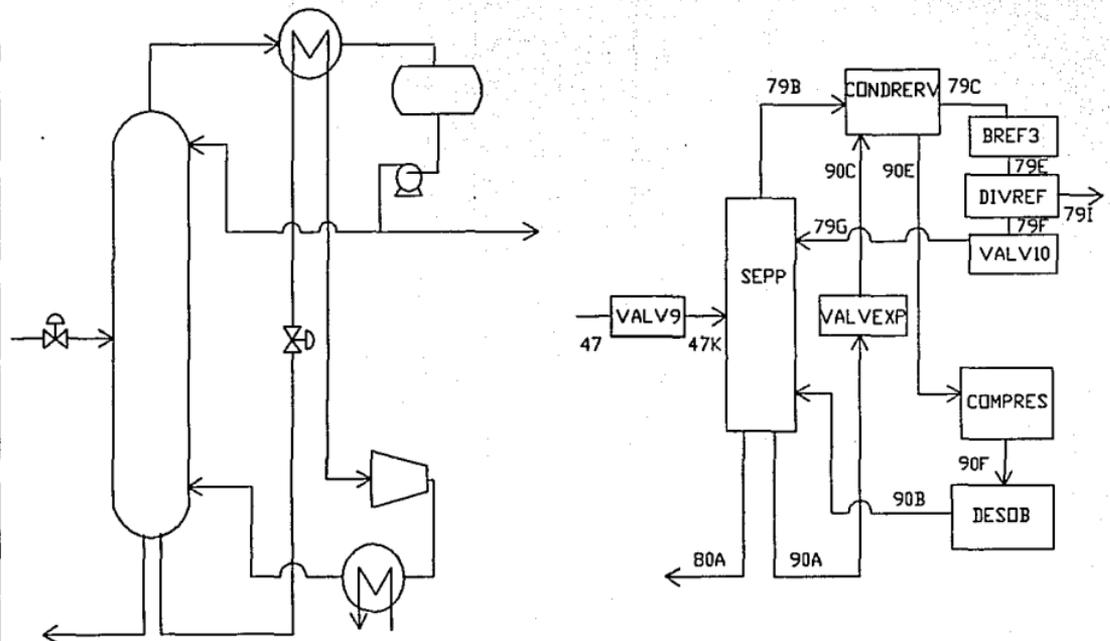
FIGURA 6.7

Corriente número:	47	47X	79B	79C	79D	79E	79F
De:	LB	VALV9	SEPP	SOBREC	COMPR	DESOB	CONRER
A :	VALV9	SEPP	SOBRECAL	COMPR	DESOB	CONRER	SOBREC
Fase:	L10	MEZ	VAP	VAP	VAP	VAP	L10
Componentes Lb/hr:							
-Etano	163.00	163.00	1841.81	1841.81	1841.81	1841.81	1841.81
-Propano	6208.00	6208.00	9676.71	9676.71	9676.71	9676.71	9676.71
-Propileno	22974.00	22974.00	259580.00	259580.00	259580.00	259580.00	259580.00
-Butano	333.11	333.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo total:							
-Lbmot/hr	697.88	697.88	6449.32	6449.32	6449.32	6449.32	6449.32
-Lb/hr	29678.00	29678.00	271100.00	271100.00	271100.00	271100.00	271100.00
-ft ³ /hr	968.67	4053.37	226290.00	240720.00	126940.00	125940.00	8632.17
Temp. °F	103.50	70.79	61.41	66.41	143.77	133.77	95.70
Presión psia	265.60	148.00	133.30	128.30	258.30	253.30	248.30
Frac. vapor	0.00	0.1492	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00
Frac. líquido	1.00	0.8508	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
Entalpia:							
-BTU/lbmol	-8876.78	-8876.77	5832.74	5936.71	6849.69	6670.83	346.57
-BTU/lb	-208.74	-208.74	138.76	141.23	162.95	158.70	8.24
-BTU/hr	-6.19e6	-6.19e6	3.76e7	3.83e7	4.42e7	4.30e7	2.24e6
Entropia:							
-BTU/lbmol-R	-55.06	-56.95	-40.04	-39.77	-39.29	-39.56	-50.68
-BTU/lb-R	-1.29	-1.29	-0.95	-0.95	-0.93	-0.94	-1.21
Densidad:							
-Lbmot/ft ³	0.72	0.17	0.028	0.027	0.05	0.05	0.75
-Lb/ft ³	30.64	7.32	1.20	1.13	2.14	2.15	31.41
PK promedio:	42.53	42.52	42.04	42.04	42.04	42.04	42.04

TABLA 6.1: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número:	79G	79H	79I	79J	80A	90A	90B
De:	DREF3	SOBREC	VALEXP	DREF3	SEPP	SEPP	COMER
A :	SEPP	VALEXP	DREF3	LB	LB	COMER	SEPP
Fase:	MEZ	LIQ	MEZ	MEZ	LIQ	LIQ	VAP
Componentes Lb/hr:							
-Etano	1678.89	1841.81	1841.81	163.01	0.00	0.00	0.00
-Propano	8820.31	9676.70	9676.70	856.39	5298.29	267810.00	267810.00
-Propileno	236610.00	259580.00	259580.00	22973.00	2.08	105.58	105.58
-Butano	0.00	0.00	0.00	0.00	333.12	16838.00	16838.00
Flujo total:							
-Lbmol/hr	5878.55	6449.32	6449.32	570.76	125.93	6365.38	6365.38
-Lb/hr	247110.00	271100.00	271100.00	23992.00	5633.49	284750.00	284750.00
-ft ³ /hr	32994.00	8543.10	36197.00	3203.44	179.25	9060.72	195770.00
Temp. °F	61.54	92.14	61.54	61.54	88.90	88.90	94.38
Presión psia	135.00	243.30	135.00	135.00	156.77	156.77	156.27
Frac. vapor	0.1312	0.00	0.1312	0.1312	0.00	0.00	1.00
Frac. líquido	0.8688	1.00	0.8688	0.8688	1.00	1.00	0.00
Entalpía:							
-BTU/lbmol	242.60	242.60	242.60	242.60	-51777.00	-51777.00	-45370.00
-BTU/lb	5.77	5.77	5.77	5.77	-1157.43	-1157.43	-1014.20
-BTU/hr	1.43e6	1.56e6	1.56e6	1.38e6	-6.52e6	-3.29e6	-2.87e6
Entropía:							
-BTU/lbmol-R	-50.77	-50.87	-50.77	-50.77	-81.57	-81.57	-69.92
-BTU/lb-R	-1.21	-1.21	-1.21	-1.21	-1.82	-1.82	-1.56
Densidad:							
-Lbmol/ft ³	0.18	0.75	0.178	0.178	0.70	0.70	0.033
-Lb/ft ³	7.49	31.73	7.49	7.49	31.42	31.42	1.45
PM promedio:	42.04	42.04	42.04	42.04	44.73	44.73	44.73

