



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE LA PLANTA
CRIOGÉNICA DEL COMPLEJO MATAPIONCHE
PGPB**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

Presenta:

REAL BERRIOZÁBAL VANESSA

MÉXICO, D.F.

2006





Universidad Nacional
Autónoma de México



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 esta 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.

JURADO

Presidente: Prof. Alberto Bremauntz Monge

Vocal: Prof. Celestino Montiel Maldonado

Secretario: Prof. Pedro Roquero Tejeda

Primer Suplente: Prof. José Fernando Barragán Arroche

Segundo Suplente: Prof. Martín Rivera Toledo

Sitio donde se desarrollo el tema:

Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos.
Conjunto E, Departamento de Ingeniería Química
Facultad de QUÍMICA
Universidad Nacional Autónoma de México

Asesor del Tema:

I.Q. Celestino Montiel Maldonado

Sustentante:

Real Berriozábal Vanessa

Este trabajo esta dedicado a:

Mis Padres: Ernesto Real y Roció Berriozábal

Gracias por todo lo que me han enseñado, inculcado, demostrado, aguantado, esperado, regañado, son mi ejemplo, ¡ lo máximo! ☺, esto no es lo último, se los aseguro...

Mi hermano: Ernesto Real

Pues dedicado a ti, amigo, ¿verdad?! XD Jeje.

Mis abuelos: Esther Ortega, Ismael Quiroz.
Felipe Real.

Su apoyo y cariño, estarán siempre conmigo, son y serán un fuerte ejemplo siempre, desde donde estén, va para ustedes con mucho cariño y respeto....

Mi abuela: Cristina Real

Gracias por acompañarme en todo este camino.

Mi asesor: Prof. Celestino Montiel

El tiempo que he pasado trabajando con usted he aprendido muchas cosas, que no solo que me ayudaran en mi desempeño como profesional, sino como persona, en verdad no podría haber aprendido tanto como lo he hecho aquí, gracias por todo.

A:

Berenice Olvera
Isela Del Angel
Haydee Tlatelpa

Esperando que siempre, puedan contar conmigo así como yo con ustedes, de cada una he aprendido (666, cómo olvidarlo ☺) y me alegro de que se cruzaran en mi camino, gracias amigas por todo.....

A: Maytonce García

¿Cómo? ¡Esperan que escriba tanto en tan poco!, jejeje, tu apoyo y cariño incondicional, paciencia que hasta un santo envidiaría, mucho que agradecer *.* , sabes que gran parte de esto es lo que es gracias a ti.

A ustedes:

Juan M., J. Pedro, mis pacientes compañeros de lab. Tania, siempre es bueno tener quien te de tus cocos, Francisco-san, por que en poco tiempo me has brindado tu amistad ¡domo arigatou!, Judith, Laura, Kenia, Jesús, Rosalía, por estar ahí algunas veces para escucharme otras veces para terapearme. ... ¿¿¿qué ya se acabaron???? ¬_¬! muchas gracias por estar ahí.... (T.T siento si he olvidado a alguien)

	Página
Índice de figuras y tablas	iii
<u>INTRODUCCIÓN</u>	iv
<u>Capítulo I SIMULACIÓN DE PROCESOS</u>	
INTRODUCCIÓN	2
DISEÑO DE PROCESOS	3
Desarrollo del diseño de procesos: Síntesis Análisis y Optimización	4
Síntesis de un proceso	4
Análisis o simulación de un proceso	5
Optimización	6
SIMULACIÓN DE PROCESOS	8
Elementos necesarios en los sistemas de simulación de procesos	9
Modelos	9
Algoritmos	10
Soporte computacional	11
Interfase con el usuario	11
CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN	12
Simulación cualitativa y cuantitativa	12
Simulación estacionaria y dinámica	13
Simulación que maneja variables estocásticas o determinísticas	13
Simulación de eventos discretos	13
SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS	14
Simuladores globales u orientados a ecuaciones	14
Simuladores modulares secuenciales	16
Simuladores basados en una estrategia modular secuencial-simultáneo	19
<u>Capítulo II Complejo Procesador de Gas Matapionche</u>	
PETROLEOS MEXICANOS (PEMEX)	23
PEMEX gas y petroquímica básica PGPB	23
Petroquímicos básicos	23
COMPLEJO PROCESADOR DE GAS MATAPIONCHE:	25
Introducción.	26
Ubicación del Complejo.	26
Plantas de proceso	27
Proceso de Endulzamiento de gas.	28
Proceso de recuperación de azufre.	29
Proceso Criogénico.	30
Llenado de Pipas de Naftas y LPG	31

Capítulo III SIMULADOR DE PROCESOS ASPEN PLUS

INTRODUCCIÓN	33
SIMULADOR DE PROCESOS ASPEN PLUS	34
Modelos de operaciones unitarias de ASPEN PLUS	35
Algoritmos	39
Soporte computacional	41
Interfase con el usuario	42

Capítulo IV SIMULACIÓN DE LA PLANTA CRIOGÉNICA DEL CPG MATAPIONCHE

SIMULACIÓN DE LA PLANTA CRIOGÉNICA DEL CPG MATAPIONCHE	45
Seleccionar unidades. Seleccionar modelos de cálculo	45
Seleccionar modelos de cálculo	47
Diagrama de flujo de proceso	48
Especificación de componentes	50
Partir el proceso en bloques de operaciones unitarias	52
Definición de los datos	53
Definir condiciones de operación de los equipos	57
Determinar el método de convergencia	60
Generación del reporte de la simulación	61

Capítulo V ANÁLISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES 62Capítulo VII Bibliografía 70

APÉNDICE 74

FIGURA.	Página
I.1 Papel de la Ingeniería Química en la vida del hombre.	3
I.2 Desarrollo del diseño de procesos. Síntesis Análisis y Optimización.	7
I.3 Elementos necesarios de un sistema de simulación de procesos	9
I.4 Esquema de un proceso y su traducción al diagrama de flujo de información.	17
I.5 Diag. De simulación a través de un programa de simulación de procesos.	20
I.6 Etapas de la simulación de procesos.	21
II.1 PEMEX Gas y Petroquímica Básica.	23
II.2 Complejo procesador de gas Matapionche.	25
II.3 Ubicación del complejo PGPB Matapionche.	26
II.4 Distribución del complejo PGPB Matapionche.	26
II.5 Proceso de Producción.	27
II.6 Proceso de endulzamiento.	28
II.7 Proceso de recuperación de azufre.	29
II.8 Proceso Criogénico.	30
II.9 Llenado de pipas y LPG.	31
III.1 Presentación Simulador ASPEN PLUS.	35
III.2 Ejemplo modelos operaciones unitarias.	35
III.3 Ciclos múltiples de iteración.	39
III.4 Reporte generado por el simulador.	43
IV.1 Abrir una simulación en blanco.	46
IV.2 Seleccionar unidades.	46
IV.3 Selección modelos de cálculo.	47
IV.4 Selección del equipo.	49
IV.5 Corrientes de alimentación y salida.	49
IV.6 Especificación de componentes.	50
IV.7 Componentes definidos en el simulador.	51
IV.8 Simulación cerrada del equipo DA31-101.	52
IV.9 Simulación abierta del equipo DA31-101.	52
IV.10 Definición de los datos en el simulador.	53
IV.11 Definición de las condiciones de operación de los equipos.	57
IV.12 Método de convergencia.	61
V.1 Planta Criogénica Complejo Procesador de Gas Matapionche	63
TABLA	
I.1 Principales características de los simuladores orientados a ecuaciones.	15
I. 2 Principales Características de los Simuladores Modulares Secuenciales.	18
II.1 Petroquímicos básicos.	24
III.1 Modelos de operaciones unitarias de ASPEN PLUS.	36
III.2 Modelos de cálculo de propiedades Físicas en ASPEN PLUS.	38
III.3 Métodos de convergencia utilizados en ASPEN PLUS.	40
IV.1 Especificación de componentes.	51

INTRODUCCIÓN

La simulación de procesos es una de las herramientas fundamentales para el desarrollo, diseño y optimización de procesos, esto no es exclusivo de industria química, sino de cualquier ingeniería, ahora con las continuas innovaciones y mejoras en los programas de simulación es posible realizar simulaciones más complicadas que antes llevaban mucho tiempo en su cálculo.

En el caso de la industria química, la simulación de procesos en estado estacionario ha tenido una notable evolución, hasta el punto en el que cada vez es mayor el número de operaciones y equipos que se pueden modelar de forma confiable en simuladores comerciales, como lo son ASPEN PLUS y HYSYS entre otros.

En el presente trabajo se presenta la aplicación y selección de diferentes elementos que interviene en el proceso de simulación de la planta criogénica del complejo PGPB Matapionche.

En el capítulo 1 se presenta, en un principio el concepto de diseño de procesos, lo que nos lleva a un análisis general de cada uno de los elementos que intervienen en él; ya que de ahí se da pie para profundizar en la simulación de procesos que es el tema principal de este trabajo, se dan a conocer los elementos necesarios para llevarla a cabo, así como una clasificación de acuerdo al modelo matemático que se utilizará para resolver el proceso a simular.

En el capítulo 2 se da una descripción del complejo procesador de gas Matapionche, se describe el proceso completo del complejo para ubicar a la planta criogénica en un escenario más completo.

En el capítulo 3 se da una explicación completa del simulador ASPEN PLUS 11.1, basados en las partes que se describen en el capítulo 1.

En el capítulo 4 se desarrolla la simulación de la planta criogénica describiéndose paso a paso el uso del simulador ASPEN PLUS mientras se introducen los datos del proceso.

El análisis de resultados y conclusiones se presenta en el capítulo 5, comparando los datos del diseño con los generados por el simulador tanto de las corrientes como de los equipos y se dan algunas observaciones y recomendaciones para mejorar el proceso, también se señalan los posibles trabajos que se podrían desarrollar en un futuro, a partir de aquí.

Capítulo 1

Simulación de Procesos

INTRODUCCIÓN

Hasta hace menos de medio siglo el diseño de un proceso estaba a cargo del químico quien para ello se basaba en la reacción de síntesis que había seleccionado en el laboratorio, por lo tanto no se invertía mucho esfuerzo en optimizar cada parte del proceso, predominando la preocupación de duplicar las especificaciones de calidad de la primera producción experimental.

Los dos cambios más importantes que se reconocían al pasar del laboratorio a la planta industrial eran:

- a) El manejo de volúmenes mayores de producción.
- b) El manejo de materiales.

Cada proceso seguía considerándose como un todo y sólo se descomponía en sus partes para diseñar cada recipiente. Esta consideración global incluía desde el conocimiento de las materias primas hasta el de las especificaciones del producto final, pasando por las reacciones alternativas y el equipo disponible, todo esto dentro del conocimiento del medio en el cual se estaba desarrollando el proceso.

La demanda de materiales durante y después de la segunda guerra mundial y la demanda creciente de productos después, llevaron a que se formalizara el concepto de las operaciones unitarias y al reconocimiento del potencial del proceso continuo en la industria química.

Ambos conceptos tuvieron como consecuencia la generación de una nueva profesión: la del **Ingeniero Químico**.

La formalización del concepto de **operaciones unitarias**, permitió la formación de expertos dedicados a optimizar una sola operación unitaria, mediante el estudio a fondo de sus mecanismos, de las variables de que dependía y de los mejores equipos para llevarla a cabo.

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 pueden ser explicados por medio de diferentes ciencias como la termodinámica, los fenómenos de transporte, la dinámica de fluidos, etc.

La **Ingeniería de Procesos** es una práctica que tiene como uno de sus objetivos diagnosticar las necesidades de un problema, dirigido hacia la creación, cuantificación y análisis de los esquemas del proceso de una planta química. Además busca aplicar un conjunto de diversos conceptos, encaminados al cambio que se requiere y el rendimiento deseado, para el proceso en estudio.