TABLA 6.2: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION



BOMBA DE CALOR CON EXPANSION DEL PRODUCTO DEL FONDO

FIGURA 6.8

Corriente número:	47	47K	79B	79C	79E	79F	79G
De:	LB	VALV9	SEPP	CONRER	BREF3	DREF3	VALV10
A :	VALV9	SEPP	CONRER	BREF3	DREF3	VALV10	SEPP
Fase:	L10	MEZ	VAP	L10	L10	L10	L10
Componentes Lb/hr:							
-Etano	163.00	163.00	1843.07	1843.07	1843.07	1679.96	1679.96
-Propano	6208.00	6208.00	2691.49	2691.49	2691.49	2453.29	2453.29
-Propileno	22974.00	22974.00	255140.00	255140.00	255140.00	232560.00	232560.00
-Butano	333.11	333.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo total:							
-Lbmol/hr	697.88	697.88	6185.49	6185.49	6185.49	5638.07	5638.07
-Lb/hr	29678.00	29678.00	259680.00	259680.00	259680.00	236700.00	236700.00
-ft ³ /hr	1003.30	1880.31	136050.00	8161.87	8133.57	7413.75	7152.87
Temp. °F	113.50	100.93	92.94	90.23	91.52	91.53	91.12
Presión psia	265.60	223.00	208.30	123.30	283.30	283.30	208.30
Frac. vapor	0.00	0.068	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Frac. líquido	1.00	0.932	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Entalpía:							
-BTU/lbmol	-8558.65	-8558.65	7345.03	1471.23	1496.54	1496.54	1496.54
-BTU/lb	-201.25	-201.25	174.96	35.04	35.65	35.64	35.64
-BTU/hr	-5.97e6	-5.97e6	4.54e7	9.1e6	9.26e6	8.44e6	8.44e6
Entropía:							
-BTU/lbmol-R	-54.49	-54.47	-39.75	-50.38	-50.37	-50.37	-50.34
-BTU/lb-R	-1.28	-1.28	-0.95	-1.20	-1.20	-1.20	-1.20
Densidad:							
-Lbmol/ft ³	0.69	0.37	0.045	0.76	0.76	0.76	0.76
-Lb/ft ³	29.58	15.78	1.91	31.81	31.92	31.92	31.74
PH promedio:	42.52	42.52	41.98	41.98	41.98	41.98	41.98

TABLA 6.3: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número:	791	80A	90A	90B	90C	90E	90F
De:	DREF3	SEPP	SEPP	DESOB	VALEXP	COMREB	COMPR
A :	LB	LB	VALEXP	SEPP	COMREB	COMPR	DESOB
Fase:	LIQ	LIQ	LIQ	VAP	MEZ	VAP	VAP
Componentes Lb/hr:							
-Etano	163.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-Propano	238.19	5206.76	263180.00	263180.00	263180.00	263180.00	263180.00
-Propileno	22580.00	45.69	2309.56	2309.56	2309.56	2309.56	2309.56
-Butano	0.00	333.12	16838.00	16838.00	16838.00	16838.00	16838.00
Flujo total:							
-Lbmol/hr	547.41	124.89	6312.84	6312.84	6312.84	6312.84	6312.84
-Lb/hr	22982.00	5585.57	282330.00	282330.00	282330.00	282330.00	282330.00
-ft ³ /hr	719.82	193.03	9757.08	126200.00	244730.00	786310.00	173550.00
Temp. °F	91.52	119.11	119.11	123.25	16.75	87.82	242.18
Presión psia	283.30	231.77	231.77	231.77	49.77	44.77	236.00
Fracc. vapor	0.00	0.00	0.00	1.00	0.4037	1.00	1.00
Fracc. líquido	1.00	1.00	1.00	0.00	0.5963	0.00	0.00
Entalpia:							
-BTU/lbmol	1496.54	-50364.00	-50364.00	-44666.00	-50364.00	-44608.00	-41901.00
-BTU/lb	35.64	-1126.12	-1126.12	-998.71	-1126.12	-997.43	-936.91
-BTU/hr	8.2e5	-6.29e6	-3.18e8	-3.82e8	-3.18e8	-2.82e8	-2.64e8
Entropia:							
-BTU/lbmol-R	-50.37	-79.54	-79.54	-69.73	-78.83	-66.78	-65.45
-BTU/lb-R	-1.20	-1.78	-1.78	-1.56	-1.76	-1.49	-1.46
Densidad:							
-Lbmol/ft ³	0.76	0.65	0.65	0.05	0.26	0.008	0.036
-Lb/ft ³	31.93	28.93	28.94	2.24	1.15	0.36	1.63
PH promedio:	41.98	44.72	44.72	44.72	44.72	44.72	44.72

TABLA 6.4: VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

CAPITULO 7
ANALISIS DE LA PROPUESTA

A.- TRABAJO PERDIDO Y ANALISIS TERMODINAMICO.

De manera esquemática, un proceso es un sistema como el representado en la figura 7.1, en donde se señalan las entradas y salidas de materia y los intercambios de energía en forma de trabajo (W) y calor (Q) a través de sus fronteras. Para que el proceso se lleve a cabo, se requiere una cierta cantidad de energía. Sin embargo, en todos los casos el intercambio de energía a través de las fronteras del sistema es mayor que el mínimo necesario. El excedente de energía se puede manifestar de muchas maneras y se conoce como "trabajo perdido".

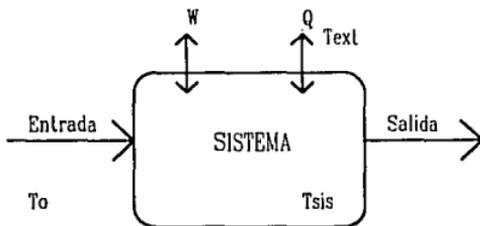


Figura 7.1

El análisis termodinámico de un proceso tiene como fin el determinar la cantidad de trabajo perdido para poder así comparar dos o más procesos equivalentes y seleccionar el que contenga un uso de energía más eficiente. Para un proceso específico, se hace el análisis termodinámico y se estudian las posibilidades (mediante modificaciones en su estructura o condiciones de operación) de disminuir la cantidad de energía en exceso intercambiada con los alrededores del sistema. Por esto, es común analizar los procesos químicos por partes: se establecen las cantidades de trabajo perdido en cada operación unitaria o sección del proceso en donde haya un intercambio importante de energía.