Cómo resultado, de la ingeniería de procesos, una de las ventajas obtenidas es el enfoque en el proceso que ayudará a visualizar a la empresa, para estar al tanto de su seguimiento de operación, de tal manera que siempre, la empresa, este en un continuo crecimiento.

El fin de la **Ingeniería Química**, que se puede describir como la búsqueda de satisfacer las necesidades del hombre, está relacionado con lo más elemental que son los fenómenos naturales.

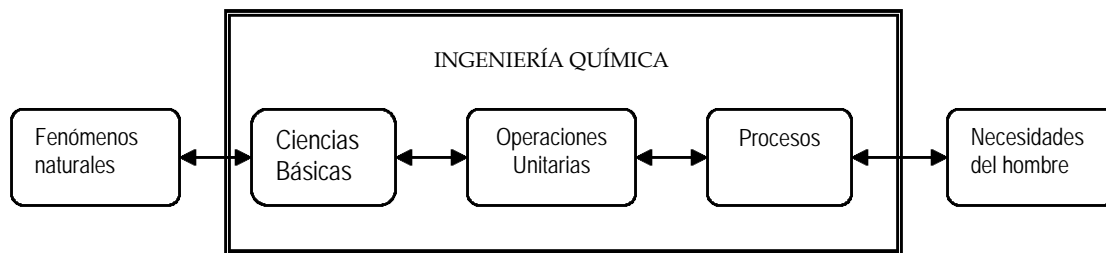


FIG I.1 Papel de la Ingeniería Química en la vida del hombre

Conforme el paso del tiempo los procesos han ido evolucionando y ajustándose a nuevas especificaciones, por lo que ya no sólo se requiere hacer un proceso, sino que cada día es más necesario analizarlo para su optimización, es decir, enfocarnos más al **diseño de procesos** que es una de las etapas fundamentales dentro de un proyecto para la realización de una planta.

DISEÑO DE PROCESOS

Las etapas secuenciales aconsejadas para realizar la tarea de diseño, comprenden:

1. La definición del problema.
2. El establecimiento de la función objetivo, es decir, la determinación de los criterios en función de los cuales deben seleccionarse alternativas.
3. La síntesis del sistema propiamente dicha, que implica el conjunto de alternativas estructurales posibles.
4. La reducción del espacio de alternativas, seleccionando aquellas que cumplan en forma óptima con las especificaciones establecidas.

Desarrollo del diseño de procesos: Síntesis Análisis y Optimización

Debido a que con el tiempo se ha ido incrementando la dimensión de los problemas asociados a la tarea de diseño, su elevado índice combinatorio y la gran cantidad de información que debe manejarse, la única herramienta viable para tal fin resultan ser los métodos computacionales, ya que presenta ventajas en el desarrollo de los cálculos y ahorran tiempo.

La *etapa de análisis* fue la primera en desarrollarse, en la década del 70 comienza al consolidarse una línea de investigación que abarca los métodos computacionales en la ingeniería química; en particular la simulación de procesos por computadora o *process flowsheeting*, como parte de una actividad más general, la actividad del diseño de procesos asistido por computadora (*Computer Aided Design-CAD*).

Con respecto a la *etapa de síntesis*, los conceptos utilizados para la construcción de algoritmos se fundamentan en los más variados campos del conocimiento, programación mixta, álgebra booleana, termodinámica, computación, sistemas expertos, etc., que dan las bases teóricas a los diversos algoritmos propuestos para la generación de estructuras y la selección de la óptima.

A continuación se explican los elementos que se involucran el diseño de procesos:

☐ **Síntesis** de un proceso:

La *síntesis de procesos* es la actividad de toma de decisiones, por ejemplo:

- a) Cual de las muchas partes componentes del sistema, disponibles deberán usarse.
- b) Cómo estas partes deberán interconectarse o ensamblarse para estructurar la solución óptima a un dado problema de diseño. Ya sea en el caso de crear un nuevo proceso o para mejorar uno existente.
- c) Implica el definir las entradas y salidas del sistema, en este caso las características de materias primas y productos deseados.
- d) Estipular la estructura del proceso, es decir, la secuencia de operaciones unitarias y las diferentes interconexiones entre ellas.
- e) se proponen los flujos de materia y energía necesarios, que se requieren para llevar a cabo la transformación deseada de las materias primas a productos.
- f) El espacio de las diferentes alternativas estructurales, definidas por la topología y la naturaleza de las interacciones entre las unidades;
- g) El espacio de los diseños alternativos para cada una de las unidades de operación que componen el sistema.

En consecuencia, *la etapa de síntesis* en el diseño del proceso es el paso creativo que implica la determinación y generación del conjunto de alternativas estructurales posibles capaces de cumplir con los objetivos especificados.

☐ **Análisis** o simulación de un proceso:

La *etapa de análisis* implica la investigación de las características de cada alternativa generada, por ejemplo, mediante la evaluación de las variables de salida, conociendo las características del sistema y las variables de entrada. Por lo general se utilizan reglas eurísticas con las cuales es posible reducir el número de estructuras generadas en la etapa de síntesis.

Debe ser claro que cada solución al problema original de la síntesis de un proceso implica un nuevo problema de análisis del proceso; una vez que se define el diagrama de flujo del problema original, se plantea el análisis o simulación de este proceso para establecer las salidas que se obtienen y compararlas con las que se habían estipulado originalmente.

Al llevar a cabo el análisis o simulación del proceso:

- I. Se establecen las bases de diseño: elección de todas las variables involucradas en el proceso.
- II. Se fijan los modelos matemáticos para cada una de las operaciones.
- III. cálculos de propiedades termofísicas así como los requerimientos de servicios auxiliares.
- IV. Establecer una estrategia de diseño: asignarle valores adecuados a las variables independientes o manipulables del proceso.
- V. Determinar los métodos de convergencia a utilizar.
- VI. Se establecen los balances de materia y energía.
- VII. Se calculan las corrientes de proceso, los parámetros de los equipos, el resumen de servicios auxiliares.
- VIII. Se plantea el diagrama de flujo de proceso para el estado estacionario.
- IX. Se también realizar la comparación entre factores tales como la eficiencia termodinámica e impacto ambiental.
- X. Se realiza una primera evaluación económica.

▣ Optimización:

La *tarea de optimización* se plantea generalmente en la etapa de análisis, y permite seleccionar el mejor sistema entre las alternativas posibles.

La idea principal de la optimización de procesos radica en reconocer que existe un gran número de maneras para lograr algo y que entre ellas hay una que es la mejor tomando en cuenta la medida de efectividad elegida, que se conoce como la función objetivo. Desde un punto de vista matemático podemos decir que, siempre que en la descripción formal de un problema el número de variables controlables sea mayor que el número de ecuaciones independientes que lo describen, se plantea un problema de optimización y la diferencia entre estos dos números nos define los grados de libertad.

En esta etapa, una vez que se agotan los grados de libertad en forma de variables de diseño, se plantea una función objetivo que trata de minimizar algún tipo de salidas o beneficios del proceso, o bien de maximizar algún tipo de salidas o beneficios para el proceso, para obtener las mejores variables de diseño.

Al disponer de técnicas de optimización que automáticamente encuentran, con base al planteamiento del problema, las mejores alternativas, es evidente que se podrán obtener mejores resultados y se puede dedicar mayor tiempo al análisis de la estructura del proceso en estudio.

Es importante recordar que un método de optimización no puede producir resultados buenos si la información con la que se obtienen es deficiente, estos métodos sólo son formas eficientes de exploración pero no pueden sustituir el conocimiento cuantitativo de los fenómenos fisicoquímicos que ocurren en el proceso estudiado.

La optimización del proceso se puede llevar a cabo en dos niveles:

- Optimización de parámetros: Se refiere a maximizar o minimizar funciones específicas, de acuerdo a restricciones de diseño y operación, con la finalidad de encontrar los mayores beneficios, manipulando distintos parámetros como presión, temperatura, etc.
- Optimización estructural: Se presentan cuando hacemos modificaciones a las corrientes de alimentación, bloques de proceso, diagramas de flujo, involucrando equipos y/o sus conexiones, etc.

Es de gran importancia considerar, en el planteamiento de un problema, que el modelo usado deberá ser una representación simplificada que tome en cuenta los aspectos más relevantes del problema real para que dé la mejor aproximación al mismo y permita una resolución eficiente y económica.

Las etapas de la Ingeniería de Procesos, se engloban para proporcionar toda la información necesaria del proceso químico, detallando cada uno de los datos fundamentales para arrancar el proyecto.

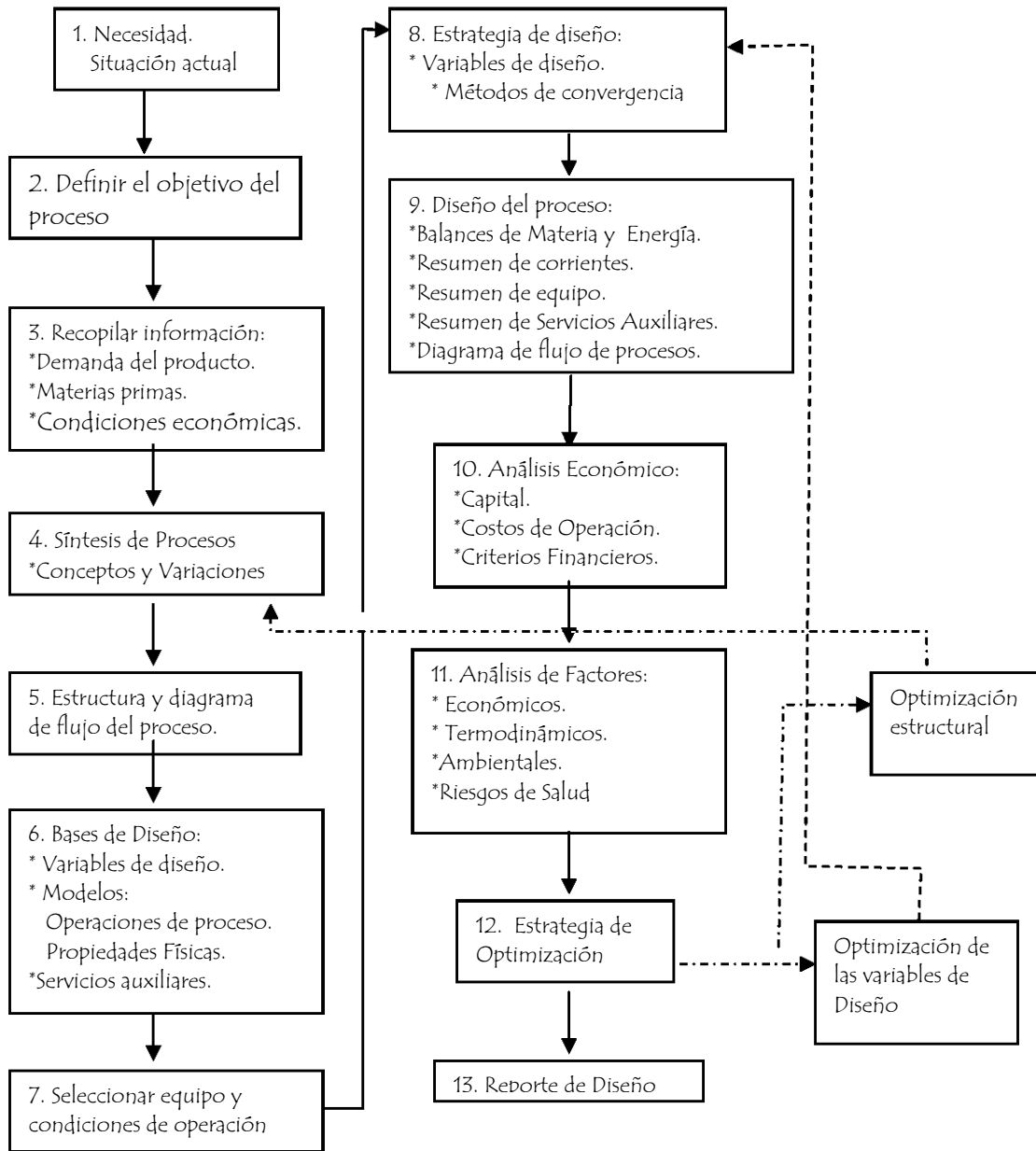


FIG. I.2 Desarrollo del diseño de procesos. Síntesis Análisis y Optimización.

SIMULACIÓN DE PROCESOS

La industria química se encuentra en una fase de gran desarrollo y día con día se proponen nuevos procesos o modificaciones a los ya existentes. Gran parte de este desarrollo ha sido posible gracias a las técnicas de que se dispone actualmente para evaluar rápidamente nuevas configuraciones de proceso, una de estas técnicas recibe el nombre de simulación matemática de procesos, entendiéndose por simulación la representación de un proceso por medio de un modelo matemático que se resuelve para obtener información acerca del comportamiento del proceso.

En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos, utilizando los fenómenos de analogía.

Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evoluciona lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la primera en muchas aplicaciones.

En 1946 se desarrolla la primera computadora electrónica operativa (la ENIAC en la Universidad de Pensilvania), recién en 1951 se presenta la primera computadora comercial. A partir de esta década se incorpora a la mayoría de las universidades de los países desarrollados un centro de cómputos. Un hecho relevante es la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales. Este hecho produce una revolución "informática", en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; a una computadora relativamente eficiente, y al alcance de más personas, ya que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado.

Como consecuencia del acelerado desarrollo en este campo, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos precomputadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química.

En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, (el FLOWTRAN). A partir de allí se ha generado una sucesión de acontecimientos que permiten en la actualidad la existencia de varios y eficientes simuladores comerciales como por ejemplo SPEED UP, ASPEN PLUS, PRO II, HYSYM, HYSYS, CHEMCAD, y otros.

ELEMENTOS NECESARIOS EN LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN DE PROCESOS

Todos los sistemas de simulación de procesos contienen cinco elementos principales:

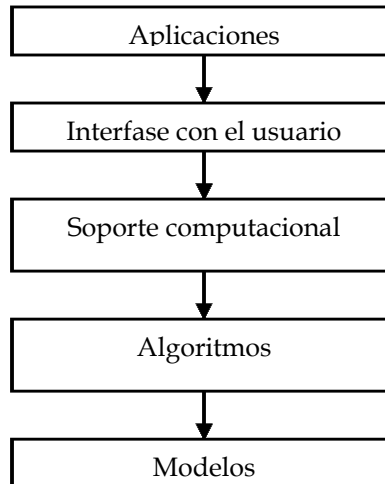


FIG I.3 Elementos necesarios de un sistema De simulación de procesos

□ **MODELOS:**

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 termofísicas, relaciones de conexión y restricciones de diseño y control. Estos modelos matemáticos se representan por ecuaciones algebraicas o diferenciales que definen el proceso.

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. Cuánto más preciso sea el modelo, mejor es la representación de la realidad que se obtiene.

Para desarrollar adecuadamente un modelo debemos considerar:

- I. Ecuaciones de balance de materia y energía.
- II. Naturaleza de los parámetros.
- III. Cinética química de la reacción.
- IV. Transferencia de masa y energía.
- V. Precisión y detalle que queremos obtener.
- VI. Efecto de cambios que se puedan presentar.

□ ALGORITMOS:

El problema matemático se sujeta al tipo de estudio y/o recursos disponibles, por lo que puede estar conformado por: ecuaciones de tipo diferenciales o algebraicas (lineales o no), por lo tanto se requiere que el algoritmo sea tan general como sea posible y eficaz en su ejecución y práctico.

Los métodos numéricos son una clase de algoritmos para resolver una amplia variedad de problemas matemáticos. Únicamente se emplean operaciones lógicas y aritméticas; por consiguiente, pueden implementarse fácilmente sobre computadoras digitales.

Lo que pretende un algoritmo es sintetizar de alguna forma una tarea, cálculo o mecanismo antes de ser transcrito a la computadora. Los pasos que hay que seguir son los siguientes:

- I. Análisis previo del problema.
- II. Primera visión del método de resolución.
- III. Descomposición en módulos.
- IV. Programación estructurada.
- V. Búsqueda de soluciones parciales.
- VI. Ensamblaje de soluciones finales.

Las características fundamentales que debe cumplir todo algoritmo son:

- I. Un algoritmo debe ser preciso e indicar el orden de realización de cada paso.
- II. Un algoritmo debe estar definido. Si se sigue un algoritmo dos veces, se debe obtener el mismo resultado cada vez.
- III. Un algoritmo debe ser finito. Si se sigue un algoritmo se debe terminar en algún momento; o sea, debe tener un número finito de pasos.

La combinación de métodos numéricos y computadoras digitales constituye una poderosa herramienta para el análisis matemático. Por ejemplo, los métodos numéricos son capaces de manejar no linealidades, modelos asociados a geometrías complejas y sistemas de ecuaciones acopladas que son necesarios para el modelado eficiente de muchos sistemas fisicoquímicos que se presentan en ingeniería. Sin embargo, también es cierto que existen muchos problemas que son imposibles de resolver utilizando métodos numéricos. En los últimos años se han desarrollado grandes programas computacionales comerciales para simular el comportamiento de sistemas de ingeniería de todo tipo.

☐ SOPORTE COMPUTACIONAL:

Con el desarrollo de la ciencia de la computación, herramienta complementaria al análisis numérico y simbólico, se abrieron caminos revolucionarios. Como contar con herramientas más potentes para resolver sistemas de ecuaciones, resultó un gran paso adelante. Más aún, la velocidad de cálculo provocó que la dimensión abordable se incrementara rápidamente.

En efecto, si bien el grado de complejidad conceptual para resolver la inversa de una matriz de dimensión tres es equivalente al de una de cinco mil, resulta obvio que la complejidad operativa no resulta comparable. La computación ha barrido literalmente con dicha limitación, haciendo ahora tratables problemas cuya dimensión es tal, que décadas atrás ni siquiera era pensable plantearlos.

Lo conforman dos partes el soporte lógico o software y el físico o hardware, ambos incluyen todos los implementos necesarios para que los algoritmos se ejecuten en una computadora dentro de cierto sistema operativo.

Este elemento incluye todo lo que esta relacionado a los programas:

- I. Lenguaje de programación.
- II. Codificación
- III. Estructura de datos.
- IV. Interfase con el sistema de archivo.
- V. Documentación.
- VI. Estructura del sistema.

Un buen soporte computacional es aquel que es fácil de manejar, interpretar y de mantenimiento, como sea posible.

☐ INTERFASE CON EL USUARIO:

Esta parte incluye en primer lugar la documentación adecuada para la utilización del sistema y los archivos de interacción con otros programas o sistemas, después manejando el lenguaje de entrada el usuario plantea el problema, obteniendo los reportes de los resultados finales, los cuales se deben buscar sean prácticos, fáciles de comprender y manejar.

CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN

Podemos considerar a la tarea de simulación de procesos, como aquella en la cual proponemos ciertos valores de entrada al simulador o programa de simulación para obtener ciertos resultados o valores de salida, tales que *estiman* el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones.

Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (batch o continuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico –incluye a los equipos batch–), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas, etc.

A continuación se expondrán brevemente las características de los distintos tipos de herramientas de simulación generalmente utilizadas.

✂ *Simulación cualitativa y cuantitativa*

La simulación *cualitativa* tiene por objetivo principal el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, como así también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado.

Llamamos valores cualitativos de una variable, a diferencia del valor numérico (cuantitativo), a su signo; ya sea absoluto, o bien con relación a un valor dado o de referencia. Por lo tanto, en general se trabaja con valores tales como (+, -, 0).

Son varios los campos de aplicación de la simulación cualitativa, como hacer análisis de tendencias, supervisión y diagnósticos de fallas, análisis e interpretación de alarmas, control estadístico de procesos, etc.

La simulación *cuantitativa*, en cambio, es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema.

La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado *estacionario y la simulación en estado dinámico*.

☞ Simulación estacionaria y dinámica.

La simulación en estado estacionario implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal, por lo que el sistema de ecuaciones deseará estudiar o reflejar en el modelo las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales; entonces deberá utilizarse un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales (según el número de coordenadas espaciales consideradas). Un ejemplo puede ser la variación radial de la composición en un plato en una columna de destilación, la variación de las propiedades con la longitud y el radio en un reactor tubular, etc.

Por otra parte, y como su nombre lo indica, la simulación dinámica plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento de equipos batch, o bien para analizar la evolución que se manifiesta en la transición entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo. En caso contrario, se deberá resolver un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, abarcando tanto las coordenadas espaciales como la temporal.

☞ Simulación que maneja variables estocásticas o determinísticas

Como modelo determinístico consideramos aquél en el cual las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza, es decir que no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a las mismas.

En cambio en un modelo estocástico, como su nombre lo indica, ciertas variables estarán sujetas a incertidumbre, que podrá ser expresada por funciones de distribución de probabilidad.

☞ Simulación de eventos discretos

En la simulación de eventos discretos, existen variables de interés que no tienen un comportamiento continuo.

Existen numerosos procesos que sólo pueden simularse desde este punto de vista. Por ejemplo, la simulación o diseño de plantas batch multiproducto o multipropósito, o ambas simultáneamente, poseen características que imponen un modelo discreto para contemplar ciertos eventos de interés. Desde este punto de vista, se deberán utilizar modelos especiales para tratar funciones semicontinuas y en presencia de eventos discretos.

SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular:

Orientación	Enfoque
Modular	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modular secuencial ▪ Modular simultáneo
A las ecuaciones	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Con rompimiento ▪ Con linealización simultánea

✧ ***Simuladores globales u orientados a ecuaciones***

En éstos se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular.

El problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales. Como ejemplo tenemos los problemas típicos de simulación de columnas de destilación por métodos rigurosos, el sistema de ecuaciones puede llegar a contener más de mil variables. De ello se desprende la magnitud del sistema que represente el modelo de una planta completa típica.

En la década de los 70, no existía el hardware apropiado para la resolución numérica de sistemas de ecuaciones de gran dimensión. Es por ello que los primeros simuladores comerciales adoptaron principalmente la arquitectura modular.

El principal problema asociado a la resolución global u orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las soluciones que se encuentran. Los sistemas altamente no lineales pueden, producir múltiples soluciones. Además, la solución numérica para grandes sistemas, exige inicializaciones apropiadas, es decir próximas a un entorno de la solución, de lo contrario pueden presentarse serios inconvenientes, estas dificultades han sido la causa que ha limitado el desarrollo de este tipo de simuladores en forma masiva.

Una de las críticas fundamentales para la operabilidad de los mismos, que se realizaba a menudo por parte de usuarios no entrenados, era la imposibilidad de identificar los sectores de la planta en correspondencia con el sistema de ecuaciones que lo representa, dado que una vez que se hubo armado el sistema total, éste está integrado y se pierde la correspondencia biunívoca entre el equipo y el subsistema de ecuaciones que lo representa. De esta manera, si existieran inconvenientes durante la simulación, resulta difícil asignar el problema a un sector específico de la planta, o bien inicializar convenientemente.

PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS DE LOS SIMULADORES GLOBALES U ORIENTADOS A ECUACIONES	
↪	Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
↪	Desaparece la distinción entre variables de proceso y parámetros operativos, por lo tanto se simplifican los problemas de diseño.
↪	Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineales) resultante.
↪	Mayor velocidad de convergencia.
↪	Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).
↪	A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico).
↪	Más difícil de usar por "no especialistas".

TABLA I.1 Principales características de los simuladores orientados a ecuaciones.

Una ventaja importante es que puede lograrse una velocidad de convergencia mayor que en los simuladores secuenciales. Además, dado que el sistema se plantea orientado a ecuaciones, es posible fácilmente incorporar las expresiones de restricción para definir problemas de optimización en forma directa, ya que solo basta con plantear las restricciones y la función de optimización. Esta flexibilidad es imposible en los simuladores secuenciales modulares, debido a que los módulos están orientados y definidos en forma rígida, esto es, resulta imposible agregar restricciones y/o variables, además de la expresión analítica de la función de optimización.

☞ *Simuladores modulares secuenciales:*

Los simuladores *modulares secuenciales* se basan, en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el “flujo físico” en la planta.

En estos se tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, distintas variantes, etc.

Conceptualmente, para cada módulo de simulación (equipos) deberá plantearse su modelo matemático. Para encarar la solución de cualquier sistema de ecuaciones deben diferenciarse los valores conocidos y los que deben calcularse, todo esto teniendo en cuenta los grados de libertad; a fin de obtener un sistema con solución única.

El enfoque en la teoría secuencial modular, supone que se conocen las variables de las corrientes de entrada, mientras que deben calcularse las corrientes de salida y los correspondientes parámetros de operación. Esto impone cierta rigidez que sacrifica, la posibilidad de encontrar asignaciones que minimicen el tiempo de cómputo. Sin embargo esto resulta conveniente ya que de esta manera se impone una dirección al flujo de información entre módulos.

Por otra parte, las combinaciones posibles de especificación de variables son enormes, incrementándose en forma dramática la cantidad de módulos a disponer si se quisiera cubrir todas las posibilidades.

En un simulador modular se define cada módulo por un sistema de ecuaciones independiente, que se resuelve de manera óptima, subordinado sin embargo a las limitaciones que impone la especificación de las variables seleccionadas. Esto implica una ventaja ya que se podrían utilizar progresivamente distintos niveles de cálculo dependiendo de la etapa del proyecto en la que se realiza la simulación, o bien en función de los datos disponibles hasta el momento. No obstante, uno de los problemas que se origina es la conexión de los módulos según el proceso a simular y la rigidez que ello impone.

La representación del diagrama de flujo (flowsheet) del proceso se traduce a un diagrama similar, llamado diagrama de flujo de información (DFI).

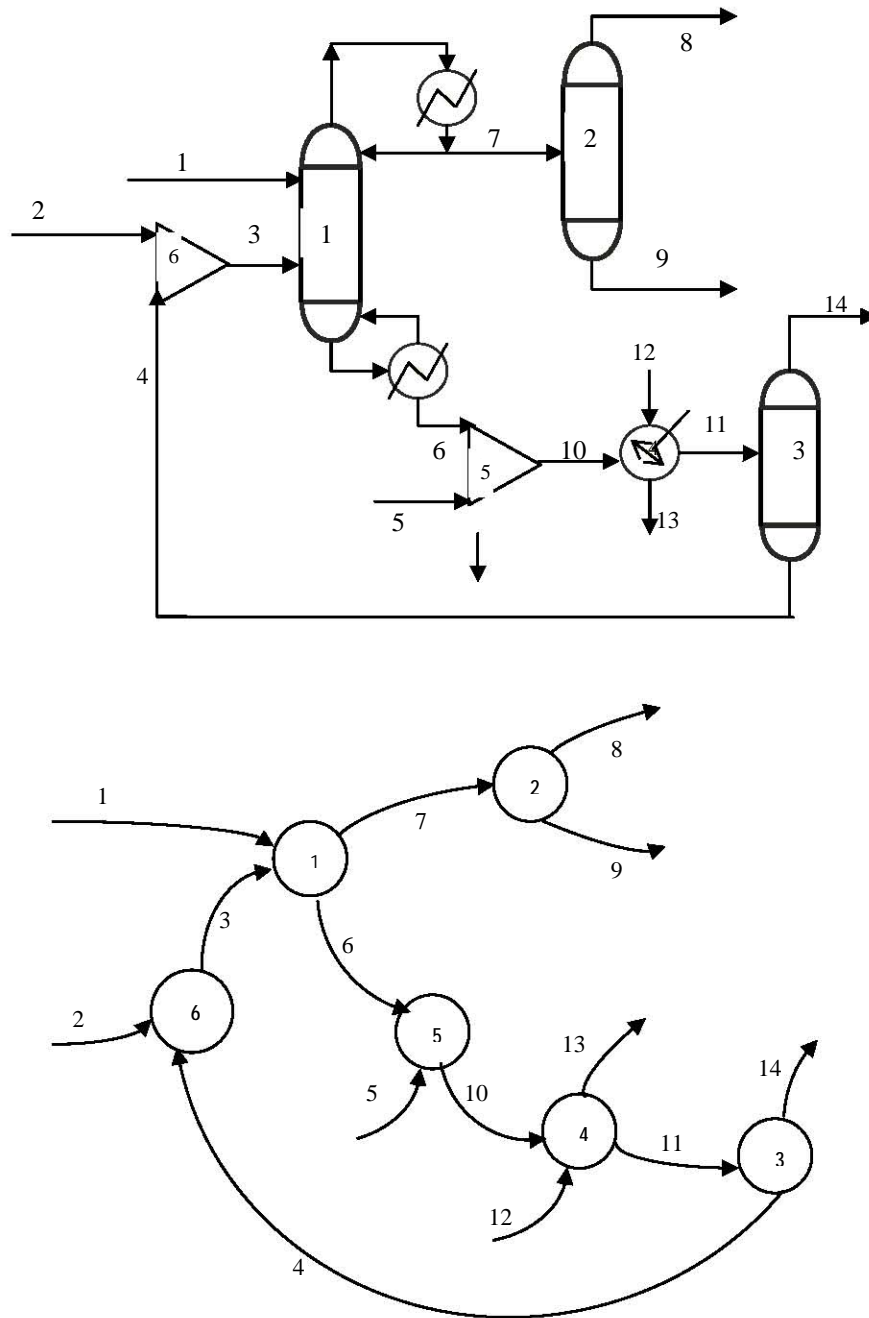


FIG I.4 Esquema de un proceso y su traducción al diagrama de flujo de información, que resulta más útil para el manejo de la información.

En este diagrama:

1. Los nodos son los módulos de equipos conectados uno a uno a través de las corrientes que los vinculan, las cuales se representan como arcos dirigidos. Estas corrientes de información por lo general coinciden con las corrientes físicas de la planta.
2. Los equipos, en algunas oportunidades, serán representados mediante la conexión de varios módulos disponibles en la biblioteca de módulos del simulador.

En general se debe iterar al nivel de cálculos fisicoquímicos, de módulos de equipos, y por último, a nivel del DFI de la planta completa.

PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS DE LOS SIMULADORES MODULARES SECUENCIALES.
- Biblioteca de módulos (equipos)
- Flowsheet: Equivale a un grafo orientado o dígrafo
- Orden de resolución fijo (iteraciones)
- Tres niveles de iteración (se incorpora otro si se desea optimizar) <ul style="list-style-type: none"> • Cálculos fisicoquímicos. • Módulos en sí (ej. flash, columna, etc.). • Variables de iteración (reciclos). • Optimización
Características Relevantes:
- Modelos individuales resueltos eficientemente.
- Fácilmente comprendido por ingenieros "no especialistas en simulación".
- Métodos de convergencia robustos (Sustitución Directa, Wegstein, etc.).
- La información ingresada por el usuario (relacionable con equipos o corrientes) resulta fácil de revisar e interpretable.
- Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más difíciles de resolver.
- Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización (funcionan como cajas negras).
- Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

TABLA. I. 2 Principales Características de los Simuladores Modulares Secuenciales.

La estrategia de contemplar los grados de libertad posibles en la orientación de los módulos para mejorar el desempeño y flexibilidad del simulador modular secuencial es utilizada por algunos simuladores comerciales para disminuir el tiempo de cómputo al reducir el número de corrientes a iterar.

∞ *Simuladores basados en una estrategia híbrida o modular secuencial-simultáneo*

Estos simuladores se desarrollan combinando la estrategia modular y la orientada a ecuaciones de forma tal que se puedan aprovechar los aspectos positivos de ambas metodologías lo máximo posible.

En el desarrollo de estos simuladores:

1. Se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la filosofía global, se les resolverá simultáneamente.
2. Para el resto se mantiene la filosofía modular, se trata de encontrar una secuencia acíclica, que provea por su cálculo, en cada iteración, los valores de las variables a resolverse simultáneamente.

Es por ello que a esta filosofía también se la conoce como two-tear o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente.

A diferencia de los simuladores globales, la filosofía modular ha sido la más desarrollada, y por ello en la actualidad la mayoría de los simuladores comerciales responden a esta metodología de trabajo.

Es importante remarcar que esta situación ha sido una consecuencia de las limitaciones históricas en el desarrollo y potencialidades de software y hardware disponibles para resolver un sistema muy complicado de ecuaciones algebraicas.

En cualquier programa de simulación de procesos se requieren los siguientes datos:

- 1) Topografía del proceso.
- 2) Información sobre las corrientes de alimentación.
- 3) Parámetros de diseño de cada unidad.
- 4) Criterios de convergencia.
- 5) Secuencia de cálculo.
- 6) Parámetros de costo.
- 7) Criterios de optimización.

La simulación en la Ingeniería Química, es una herramienta de desarrollo en la realización de proyectos que sigue un método progresivo integrado por:

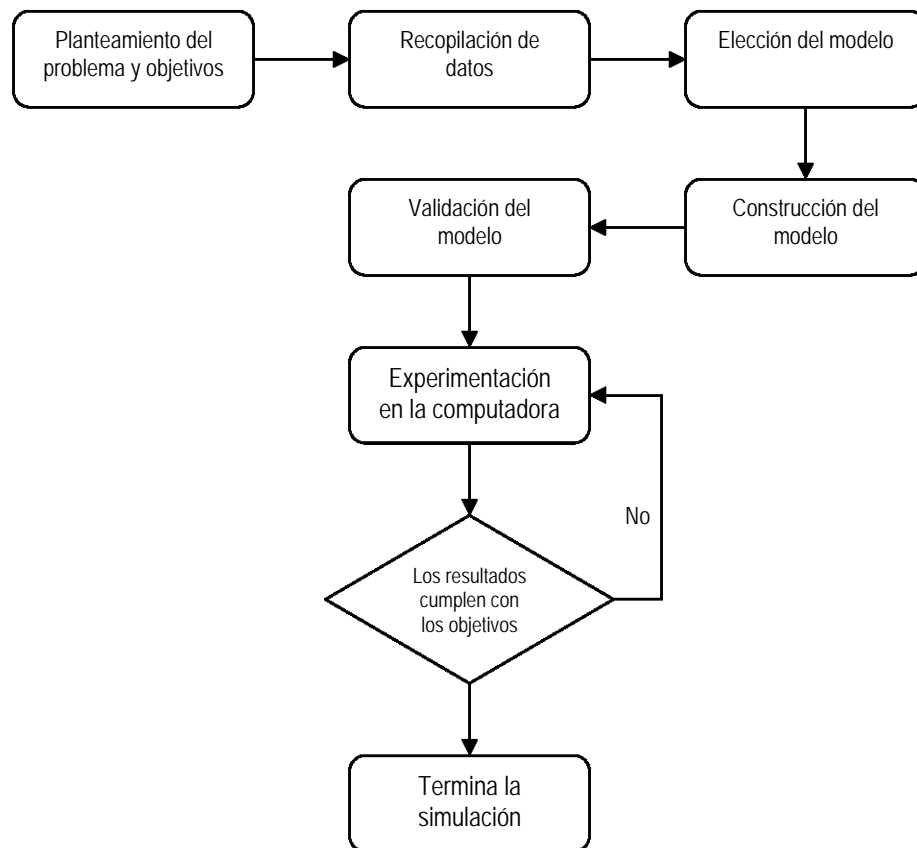


FIG. 1.5 Diagrama de flujo de la simulación de un proceso
A través de un programa de simulación de procesos.