Una vez identificados los puntos del proceso en donde existen cantidades considerables de trabajo perdido, se proponen cambios locales o a todo el proceso en conjunto.

Las posibilidades de modificar un proceso son muy amplias, y no son proporcionadas por la termodinámica; se requieren muchos otros conocimientos para optimizar adecuadamente un proceso.

Como se vió en el capítulo anterior, las modificaciones propuestas en este trabajo son para la columna fraccionadora de propano y propileno. Para ver si éstas tienen ventajas sobre el sistema convencional desde el punto de vista termodinámico, en las siguientes secciones se determina la cantidad de trabajo perdido que existe en los tres sistemas (la torre actual y las dos bombas de calor).

B.- FUNDAMENTOS TERMODINAMICOS.

El propósito de esta sección es el de dar a conocer las principales relaciones que se utilizan en un análisis termodinámico de un proceso a régimen permanente; por ello, no se deducen las fórmulas presentadas y sólo se mencionan los fundamentos básicos sobre los que se sustentan (una revisión formal del desarrollo de las ecuaciones se puede encontrar en De Nevers y Seader, 1984).

El balance de energía para un proceso a régimen permanente se puede expresar de la siguiente manera:

$$W + Q = \sum h_S m_S - \sum h_E m_E$$

en donde sólo se consideran las dos principales manifestaciones de energía en un proceso químico: trabajo (W) y calor (Q). Sin embargo, el calor no es una forma de energía comparable con el trabajo mecánico ya que la transformación del primero en el segundo no se puede llevar a cabo por completo a menos de que el proceso sea reversible. Una manera adecuada de transformar el calor en trabajo es mediante la eficiencia de Carnot (EC):

$$EC = (1 - T_o/T_{ext})$$

De esta manera, un *trabajo mecánico equivalente* (W_e) para todo el sistema, al que contribuyen el trabajo mecánico y el calor, se puede expresar como:

$$W_e = W + Q(EC)$$

Además se puede demostrar (De Nevers, 1984), mediante la conjunción de la primera y segunda leyes de la termodinámica, que el trabajo mínimo equivalente (W_{emin}) o trabajo reversible de un proceso, está regido por la siguiente ecuación:

$$W_{emin} = \sum(h_s - T_o S_s) m_s - \sum(h_e - T_o S_e) m_e$$

El trabajo mínimo equivalente es la cantidad mínima de energía que el proceso requiere o, en el caso contrario, la máxima cantidad disponible que un proceso puede proporcionar. El término $h - T_o S$ se conoce como la función de disponibilidad, formulada por Keenan en 1941, que se deriva directamente de la segunda ley de la termodinámica.

Como se mencionó en la sección anterior, todos los procesos intercambian con los alrededores más energía que la expresada por W_{emin} ; este exceso de energía es el trabajo perdido W_p . La expresión matemática que define al trabajo perdido (proveniente también de la segunda ley de la termodinámica) está en función del cambio de entropía del sistema (ΔS):

$$W_p = T_o \Delta S$$

donde:

$$\Delta S = \sum S_s m_s - \sum S_e m_e - Q / T_{ext}$$

que representa la irreversibilidad del proceso (para un proceso reversible el cambio de entropía es cero). El grado de reversibilidad de un proceso depende de muchos factores y como se

pueda ver, la manera de minimizar el trabajo perdido es mediante la eliminación o disminución de las principales causas de las irreversibilidades. Para esto, es necesario hacer un análisis exhaustivo del proceso y proponer algunos cambios que estarán limitados por las condiciones del sistema.

El trabajo equivalente (W_e) está compuesto entonces por los dos términos descritos anteriormente: el trabajo reversible o trabajo mínimo equivalente (W_{emin}) y el trabajo perdido (W_p) de manera que se puede establecer la siguiente igualdad:

$$W_e = W_{emin} + W_p$$

Con las relaciones anteriores es posible calcular el trabajo perdido si se conocen las propiedades de las corrientes de un proceso. Ahora bien, el nivel del análisis termodinámico es muy variable ya que depende del tamaño del sistema elegido: se puede hacer el análisis alrededor de todo el proceso o en cada uno de los equipos que lo conforman.

C.- METODOLOGIA UTILIZADA.

Para realizar un buen análisis termodinámico es necesario seguir una metodología establecida; ésto con el fin de ser congruentes en los diferentes sistemas que se analicen. En el presente trabajo se sigue una recomendación general (Bazúa, 1990) para la determinación del trabajo perdido asociado a la fraccionadora de propano y propileno bajo los tres esquemas presentados; la recomendación incluye los siguientes puntos:

- a) Establecer las condiciones de operación del proceso que se desea estudiar.
- b) Efectuar las mediciones de temperatura, presión, flujo y composición.
- c) Dividir el proceso en secciones de modo que se conozcan las condiciones de las corrientes de entrada y salida involucradas.

d) Efectuar los balances de energía en cada sección para lo que es necesario calcular ΔH_t (cambio total de entalpía):

$$\Delta H_t = \sum h_s m_s - \sum h_e m_e$$

e) Calcular el cambio de entropía entre las corrientes de salida y de entrada (ΔS_t):

$$\Delta S_t = \sum S_s m_s - \sum S_e m_e$$

f) Determinar el trabajo mínimo equivalente en cada sección del proceso:

$$W_{\text{emin}} = \Delta H_t - T_0 \Delta S_t$$

g) Calcular la generación de entropía en cada sección y el trabajo perdido:

$$\Delta S = \Delta S_t - Q/T_{\text{ext}}$$

$$W_p = T_0 \Delta S$$

Definir las fronteras de los distintos sistemas es de gran importancia en esta tarea ya que de ello depende la cantidad de trabajo perdido asociado a cada parte del proceso; además una buena definición puede facilitar los cálculos o permitir el análisis de un proceso cuando no conocemos los datos de los equipos. En el presente trabajo se definieron los distintos sistemas sin involucrar las corrientes de calor o trabajo intercambiadas, esto quiere decir que la obtención del valor del trabajo perdido se hizo a partir de las corrientes de proceso únicamente. Por ejemplo, para un intercambiador de calor en el que una de las corrientes no pertenece al proceso, el sistema queda definido excluyendo a dicha corriente como se muestra en la figura 7.2.