Con la simulación de procesos se puede analizar:

- ☆ Plantas químicas ya en operación.
- ☆ Probar diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación.
- ☆ El diseño del proceso, debido a que se pueden obtener los datos requeridos para el diseño detallado.
- ☆ Detección de cuellos de botella en la producción.
- ☆ Los efectos al variar las condiciones de operación y capacidad de la planta.
- ☆ Optimización de: variables de operación y por tanto del proceso.
- ☆ Modificaciones del proceso para nuevas especificaciones o productos.
- ☆ La reducción del consumo de servicios auxiliares.
- ☆ Operación en condiciones críticas.
- ☆ Minimizar el impacto ambiental, por medio del análisis de la producción de desechos y emisiones contaminantes.

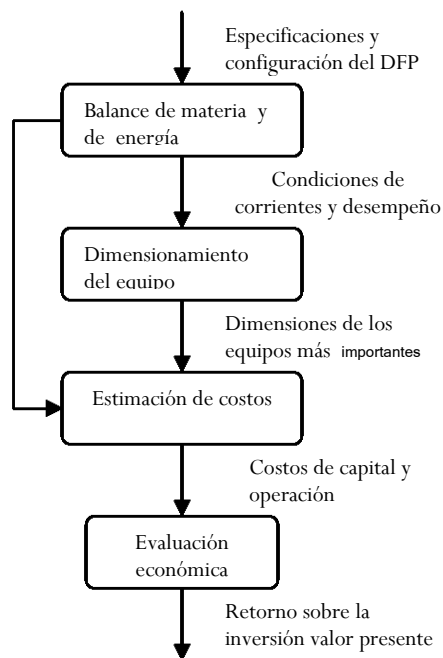


FIG. I.6 Etapas de la simulación de procesos

A medida que evolucionan los algoritmos y el software correspondiente para la solución de grandes sistemas de ecuaciones, mayor es la facilidad con que puede implementarse una nueva filosofía en el diseño de simuladores de uso general, dado que los nuevos simuladores tienden a dotar al usuario de la facilidad de simular la planta *tanto en estado estacionario como dinámico*.

Capítulo 2

Complejo Procesador de Gas Matapionche

PETROLEOS MEXICANOS (PEMEX)

Petróleos Mexicanos se propuso la tarea de apresurar su evolución, para tener un soporte a los crecientes requerimientos del mercado nacional y mayor competitividad con el mercado internacional, por lo cual creó cuatro organismos descentralizados para un mejor funcionamiento:

- | | |
|------------------------------------|-------|
| 1. PEMEX Exploración y producción | PEP. |
| 2. PEMEX Refinación | PR. |
| 3. PEMEX Gas y Petroquímica Básica | PGPB. |
| 4. PEMEX Petroquímica | PPQ. |

PEMEX GAS Y PETROQUÍMICA BÁSICA PGPB:

Dentro de Petróleos Mexicanos, PEMEX Gas y Petroquímica Básica tiene la responsabilidad del procesamiento del gas natural y sus líquidos, así como del transporte, comercialización y almacenamiento de sus productos.



FIG. II.1 PEMEX Gas y Petroquímica Básica.

En La siguiente tabla se muestran los principales productos y productores de los petroquímicos básicos que se procesan en PEMEX.

PETROQUÍMICOS BÁSICOS

Producto	Productor	Usos
Butano	Poza Rica	Síntesis orgánica, combustible doméstico, propulsor para aerosoles, disolvente, refrigerante, enriquecidos de gases.
Etano	Granjera, Pajaritos y Morelos	Obtención de etileno para elaboración de polietileno.
Heptano	Pajaritos	Extractor de aceites vegetales, disolvente, materia prima para síntesis orgánica, determinación y valoración de octanaje de gasolinas, preparación de adhesivos, adelgazadores y reactivos de laboratorio.
Hexano	Pajaritos y Minatitlán	Extractor de aceites vegetales, diluyente de pinturas, solvente, elaboración de thiners, materia prima para síntesis orgánica.
Materia Prima para negro de Humo	Cd. Madero, Tula y Cadereyta.	Industria Hulera.
Mezcla de Pentanos	Pajaritos.	Obtención de Pentano e isopentano, en la industria de expansores.
Nafta	Cangrejera, Morelos, Nuevo PEMEX, Cactus, Reynosa, Matapionche y Poza Rica.	Producción de etileno, propileno y butadieno, reformulado de gasolinas y/o craqueado.
Propano	Poza Rica, Reynosa y Morelos	Refrigerante, combustible doméstico propelente para aerosoles, obtención de hidrógeno.
Solvente de Absorción	Reynosa	Industria de Asfaltos.
Solvente "L"	Matapionche, Reynosa, Poza Rica y Cangrejera.	Industria de solventes.
Solvente incoloro "K"	Reynosa.	Vehículo de insecticidas, desengrasante.

TABLA. II.1 Petroquímicos básicos.

COMPLEJO PROCESADOR DE GAS MATAPIONCHE:**▣ Introducción**

Para cumplir de manera efectiva con el aprovechamiento de los yacimientos descubiertos en los campos de Matapionche, Mecayucan, Miralejo y Cópite, la dirección general de PEMEX Gas y Petroquímica Básica autorizó el proyecto para la construcción del Complejo Procesador de Gas Matapionche, concretándose esto en 1981.



FIG. II.2 Complejo procesador de gas matapionche.

Matapionche es uno de los complejos de procesamiento primario de gas natural + hidrocarburos condensados, en donde se obtienen energéticos y materias primas para la petroquímica, y de esta manera se presta un mayor servicio al sector industrial de la región.

Las actividades principales de este Complejo son las de tratar el gas natural para eliminar los contaminantes y separar sus componentes mediante tres procesos industriales:

- Endulzamiento de Gas Amargo y recuperación de Azufre
- Recuperación de Licuables del Gas Natural
- Fraccionamiento

Además de los servicios auxiliares necesarios para estos procesos, sistemas de seguridad y la infraestructura de apoyo.

Una vez procesados el gas húmedo y los condensados del gas, se entregan en las fronteras establecidas productos tales como el gas LP, gas natural seco, gasolina natural y azufre líquido.

▣ Ubicación del Complejo:

El Complejo Procesador de Gas Matapionche se localiza en el suroeste del estado de Veracruz, en una zona sísmica de bajo riesgo, a una distancia de 62 Km. del puerto de Veracruz, por la carretera No. 150, a 70 Km. de la ciudad de Córdoba y a 50 Km. de la ciudad Tierra Blanca. Anteriormente se llamó Unidad Petroquímica Matapionche, y actualmente Complejo Procesador de Gas Matapionche.



FIG. II.3 Ubicación del complejo PGPB Matapionche.

Ocupa una superficie de 480,000 m². Los poblados más cercanos a las instalaciones son: Cotaxtla y Tinajas a 2 Km. y 14 Km. de distancia respectivamente.

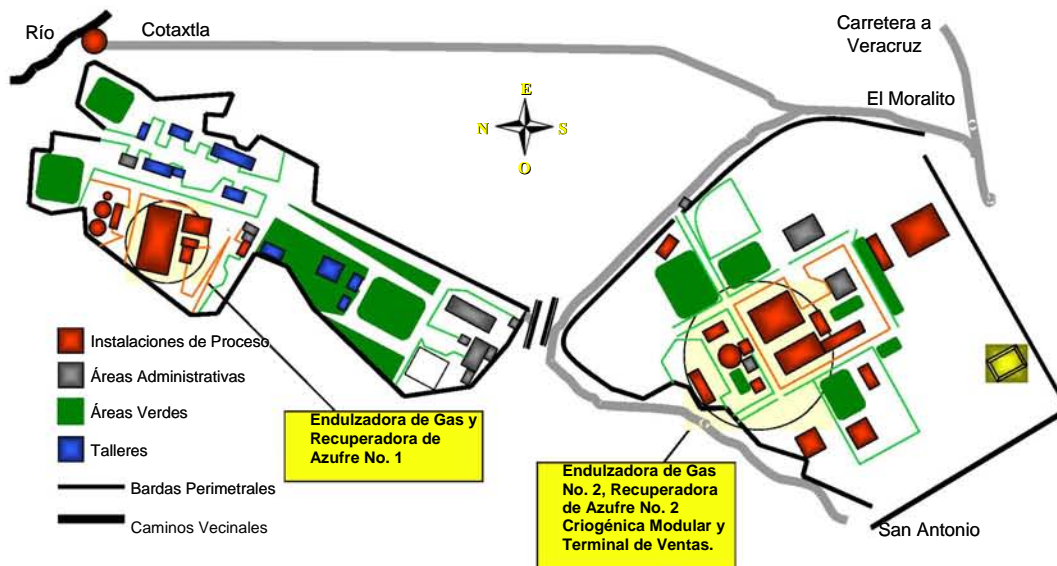


FIG. II.4 Distribución del complejo PGPB Matapionche.

PLANTAS DE PROCESO:

El Complejo Procesador de Gas Matapionche cuenta con:

1. 2 Plantas endulzadoras de gas.
2. 2 Plantas recuperadoras de azufre.
3. 1 Planta criogénica modular.
4. Almacenamiento de LPG y naftas ligeras.
5. 1 Terminal de Distribución de Gas Licuado.

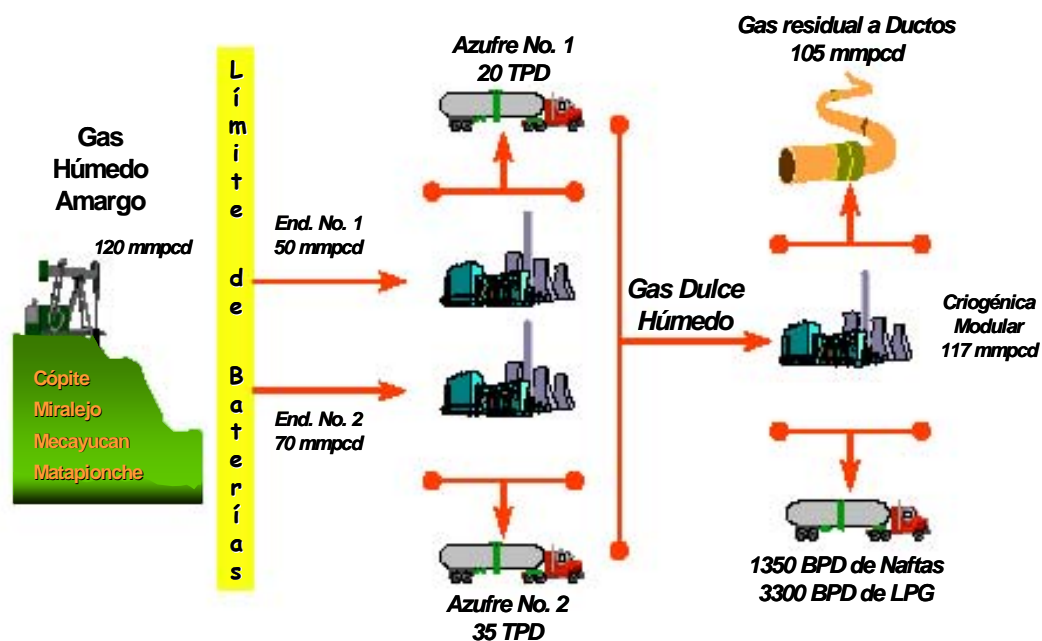


FIG. II.5 Proceso de Producción.