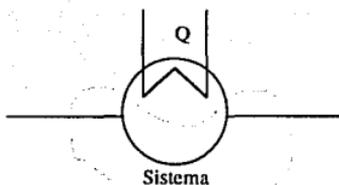


Figura 7.2: Sistema que solo considera corrientes de proceso

Una de las mayores ventajas que se obtiene de aplicar esta metodología es el hecho de que se puede analizar -e incluso optimizar- un proceso a partir de los datos generados en los balances de materia y energía.

D.- RESULTADOS.

Los resultados que se presentan a continuación fueron obtenidos siguiendo la metodología descrita en la sección anterior. Por el hecho de haber utilizado un simulador de procesos las propiedades de las corrientes no fueron medidas directamente, como se indica en el inciso (b) de dicha metodología. El análisis y la importancia de los resultados serán tratados en el capítulo siguiente, en donde además se obtienen las principales conclusiones del presente trabajo.

TORRE ACTUAL
LOS DATOS DE LAS CORRIENTES ESTAN REPORTADOS EN LA TABLA 5.6

EQUIPO	CORRIENTES		ΔHt	ΔSt	Wemin	ΔS	WP	
	ENTRADA	SALIDA						BTU/lbmol
BALIM	47	47J	2.81E+04	2.19E+01	1.63E+04	2.19E+01	1.18E+04	
VALV9	47J	47K	-5.65E+00	6.35E+00	-3.42E+03	6.35E+00	3.47E+03	
SEPP	79G 90B 47K	79B 80A 90A	1.49E+03	2.78E+03	-1.49E+06	2.78E+03	1.49E+06	
CSEPP	79B	79C	-4.06E+07	-7.10E+04	-2.44E+06	1.17E+03	6.26E+05	
BREF3	79C	79E	2.88E+05	1.09E+02	2.29E+05	1.09E+02	5.86E+04	
VALV10	79F	79G	-1.69E+03	3.16E+02	-1.72E+05	3.16E+02	1.70E+05	
RSEPP	90A	90B	4.04E+07	6.78E+04	4.03E+06	1.84E+04	9.86E+06	
							WP =	1.22E+07

BOMBA DE CALOR CON RECOMPRESION DE VAPORES
LOS DATOS DE LAS CORRIENTES ESTAN REPORTADOS EN LAS TABLAS 6.1 Y 6.2

EQUIPO	CORRIENTES		ΔHt	ΔSt	Wemin	ΔS	WP	
	ENTRADA	SALIDA						BTU/lbmol
VALV9	47	47K	0.00E+00	8.17E+01	-4.38E+04	8.17E+01	4.38E+04	
SEPP	47K 79G 90B	80A 79B 90A	-4.06E+02	4.34E+03	-2.33E+06	4.34E+03	2.33E+06	
SOBREC	79B 79F	79C 79H	7.45E-09	4.97E+02	-2.67E+05	4.97E+02	2.67E+05	
COMPRES	79C	79D	5.89E+06	3.11E+03	4.22E+06	3.11E+03	1.67E+06	
DES0B	79D	79E	-1.15E+06	-1.73E+03	-2.23E+05	3.20E+02	1.72E+05	
CONRER	79E 90A	79F 90B	-4.14E+03	2.42E+03	-1.31E+06	2.42E+03	1.30E+06	
VALEXP	79H	79I	1.93E+00	6.08E+02	-3.27E+05	6.08E+02	3.27E+05	
							WP =	6.11E+06

BOMBA DE CALOR CON EXPANSION DEL PRODUCTO DEL FONDO
LOS DATOS DE LAS CORRIENTES ESTAN REPORTADOS EN LAS TABLAS 6.3 Y 6.4

EQUIPO	CORRIENTES		ΔHt	ΔSt	Wemin	ΔS	WP	
	ENTRADA	SALIDA						BTU/lbmol
VALV9	47	47K	-3.91E+00	1.91E+01	-1.03E+04	1.91E+01	1.03E+04	
SEPP	79G 90B 47K	79B 80A 90A	7.07E+05	4.04E+03	-1.46E+06	4.04E+03	2.17E+06	
CONRER	79B 90C	79C 90E	4.47E+03	1.03E+04	-5.54E+06	1.03E+04	5.55E+06	
BREF3	79C	79E	1.57E+05	6.49E+01	1.22E+05	6.49E+01	3.49E+04	
VALV10	79F	79G	-1.86E+01	1.87E+02	-1.01E+05	1.87E+02	1.01E+05	
DES0B	90F	90B	-1.75E+07	-2.70E+04	-2.95E+06	4039.205	2.17E+06	
VALEXP	90A	90C	2.52E+01	4.49E+03	-2.41E+06	4.49E+03	2.41E+06	
COMPRES	90E	90F	1.71E+07	8.40E+03	1.26E+07	8.40E+03	4.51E+06	
							WP =	1.70E+07

E.- ASPECTOS ECONOMICOS.

En esta sección se hace un pequeño análisis comparativo entre el sistema convencional y las bombas de calor propuestas desde un punto de vista económico. El análisis contempla únicamente los costos de operación desde el punto de vista de los servicios auxiliares requeridos en cada caso; los costos de inversión y mantenimiento de estas plantas están fuera del alcance de este proyecto ya que dependen de muchos factores que no se han considerado. De cualquier forma, los costos de operación son una parte muy importante en la elección de una tecnología ya que, como en este caso, generalmente están asociados a factores energéticos lo que implica que un ahorro en el consumo de energía es un ahorro en el costo de operación de una planta.

Los servicios auxiliares que se utilizan en los sistemas tratados por este trabajo son: agua de enfriamiento, vapor y electricidad. Las cantidades de los mismos, así como las condiciones de operación de las diferentes columnas están expuestas en la tabla 7.4. En ella se pueden apreciar las principales diferencias que existen entre los sistemas de bombas de calor y el sistema convencional.

En la tabla 7.5 se presenta un resumen de los servicios auxiliares; como se puede apreciar, la principal diferencia entre el sistema convencional y las bombas de calor es que el primero consume una enorme cantidad de vapor y relativamente poca energía eléctrica, mientras que las dos bombas de calor requieren de grandes cantidades de electricidad y nada de vapor. Por esto, si se quiere hacer un análisis económico, es preciso determinar los precios de estos dos servicios.

La tarifa eléctrica mexicana está determinada con exactitud por la Comisión Federal de Electricidad para las diferentes aplicaciones en cada zona del país, sin embargo, hablar del precio del vapor dentro de una refinería es muy complicado ya que éste puede provenir de muchos lugares, incluso puede ser desperdicio de otros procesos, en cuyo caso su costo se

	Sistema convencional	Bomba de calor con recompresión de vapor	Bomba de calor con expansión de fondos
Q Condensador (BTU/h)*	40,575,000	40,784,500	36,332,300
Q Rehervidor (BTU/h)	40,423,000	40,784,500	36,332,300
Agua (ft ³ /h)**	26,021	740	11,191
Vapor (lb/h)***	46,818	-----	-----
Electricidad (kWh)	765,426	14,322,060	41,948,195
Presión (psia)	260	133	208
Temp. domo (°F)	110	61	93
Temp. fondo (°F)	130	89	119
Relación de reflujo (L/D)	10.8	10.3	10.3
Pureza de propileno (%)	88	95.8	98.2
Recup. de propileno (%)	99.98	99.99	98.28

* El condensador y rehervidor es el mismo equipo para las bombas de calor.

** El agua de enfriamiento cambia de 90 a 115°F

*** El vapor es de 150 psia, saturado

Tiempo de operación: 8,300 h/año

Tabla 7.4: Principales características de los sistemas estudiados

vería muy reducido. En la tabla 7.6 se presentan los costos de operación para los tres sistemas considerando el precio real de la electricidad en la zona de Tula (140 \$/KWh), el precio del agua para la misma zona (2.54 \$/ft³) y un escenario muy conservador para el precio del vapor (Peters & Timmerhaus, 1991) que está por debajo de los 10 \$/lb. Si consideramos un precio de vapor más elevado de 22 \$/lb (Meili, 1990), el sistema convencional adquiere costos de operación mucho mayores, lo que apoya más la elección de una bomba de calor.

	Sist. convencional	Recomp. de vapor	Expansión del fondo
Agua (ft ³ /h)	26,021	740	11,191
Vapor (lb/h)	46,818	-----	-----
Electricidad (kWh)	765,426	14,322,060	41,948,195

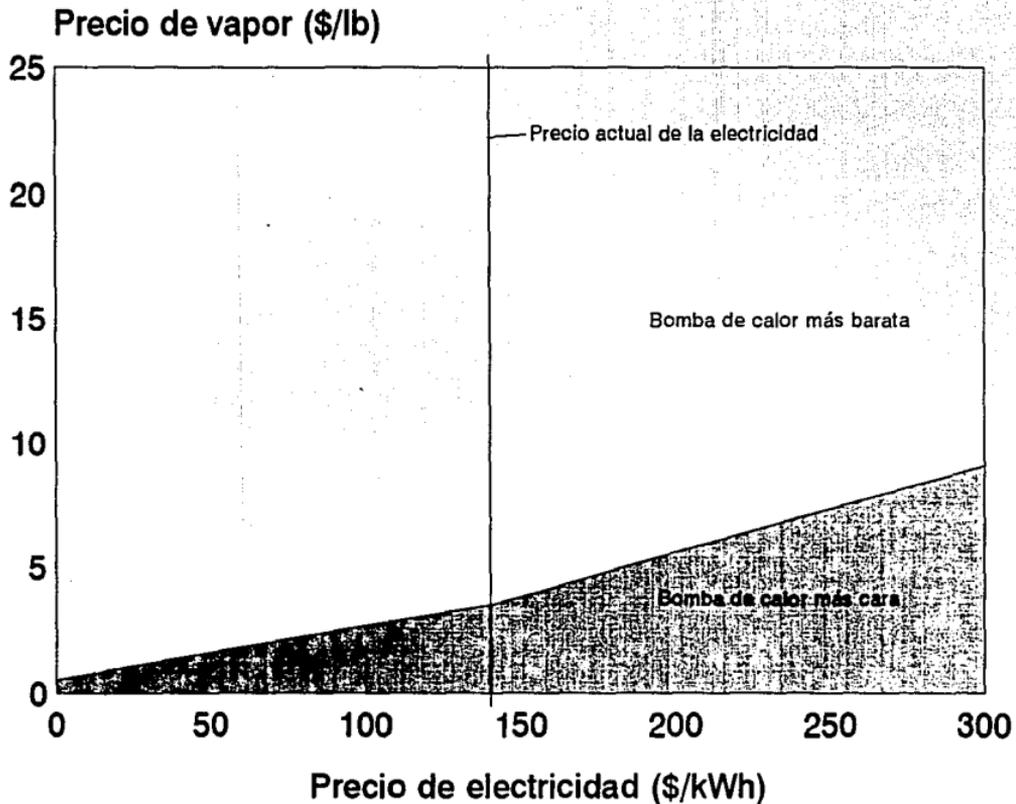
Tabla 7.5

	Sist. convencional	Recomp. de vapor	Expansión del fondo
Agua (MM\$/año)	549	16	236
Vapor (MM\$/año)	3,730	0	0
Elec. (MM\$/año)	107	2,005	5,873
TOTAL (MM\$/año)	4,386	2,021	6,109

Tabla 7.6

Para generalizar los resultados, en la figura 7.2 se presentan una gráfica que relaciona los precios del vapor y la electricidad dentro de sus rangos normales. La línea resultante en la gráfica corresponde al equilibrio entre los dos sistemas, esto quiere decir, que para cualquier punto sobre la línea, los costos de operación del sistema convencional y de la bomba de calor en cuestión son los mismos. En la gráfica se muestra el precio de la electricidad en Tula, lo que determina automáticamente un punto a partir del cuál la bomba de calor es un sistema más económico desde el punto de vista de costos de operación.

Bomba de calor con recompresión de vapores



CAPITULO 8

CONCLUSIONES

A.- SIMULACION DEL TREN DE RECUPERACION DE VAPORES

Los primeros resultados que se muestran en este trabajo son los correspondientes a las variables de proceso del tren de recuperación de vapores obtenidos en la simulación de la planta con ASPEN-PLUS. De estos resultados (Tablas 5.1 a 5.6) se puede destacar que la simulación representa bastante bien al proceso real, teniendo variaciones aceptables, excepto en dos casos:

* *Los valores obtenidos para las gasolinas* presentan desviaciones considerables con respecto al proceso real, esto se debe a que PEMEX no reporta la composición de dicha mezcla, por lo que fue necesario definir una mezcla de trabajo que representara lo mejor posible a la gasolina real. Definir una mezcla de varios compuestos bajo estas condiciones es algo muy difícil de realizar; después de probar muchas mezclas con diferentes composiciones de hidrocarburos, se encontró una que representa bastante bien al sistema, aunque con cierto rango de error, principalmente en el peso molecular.