1. Proceso de Endulzamiento de gas:

En el proceso de Endulzamiento de Gas se remueven los contaminantes H_2S (ácido sulfhídrico), diversos compuestos orgánicos de azufre y CO_2 (dióxido de carbono) del Gas Húmedo Amargo recibido de los pozos productores, dados los problemas de corrosión que se producen en los sistemas de transporte y utilización.

Este proceso consiste en la absorción selectiva de los contaminantes mediante una solución acuosa a base de aminas, cuyo componente principal es Mono-, Di etanolamina (MEA, DEA), el cual circula en un circuito cerrado donde es regenerada para su continua utilización.

El gas natural sin contaminantes se denomina Gas Dulce Húmedo y constituye el producto principal de este proceso y es la carga del Proceso Criogénico. Adicionalmente se obtiene una corriente compuesta por el H_2S (ácido sulfhídrico) y CO_2 (dióxido de carbono) la cual se llama Gas Ácido y es la carga del Proceso de Recuperación de Azufre.

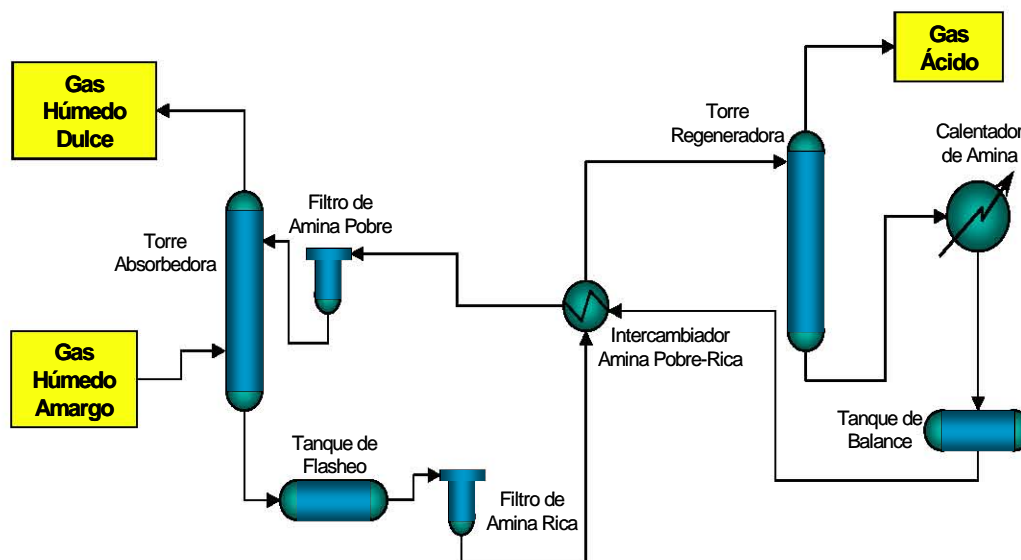
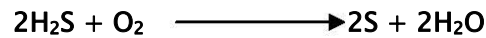


FIG. II.6 Proceso de endulzamiento.

2. Proceso de recuperación de azufre:

Para la recuperación del Azufre tenemos la reacción principal:



Que está dividida en dos pasos:

1. Pasa por un reactor térmico, es oxidado y convertido en SO_2 , (cámara de combustión):



2. Subsecuentemente pasa a dos reactores catalíticos, donde se realiza la conversión del H_2S (ácido sulfhídrico) al Azufre elemental.



El Azufre elemental se almacena, transporta y entrega en estado líquido.

Para remover el dióxido de carbono y así aumentar el valor calorífico del gas, se tiene:

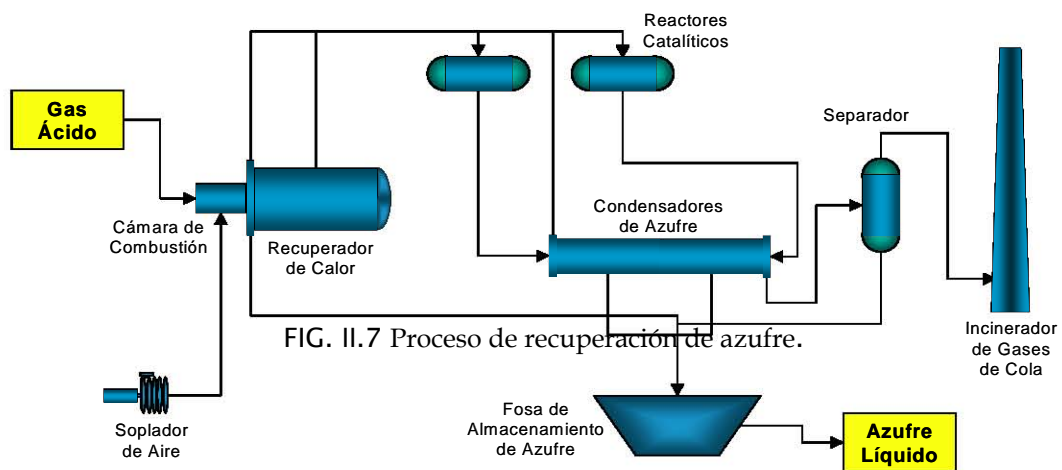
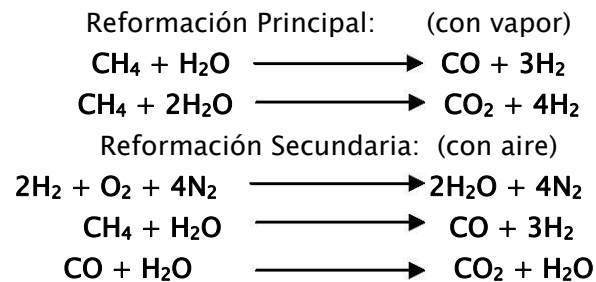


FIG. II.7 Proceso de recuperación de Azufre

3. Proceso Criogénico:

El gas húmedo dulce recibido de la sección de endulzamiento pasa a través de las etapas de deshidratación, enfriamiento, fraccionamiento y compresión obteniéndose como productos: LPG, naftas ligeras y gas residual.

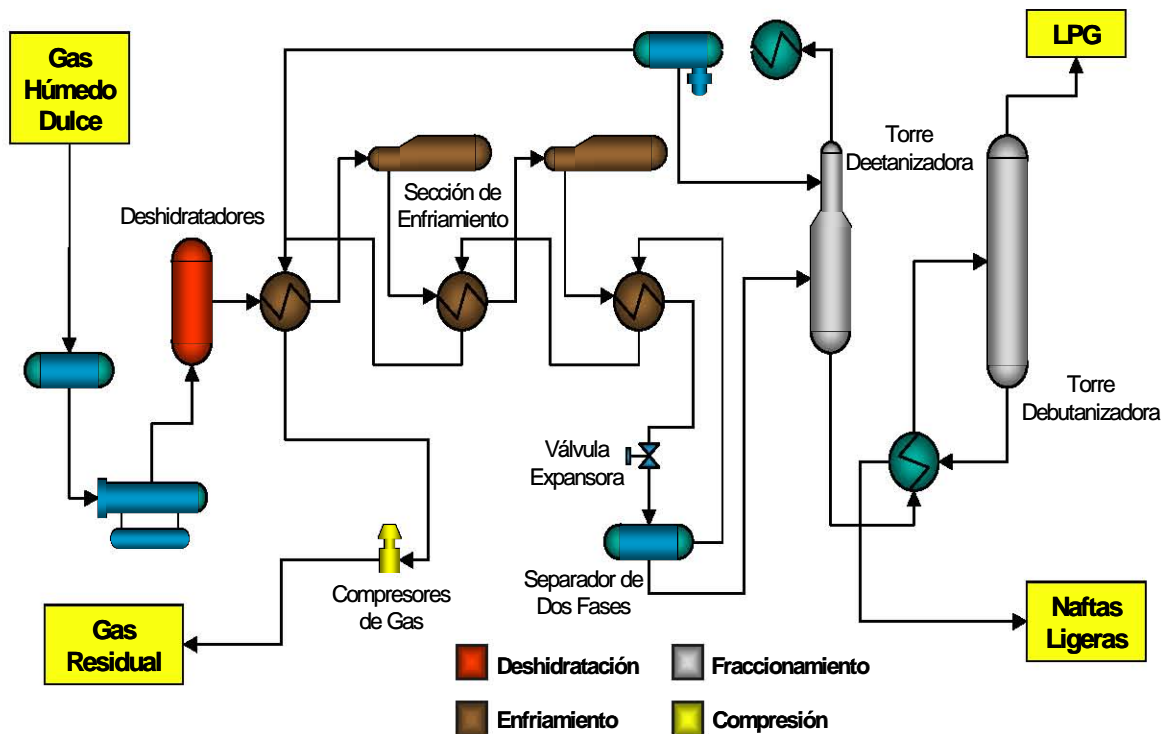


FIG. II.8 Proceso Criogénico.

El producto principal de esta planta es Gas Residual (Gas Natural listo para comercialización) el cual es inyectado al Sistema Nacional de Ductos para su distribución. No menos importante es el producto denominado Líquidos del Gas Natural, el cual es una corriente en estado líquido constituido por hidrocarburos licuables.

El Proceso Consiste en varias etapas de separación, mediante la operación de destilación, en cada una de las cuales se separa un producto diferente. En la primera sección se separa el etano, en la segunda el LPG (propano y butano) y finalmente la nafta (pentanos, hexanos y mas pesados).

El Etano se comercializa con PEMEX Petroquímica como carga de las plantas de etileno, el LPG se almacena y distribuye para su consumo nacional, finalmente la nafta se comercializa con PEMEX Refinación y la mayor parte se exporta.

4. Llenado de Pipas de Naftas y LPG

- Se realiza la comercialización del Gas L.P. y azufre líquido.
- Además se brinda al C.P.G. Matapionche el servicio de llenado, facturación, control por documentación y traspaso de la gasolina natural hacia el complejo cangrejera.
- Estas actividades se realizan por medio del sistema IS-OIL.

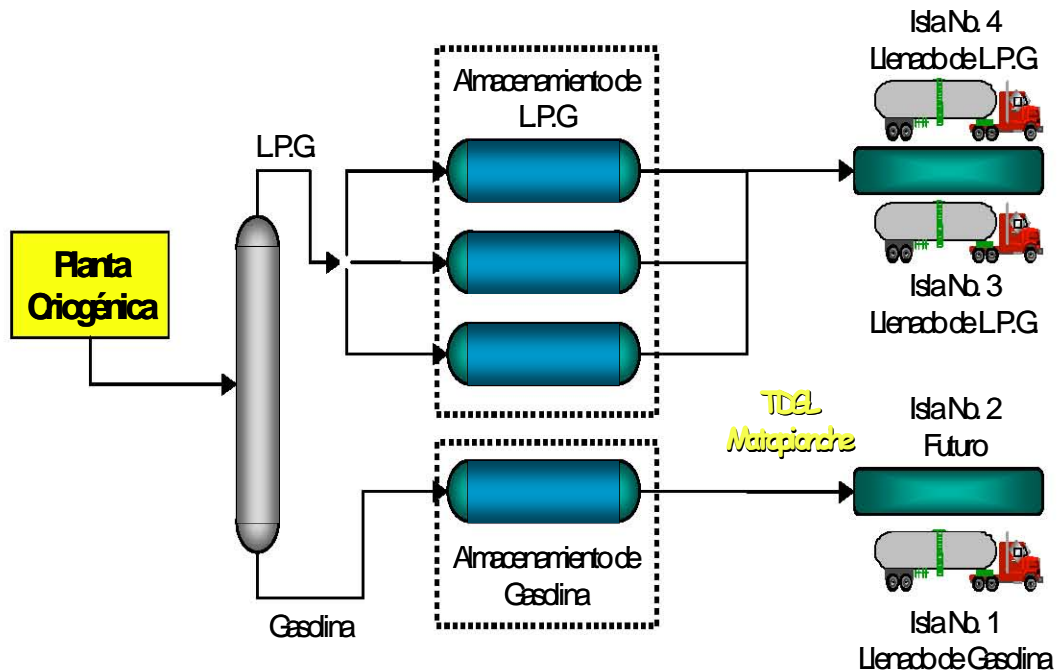


FIG. II.9 Llenado de pipas y LPG.