* *Las composiciones de las corrientes del domo y el fondo de la torre separadora de propano y propileno* presentan una desviación fuerte con respecto a las que se reportan para el proceso existente. Se simuló la torre utilizando parámetros de interacción especiales para propano y propileno, se hicieron corridas simultáneas en el simulador de procesos CHEM-CAD, se probaron varias ecuaciones de estado y se definieron diversos juegos de variables. Para todos los casos se obtuvo que la pureza del propileno en el destilado es de alrededor del 88% y no del 95% como reporta PEMEX, lo cual nos lleva a pensar que en el proceso real no se están obteniendo las especificaciones requeridas.

Por último vale la pena mencionar que ASPEN-PLUS demostró ser más rápido, preciso y versátil que los demás simuladores con que cuenta el departamento de ingeniería de

la Facultad, presentando como única desventaja que en el equipo de computo utilizado (soporte físico) es muy lento al utilizar la interfase gráfica con el usuario, por lo que se utilizó de manera directa (introduciendo los valores y especificaciones en el lenguaje de programación del simulador), lo que provocó que el sistema fuera menos amigable. Consideramos que sería conveniente designar a este simulador el soporte físico adecuado para poder utilizarlo al 100% de su capacidad. De cualquier manera, el presente trabajo cumplió con uno de sus objetivos principales que es el de dar a conocer a la comunidad de la Facultad de Química la herramienta recién adquirida y presentar los primeros resultados que con ella se obtienen.

B.- ANALISIS DE LA PROPUESTA DE MEJORAMIENTO

En las tablas 6.1 a 6.4 se presentan los resultados obtenidos en la simulación de los dos sistemas de bombas de calor propuestos. Lo primero que podemos destacar es el hecho de que utilizando la misma columna se alcanza, en los dos casos, purezas diferentes (ambas mayores de 95%, que es la especificada por PEMEX) utilizando un reflujo de $L/D=10.2$. El hecho de obtener diferentes composiciones manejando el mismo reflujo nos lleva a hablar de dos sistemas diferentes, ya que la mayor pureza obtenida con la bomba de calor con expansión del producto del fondo tiene un costo energético considerablemente mayor, lo cual no quiere decir que el sistema sea económica y/o termodinámicamente menos factible: si se quiere comparar los dos sistemas, es necesario que con ellos se obtengan las mismas especificaciones.

Otro punto importante que presentan las propuestas es que no requieren vapor. En ambos casos se requiere de agua de enfriamiento pero en cantidades menores a las del sistema convencional; esta es una ventaja muy grande si consideramos que en Tula el agua disponible es poca y tiene que ser obtenida de mantos acuíferos a 9 km. de la refinería.

En las tablas mostradas en el capítulo 7 se presenta un análisis termodinámico de los dos sistemas propuestos y el sistema actual. En dicho análisis se puede apreciar que en la bomba de calor con recompresión de vapores (en la que se obtienen las especificaciones de diseño) el trabajo perdido es la mitad del que se tiene actualmente y que en la bomba de calor con expansión del producto del fondo es mayor (39%) debido a que se obtiene una pureza mucho más elevada. Al tener una menor cantidad de trabajo perdido se tiene un sistema con un uso más eficiente de energía lo que nos lleva a un menor consumo de la misma. Además, en las bombas de calor los equipos que liberan trabajo o calor a los alrededores son válvulas expansoras, lo cual podría permitir una mayor recuperación si se utiliza este trabajo mediante equipos expansores más adecuados..

Si bien las bombas de calor presentan un ahorro evidente en cuanto al consumo de vapor y agua, es cierto que el consumo de energía eléctrica es considerablemente mayor, lo que puede ser una desventaja dependiendo de la disponibilidad relativa de cada servicio. Por otro lado, con el continuo desarrollo que han tenido los sistemas de cogeneración en las plantas industriales, el problema planteado se puede reducir ya que se puede obtener la energía eléctrica a menor costo, al mismo tiempo que se genera vapor para utilizarse en otras partes de la planta en donde es realmente necesario.

Es importante comentar que gracias al análisis termodinámico se pudieron detectar y corregir errores en la simulación. Esta es una razón más para utilizar dicha metodología en el análisis de un proceso.

Desde el punto de vista del equipo requerido, los sistemas de bombas de calor presentan la ventaja de que se trabaja a menor presión que en un sistema convencional, lo que permite tener columnas más ligeras y seguras; en caso de ser torres nuevas, éstas son más económicas. La desventaja se presenta en el compresor, ya que es un equipo con un costo muy elevado.

C.- TRABAJOS FUTUROS.

Durante la elaboración de esta tesis nos dimos cuenta de la posibilidad de desarrollar mucho más algunos de los temas presentados. Dichos temas pueden ser la materia de otros trabajos y los resumimos a continuación:

-Desarrollo de rutinas para evaluar el trabajo perdido de manera directa en el simulador.

-Desarrollo de rutinas para obtener los valores óptimos de las variables de proceso mediante la minimización del trabajo perdido o la maximización de la eficiencia termodinámica.

-Desarrollo de una metodología para determinar la presión óptima a la que se debe operar una bomba de calor, así como la determinación del mejor esquema.

BIBLIOGRAFIA:

- Balzhiser, R.E., Samuels M.R. Termodinámica para Ingenieros. Cali: Prentice Hall, 1977. 610 pp.
- Bazúa Rueda Enrique *"Notas del curso de propiedades termodinámicas"* México: Facultad de Química, UNAM, 1990.
- Brannock, N.F. et al. *"Process Simulation Program. A Comprehensive Flowsheeting Tool for Chemical Engineers"*
- Chávez Chavarría Ambrosio, Un nuevo método para la simulación de torres de destilación de multicomponentes. Tesis. México: UNAM, ENEP Zaragoza, 1985. 236 pp.
- Collie M.J. Heat Pump Technology for Saving Energy. New Jersey: Noyes Data Co., 1979 347 pp.
- Evans, Lawrence B. *"Advances in Process Flowsheeting Systems"* en Mah, R. S. H., Seider, W.D. Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design, V.1. New York: Engineering Foundation, 1981. p. 425-469.
- Evans, Lawrence B. *"Computer-Aided Design (CAD): Advances in Process Flowsheeting Systems"* Gran Bretaña. Computers & Chemical Engineering. V. 3 pp. 329-352, 1989.
- Gary, James H., Handwerk, Glenn E. Petroleum Refining Technology and Economics, V.5. New York: Marcel Dekker, 1975. 365 pp.
- González Ayala Laura Patricia. Simulación de torres de destilación multicomponente usando la ecuación de estado PRSV con diferentes reglas de mezclado. Tesis. México: C.U., 1992. 172 pp.
- Henley, E.J., Seader, J.D. Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. México: Reverté, 1990. 814 p.
- Holland, Charles D. Fundamentos de destilación de mezclas multicomponentes. México: Limusa, 1988. 705 pp.

- Husain, Asghar. Chemical Process Simulation, New Delhi: Wiley Eastern Ltd., 1986. 376 pp.
- Kenney W.F. Energy Conservation in the Process Industries, Orlando: Academic Press, 1984. 329 pp.
- Luyben, William M. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2a ed. Singapur: McGraw Hill, 1989. 726 pp.
- Meili, Albert. "Heat Pumps for Distillation Columns" Chemical Engineering Progress. Junio, 1990. pp. 60-65.
- Montiel M. Celestino, Gutiérrez C. David. "Simulación y optimización de una planta de etileno" Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, UNAM.
- Nevers Noel de, Seader J.D. "Mechanical lost work, thermodynamic lost work, and thermodynamic efficiencies of processes" Latin American Journal of heat and mass transfer, 1984. pp. 77-105.
- Ojeda Ramos Miguel, Métodos modulares simultáneos para la simulación de procesos químicos en estado estacionario. Tesis. México: UNAM, ENEP Zaragoza, 1987. 562 pp.
- PEMEX, Refinería de Cadereyta, Superintendencia de proceso. Planta de desintegración catalítica FCC. Manual de operación. 153 pp.
- Peters M.S., Timmerhaus K.D. Plant Design and Economics for Chemical Engineers, Singapur: McGraw Hill, 1991. 910 pp.
- Smith, J.M., Van Ness, H.C. Introducción a la termodinámica en ingeniería química. México: McGraw Hill, 1989. 717 pp.
- Sulzer Heat Pump Technology (Manual descriptivo del funcionamiento de los sistemas de bombas de calor).
- UOP, Equipo de Proceso. "Tecnología avanzada de transferencia de calor con tubos 'High Flux'" Houston, 1991.

UOP, Equipo de Proceso. *"Platos de alta capacidad para destilación, absorción y extracción"* Houston, 1991.

Upchurch, J.A. *"Big Texas C₃ splitter unites feedstock suppliers with users"* Oil & Gas Journal, Marzo 30, 1992. pp. 58-63.

Urbina del Raso, Alberto. *"El método McCabe-Thiele según lo impartía el maestro Estanislao Ramírez"* Educación Química, V1, No. 4. Oct. 1990. pp. 180-185.

Vogler, T.C., Weissman, W. *"Thermodynamic Availability Analysis for Maximizing a System's Efficiency"*. Chemical Engineering Progress. Marzo, 1988. pp. 35-42.

Westerberg A.W. et al. *Process Flowsheeting*. Melbourne: Cambridge, 1976. 345 pp.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Costing Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Data Regression Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Electrolytes Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Interactive Simulation, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS ModelManager and ASPEN PLUS, Installation and Reference for the PC, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS ModelManager, Getting Started and Tutorials for the PC., 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Notes on Interfaces and User Models, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Solids Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Stream Libraries and Insert Libraries, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Summary File Toolkit, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS User Guide, 1991.*

APENDICE
ECUACIONES DE ESTADO

ECUACIONES DE ESTADO

Las expresiones matemáticas que relacionan la presión, el volumen y la temperatura (PVT) de un sistema se conocen como ecuaciones de estado. Una buena ecuación de estado es quizás el mejor método para manejar muchos datos de PVT, y lo que es más importante, es el medio más eficiente y versátil para conocer las funciones termodinámicas a partir de esta información.

A pesar de que se han desarrollado muchas ecuaciones de estado, ninguna de ellas ha demostrado ser lo suficientemente poderosa como para satisfacer todas las áreas de aplicación científica y de ingeniería. Las diferentes aplicaciones de las ecuaciones de estado dependen de las condiciones del sistema con el cual se piensa utilizar. Afortunadamente, se ha podido hacer generalizaciones en cuanto a los límites o rangos adecuados de utilización de las diferentes ecuaciones. Por ejemplo, es bien sabido que existen varias ecuaciones que predicen con bastante exactitud las propiedades de los hidrocarburos dentro de ciertos rangos de PVT.

El presente trabajo utiliza una ecuación de estado en un sistema en donde se manejan hidrocarburos ligeros. Por esto se describirá brevemente la ecuación que se eligió para calcular todas las propiedades termodinámicas del proceso. Pero antes de eso, se presenta el desarrollo que han tenido las ecuaciones de estado antes de llegar a la escogida.

Después de la aparición de la ecuación de Van der Waals en 1873, en la que se hace una primera aproximación a la continuidad entre los estados líquido y gaseoso, han surgido innumerables modificaciones e intentos por mejorar los resultados que con ella se obtienen, ya que éstos no son adecuados en un gran número de situaciones. De especial importancia resulta ser la modificación que presentan Redlich y Kwong (R-K) en 1949, ya que se cree que es la primera ecuación de estado que ha tenido éxito en aplicaciones industriales (como ejemplo está la correlación de Chao-Seader para equilibrio líquido-vapor). Sin embargo, la ecuación R-K fue la

materia prima para otros investigadores en su intento por encontrar otra expresión que presentara mejores resultados.

Wilson fue el primer investigador en utilizar el factor acéntrico (propuesto por Pitzer et al. en 1955) en su modificación a la ecuación R-K. En realidad, la ecuación de Wilson es la precursora de las modificaciones más exitosas: la ecuación de Soave y la ecuación de Peng y Robinson. Estas han demostrado soportar las duras y extensas pruebas hechas por las Instituciones académicas y la industria, mientras que otras modificaciones no han tenido éxito en esas aplicaciones, o no han durado lo suficiente como para afrontarlas.