Capítulo 3

Simulador de Procesos ASPEN PLUS

INTRODUCCIÓN

Desde su introducción en 1981, el simulador ASPEN, “Advanced System for Process Engineering” (Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos) ha sido ampliamente conocido. Aunque se desarrolló para conversión de combustibles fósiles, ha demostrado ser aplicable para diversas industrias de proceso, universidades, firmas de ingeniería, entre otros usuarios.

Un aspecto muy importante en los simuladores de procesos, es la disponibilidad de propiedades termodinámicas y de transporte de las corrientes de proceso, estas propiedades son fundamentales para efectuar los balances de materia y energía al grado de que si tenemos buenos datos entonces los resultados de la simulación serán más confiables.

Los simuladores modernos permiten la selección de los modelos de propiedades termodinámicas adecuados a la naturaleza de los componentes químicos, estado de agregación y condiciones de operación.

La variedad de aplicaciones de los simuladores de procesos es muy grande, ya que anteriormente se utilizaban solo para ingenieros de diseño de procesos, sin embargo ahora lo manejan ingenieros ambientales, de proceso y de planta, o bien ingenieros con poca o ninguna instrucción de programación.

Algunos de los programas computacionales utilizados como herramientas para operaciones y procesos industriales son:

- ☆ Matemáticos: MATLAB, MATHEMATICA, MAPPLE, MATHCAD, etc.
- ☆ Modulares: METISM, ASPEN PLUS, CHEMCAD, SIMULINK, MICROSIM.

SIMULADOR DE PROCESOS ASPEN PLUS

ASPEN PLUS es considerado como un simulador modular secuencial, utilizado para el diseño o modelado de algún proceso de la industria química, refinación del petróleo, petroquímica, proceso de gas, combustibles, aceites, metales, alimentos y farmacéuticos.

Las condiciones de operación son realistas gracias a rigurosos modelos y se puede simular el comportamiento actual de una planta; este simulador ayuda analizar u optimizar plantas ya existentes mediante la corrida de diversos casos modificando de vez en vez los parámetros necesarios.

Para la simulación de una planta ya existente, el trabajar con ASPEN PLUS, puede traer mejoras en las operaciones y rendimiento de la misma, así como reducir el consumo de energía y producción de residuos. También puede determinar cambios útiles en las condiciones de operación; a partir de la simulación se pueden proponer posibles modificaciones en la planta o mejorar por medio de la implementación de nueva tecnología o cambiando una unidad del proceso.

Como ya se vio anteriormente los elementos que deben componer un simulador son:

- ☐ Modelos.
- ☐ Algoritmos.
- ☐ Soporte computacional.
- ☐ Interfase con el usuario.

A continuación se describen cada uno de estos elementos en el simulador ASPEN PLUS.

☐ **Modelos de operaciones unitarias de aspen plus:**

ASPEN PLUS cuenta con una completa biblioteca de modelos para simular cualquier tipo de proceso, incluyendo procesos con sólidos, electrolitos o sustancias complejas, además mediante el implemento de subrutinas, se puede definir modelos de operaciones unitarias propias.

Los modelos de ASPEN PLUS no tienen limitación dimensional ya que pueden manejar cualquier número de componentes, alimentaciones, etapas, reacciones, etc.

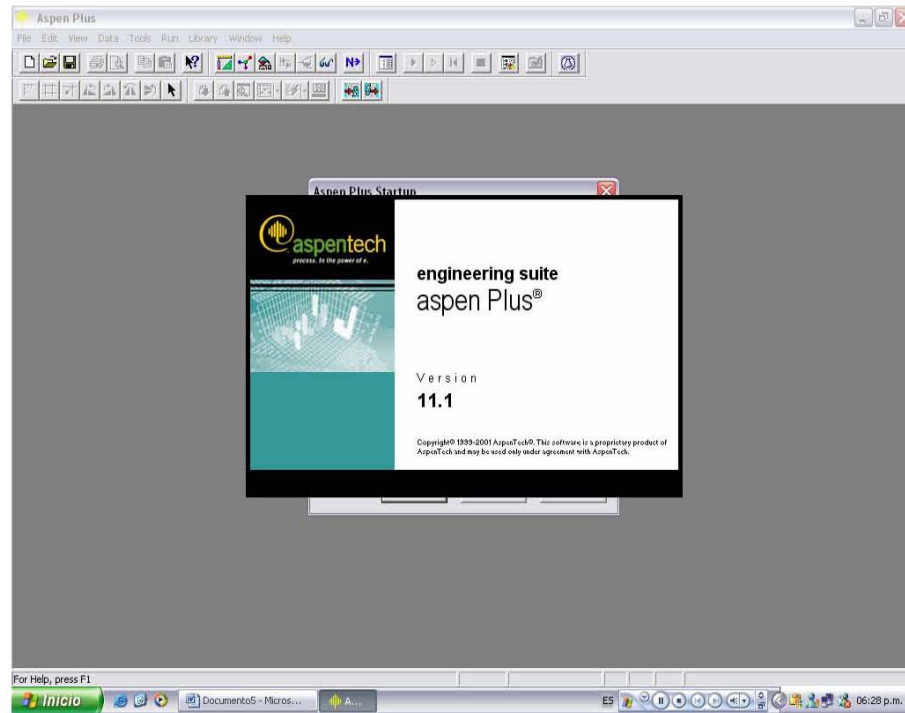


FIG. III.1 Presentación Simulador ASPEN PLUS.

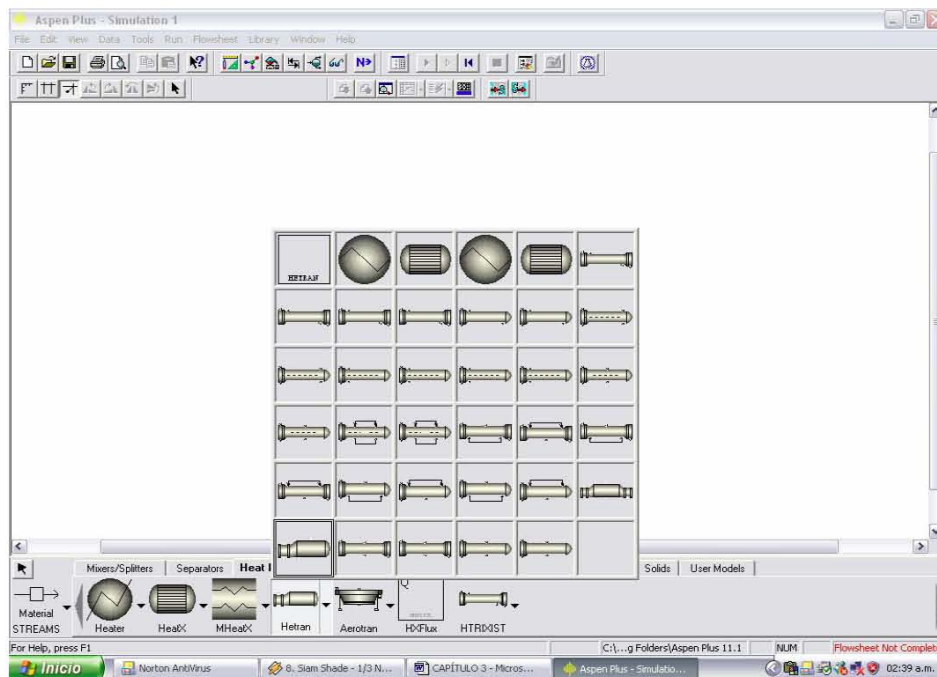


FIG. III.2 Ejemplo modelos operaciones unitarias.

Modelos de operaciones unitarias de ASPEN PLUS	
<p>Bombas y Compresores</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Bomba PUMP. ▪ Compresor de una etapa COMPR. ▪ Compresor de etapas múltiples 	<p>Mezcladores, divisores y separadores.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Mezclador General MIXER ▪ Divisor del flujo FSPLIT ▪ Divisor de componentes SEP. ▪ Separador de dos productos SFP2.
<p>Calentadores y cambiadores de calor</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Calentador general de proceso HFATFR 	<p>Reactores</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 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 RGIBBS.
<p>Manejo de sólidos</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Ciclón CYCLONE. ▪ Precipitador electrostático ESP. ▪ Filtro de tela FABFL. ▪ Limpiador Venturi VSCRUB. ▪ Triturador CRUSH. ▪ Pantalla SCREEN. ▪ Hidrociclón HYCYC. ▪ Filtro de tambor rotatorio FILTER. ▪ Filtro centrífugo CFUGE. ▪ Lavador de sólidos SWASH. 	<p>Separadores Flash</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Flash de dos fases FLASH2. ▪ Flash de tres fases FLASH3.
<p>Manipuladores de corrientes</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Multiplicador MULT. ▪ Duplicador DUPI 	<p>Separación Multietapa</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Fraccionamiento Riguroso RADFRAC. ▪ Col. fracc. riguroso multiple MULTIFRAC. ▪ Absorción rigurosa ABSBR. ▪ Extractor riguroso EXTRC. ▪ Destilación diseño DSTWU. ▪ Destilación simulación DISTL.

TABLA. III.1 Modelos de operaciones unitarias de ASPEN PLUS.

▣ **Modelos de cálculo de propiedades Físicas en Aspen PLUS:**

Los modelos y datos de propiedades físicas que describen a los componentes, son la clave par obtener buenos resultados en la simulación.

El sistema de propiedades del simulador calcula todas las propiedades termodinámicas y de transporte requeridas como:

- I. Coeficiente de fugacidad.
- II. Entalpía.
- III. Entropía.
- IV. Energía libre de Gibbs.
- V. Volumen.
- VI. Viscosidad.
- VII. Conductividad térmica.
- VIII. Coeficiente de Difusión.

Necesarias para simular todos los modelos de operaciones unitarias, para dimensionar los equipos y para producir reportes y tablas.

El sistema de propiedades de ASPEN PLUS para la solución de estos modelos, cuenta con cuatro diferentes bancos de datos que contiene diversos datos físicos para más de 1500 compuestos químicos, si el valor de algún parámetro no se encuentra se puede dar directamente. Los datos de entalpía pueden ser basados en cualquier condición de referencia.

Se pueden seleccionar una o más opciones de propiedades específicas para el Diagrama de Simulación. En la siguiente tabla se muestran las opciones disponibles.

Modelos de cálculo de propiedades Físicas en Aspen Plus

Coefficientes de actividad

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

Coefficientes de Fugacidad

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

Constante de Henry

- Datos de entrada.
- Polinomial modificada.

Coefficiente de Difusión

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

Conductividad Térmica

- Presión de vapor baja WMS
- P_j de vapor alta de Stil-Thodos.
- Líquido de Sato Reidle.
- Sólidos polinomial.

Densidad de sólidos complejos

- Modelo de sólidos secos IGT.
- Modelo de densidad generalizado.

Volumen molar

- Líquido saturado Cavett.
- Líquido saturado Rackett
- Líquido comprimido Chuen-Prausnitz.
- Líquido molar parcial Breval-O'connell.
- Sólido, polinomial.
- Volumen electrolitos Debye-Huckel.
- Polinomial Modificada.