Además de lo presentado anteriormente, han existido otras líneas de desarrollo de ecuaciones de estado para aplicación a procesos químicos. Un buen ejemplo de esto es el surgimiento de la ecuación de Beattie-Bridgeman (con excelentes resultados para gases reales) seguida por la ecuación de Benedict-Webb-Rubin (aplicable a líquido y vapor).

Como la ecuación elegida para hacer los cálculos de equilibrio en este trabajo fue la de Peng y Robinson, se hablará con más detalle de ésta y de la ecuación de Soave, que es la otra modificación exitosa de la ecuación R-K. Esto nos lleva a no hablar de un gran número de ecuaciones, entre las que destacan la ecuación Virial, la de Beret y Prausnitz, el principio de los estados correspondientes etc. De cualquier forma, en la siguiente tabla se presentan los tres principales caminos seguidos en el desarrollo de las ecuaciones de estado:

Camino 1	Van der Waals → Redlich-Kwong → Wilson → Soave y Peng-Robinson.
Camino 2	Beattie-Bridgeman → Benedict-Webb-Rubin → Starling → Starling-Han.
Camino 3	Thiele → Camahan-Starling → Beret-Prausnitz → Donahue-Prausnitz.

ECUACIONES DE SOAVE (SRK) Y DE PENG-ROBINSON (P-R)

La ecuación de estado de Redlich-Kwong puede ser escrita de la siguiente manera:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)}$$

En esta ecuación, el parámetro a está en función de la temperatura de la siguiente manera:

$$a = a' T^{-1}$$

en donde a' es una función de la composición.

En 1972, Soave modificó el parámetro a de la ecuación R-K haciéndolo función no sólo de la temperatura sino también del factor acéntrico ω ; de esta manera, la ecuación denominada de Soave-Redlich-Kwong (SRK) queda expresada de la siguiente manera:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a_s}{V(V+b)}$$

donde:

$$a_s = a_c \left[1 + (0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2) \left(1 - T_r^{1/2} \right) \right]^2$$

$$a_c = \frac{0.42748 R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0.08664 RT_c}{P_c}$$

Con la modificación de Soave se encontró que la ecuación de estado predice con bastante exactitud el equilibrio líquido-vapor para mezclas multicomponentes de compuestos no polares. Para mezclas que contienen hidrógeno se reportan resultados menos precisos. Como la

ecuación de Soave está enfocada también a obtener presiones de vapor razonables para fluidos puros, no hay seguridad de que los volúmenes molares calculados con esta ecuación sean más exactos que aquéllos que resultan de la ecuación original de Redlich y Kwong.

La ecuación de Peng y Robinson (P-R) también fue enfocada al cálculo de equilibrios líquido-vapor. La expresión es la siguiente:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a_{PR}}{V^2 + 2bV - b^2}$$

en donde: $a_{PR} = a_c' \left[(1 + 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) (1 - T_r^{1/2}) \right]^2$

$$a_c' = \frac{0.45724 R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0.0778 RT_c}{P_c}$$

Si bien la ecuación P-R no es muy exacta en el cálculo de volúmenes molares, sí presenta algunas evoluciones con respecto a la ecuación de Soave porque los resultados que arroja son más precisos y aplicables a más situaciones. Debido a que en el presente trabajo se utiliza la ecuación P-R, a continuación se muestran algunas expresiones derivadas de ésta que predicen propiedades de mezclas:

Para cualquier componente i :

$$a_{PR,i} = a_{c,i}' \alpha_i^{1/2}$$

$$\alpha_i^{1/2} = 1 + m_i (1 - T_r^{1/2})$$

donde:

$$m_i = 0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2$$

$$a_{ci}' = \frac{0.45724 R^2 T_{ci}^2}{P_{ci}} \quad b_i = \frac{0.0778 RT_{ci}}{P_{ci}}$$

Si se denomina:

$$A_i = \frac{(a_{ci}')^2 \alpha_i^{1/2}}{RT} \quad B_i = \frac{b_i}{RT}$$

Las reglas de mezclado utilizadas por Peng y Robinson quedan:

$$A = \sum_i y_i A_i \quad A^2 = \left(\sum_i y_i A_i \right)^2 = \sum_i \sum_j y_i y_j A_i A_j$$

$$B = \sum_i y_i B_i$$

y si se incluye el coeficiente de interacción k_{ij}

$$A^2 = \sum_i \sum_j y_i y_j A_i A_j (1 - k_{ij})$$

con lo que¹:

$$\Omega = h - h^0 = RT(Z - 1) + \frac{RTA^2}{2\sqrt{2}B} \left[\frac{2T}{A^2} \sum_i y_i \overline{A_i^2} \left(\frac{1}{\alpha_i^2} \frac{d\alpha_i}{dT} \right) - 1 \right] \ln \frac{Z + (1 + \sqrt{2})BP}{Z + (1 - \sqrt{2})BP}$$

¹La obtención de estas expresiones no se hace paso por paso pues no es el objetivo de este trabajo. Sólo se presentan las ecuaciones que son de utilidad en el cálculo de propiedades.

y:

$$\ln \frac{f_i^v}{P_i y_i} = \frac{B_i}{B} (Z - 1) - \ln(Z - BP) - \frac{A^2}{2\sqrt{2}B} \left(\frac{2\overline{A_i^2}}{A^2} - \frac{B_i}{B} \right) \ln \frac{Z + (1 + \sqrt{2})BP}{Z + (1 - \sqrt{2})BP}$$

en donde:

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad \overline{A_i^2} = A_i \sum_j y_j A_j (1 - k_{ij})$$

Para el cálculo de $\ln(f_i^v/Px_i)$ se usa la misma expresión pero con datos de fracción mol y densidad de líquidos en el lado derecho de la ecuación. El coeficiente de distribución vapor-líquido, que es ampliamente utilizado en los cálculos de las torres de destilación, se obtiene de la siguiente manera:

$$K_i = \frac{f_i^l \cdot Px_i}{f_i^v \cdot Py_i}$$

NOMENCLATURA:

- h Entalpía molar.
- h^0 Entalpía molar en un estado de referencia.
- k_{ij} Coeficiente de Interacción.
- P Presión.
- P_c Presión crítica.
- R Constante de los gases.
- T Temperatura.
- T_c Temperatura crítica.
- T_r Temperatura reducida.
- V Volumen molar.
- Z Factor de compresibilidad.
- ω Factor acéntrico.