Relación Equilibrio Líquido-vapor

- Datos de entrada.
- Polinomial modificada

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.
- Nothnagel.
- Tablas de vapor.

Entalpía, E. Libre, Entropía.

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

Entalpía de sólidos complejos.

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

Presión de vapor

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

Viscosidad

- Chapman-Enskog-Brokaw.
- Dean-Stiel
- Líquido modificado de Andrade.
- Letsou-Steil (líquido)

TABLA. III.2 Modelos de cálculo de propiedades Físicas en Aspen Plus.

▣ **Algoritmos:**

Los algoritmos son los conjuntos de operaciones que permiten resolver los problemas matemáticos generados por los modelos, ASPEN PLUS, al ser un simulador modular secuencial, a partir de las corrientes de alimentación y condiciones de operación se va calculando de forma secuencial las operaciones unitarias.

ASPEN PLUS cuenta con rutinas para detectar:

1. Los ciclos de recirculación.
2. Seleccionar las corrientes de corte.
3. Generar bloques de convergencia.
4. Definir la secuencia de cálculo.

Sin importar el orden en que se introduzcan las operaciones unitarias.

En cuanto al manejo de los ciclos la simulación modular secuencial existe una jerarquía de manejo, donde:

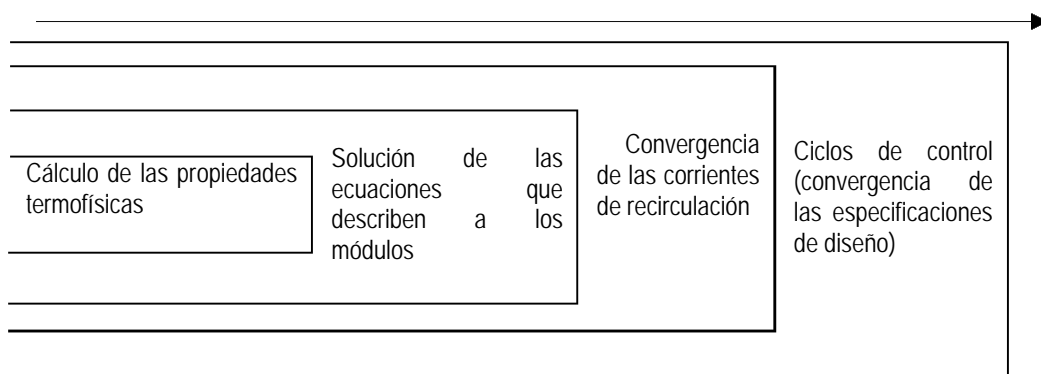


FIG. III.3 Ciclos múltiples de iteración.

El primer ciclo iterativo es la evaluación de las propiedades termofísicas. Los ciclos de control con los que se logra la convergencia de las especificaciones del diseño son los últimos, ASPEN PLUS genera las secuencias de convergencia para las especificaciones de diseño y realiza dicha convergencia mediante los métodos: de la Secante o Broyden para dos o más especificaciones simultáneas.

Para el caso de los ciclos internos existen muchos métodos que se pueden aplicar simultáneamente a cualquier número de corrientes, tal es el caso de la modificación del método quasi-newton de Broyden.

Las opciones que podemos encontrar en el simulador son:

WEGSTEIN	El método de WEGSTEIN este método converge casi siempre rápidamente es recomendado para. Este método se aplica a cualquier número e corrientes simultáneamente. Se pueden controlar sus límites y frecuencia de aceleración.
DIRECT	El método DIRECTO es el método de sustitución simple directo. La convergencia es lenta, pero segura. Es recomendable para casos raros en los cuales otros métodos pueden ser inestables.
SECANT	El método de la SECANTE, es la aproximación lineal, con un orden mayor de incremento, cambia automáticamente a la mitad un intervalo o grupo, si las funciones son discontinuas, Este método se puede utilizar para converger simples especificaciones de diseño.
BROYDEN	El método de BROYDEN, es una modificación del método Broyden quasi-Newton. Se puede utilizar para converger corrientes y variables de corte, dos o más especificaciones de diseño simultáneamente. BROYDEN es útil para el caso de tener múltiples corrientes de corte y/o especificaciones de diseño y cuando las variables son altamente interdependientes, o bien, cuando las recirculaciones y las especificaciones de diseño están fuertemente relacionadas.
NEWTON	El método de NEWTON es una implementación del método modificado de Newton para ecuaciones no-lineares simultáneas, las derivadas son calculadas únicamente cuando el coeficiente de convergencia no es satisfactorio, utilizarlo permite relacionar las variables y mejorar su estabilidad, el método de Newton es útil cuando las recirculaciones y/o especificaciones de diseño están altamente relacionadas y el método de Broyden no puede converger. Debido a que las derivadas son calculadas frecuentemente, se recomienda utilizar el método de Newton para corrientes de corte sólo cuando el número de componentes es muy pequeño o cuando la convergencia no puede darse por otros métodos.
COMPLEX	Es un método de optimización COMPLEJO. Puede ser utilizado para converger problemas de optimización con límites sobre las variables manipuladas y opcionalmente coacciones de desigualdad. El método COMPLEJO es un método directo de búsqueda. Este no requiere derivadas numéricas. Puede ser útil para problemas simples sin recirculaciones o las coacciones de igualdad (especificaciones de diseño).
SQP	El método SQP es el más reciente método de programa secuencial cuadrático para optimización. Se puede usar SQP para la convergencia simultánea de los problemas de optimización con coacciones (igualdad o desigualdad), variables corte y/o corrientes de corte. El algoritmo generalmente sigue un camino factible (las coacciones, corrientes de corte y variables de corte son convergidos simultáneamente con el problema de optimización), pero puede ser ajustado para seguir un camino factible (convergencia de las corrientes de corte y variables de corte en cada iteración de la optimización). Use SQP para bloques de convergencia de optimización generados por sistema. Es recomendable para bloques de convergencia generados por el usuario. Use el párrafo de CONV-ORDER para especificar el orden de cálculo de los bloques de convergencia definidos por el usuario. Se puede definir los bloques de convergencia en el orden en cual prefiera para ser solucionados.

TABLA. III.3 Métodos de convergencia utilizados en ASPEN PLUS.

☐ Soporte computacional:**Hardware**

En esta parte se explicaran los requerimientos de software y hardware que se requieren para el Simulador ASPEN PLUS:

1. PC con un procesador Intel Pentium III 500 MHz (o mas rápido).
2. Monitor con una resolución de 1024 x 768 o mayor.
3. Memoria de 128–256 MB; 512 MB o mayor.
4. Disco duro con espacio de 2.0 GB de espacio libre, dependiendo de lo que se este instalando.
5. Un mouse u otro dispositivo.
6. Dispositivo de CD-ROM.

Software

Para los productos de Aspen. El software necesario par utilizar ASPEN PLUS es:

1. Windows NT® 4.0.
2. Windows NT® server 4.0.
3. Windows® 2000.
4. Windows® 2000 server

Otros elementos necesarios:

1. Adobe Acrobat Reader Version 4.0 o mayor.
2. Internet Explorer Version 5.0 o mayor.

☐ Interfase con el usuario:

1. Documentación:

La documentación adecuada para el uso del sistema ASPEN PLUS se encuentra en los diferentes manuales y guías de usuarios, que van desde niveles básicos hasta los más elevados, algunos son:

1. Aspen Installation Guides.
2. ASPEN PLUS Input lenguaje Guide.
3. ASPEN PLUS Interactive Simulation.
4. ASPEN PLUS Guide to Physical Properties, Methods and Models.
5. Model manager and ASPEN PLUS Installation Reference for the PC.
6. Model Manger Getting Started and Tutorials for the PC.

La Guía para el Usuario de Aspen Plus consta de tres volúmenes que proporcionan paso a paso las instrucciones para el uso adecuado del simulador:

1. Volumen 1 describe la interfase con el usuario del Aspen Plus y explica cómo crear y correr una simulación. Incluyendo:
 - a. Crear un modelo de simulación.
 - b. Definir el diagrama de flujo.
 - c. Introducir la información necesaria, como, componentes, corrientes y propiedades físicas.
 - d. Correr la simulación.
 - e. Examinar resultados.
2. Volume 2 contiene los procedimientos adicionales para utilizar ASPEN PLUS:
 - a. Convergence
 - b. Sensitivity
 - c. Design specifications
 - d. Optimization
 - e. Property analysis
 - f. Data regression
3. Volume 3 contiene información acerca de:
 - a. Cálculo de la presión.
 - b. Librería de las Corrientes.
 - c. Trabajar con otros programas de Windows.
 - d. Interfase automática con el Aspen Plus ActiveX®.

Lenguaje de entrada:

En cuanto al lenguaje de entrada lo constituye la información que se tiene del diagrama de flujo, que incluye, temperatura, presión, flujo y composición de las corrientes de alimentación, condiciones de operación de los equipos de proceso y su interacción en el proceso. Estos datos de entrada se pueden introducir por medio del llenado de formatos que presentan el programa.

Al concluir la simulación del proceso el reporte de resultados incluye la información de cada uno de los equipos involucrados en el proceso, de cada corriente y sus propiedades y de manera opcional los costos y economía del proceso. Todos los reportes y diagramas pueden ser editados e impresos de manera directa desde casi cualquier procesador de palabras (hoja de cálculo, Wordpad)

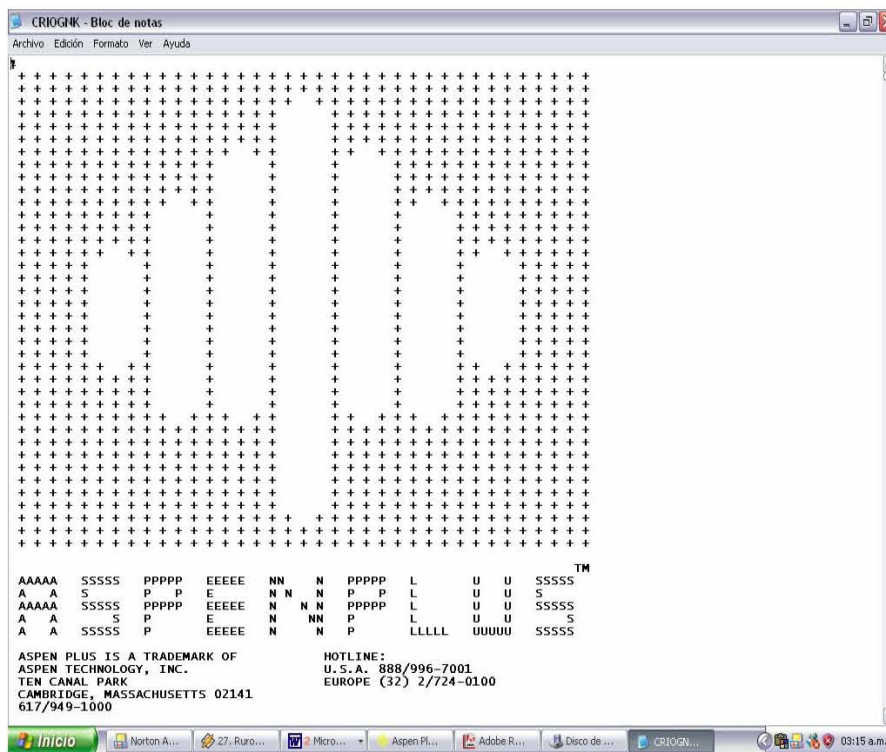


FIG. III.4 Reporte generado por el simulador.

Capítulo 4

Simulación de la Planta Criogénica del CPG Matapionche

SIMULACIÓN DE LA PLANTA CRIOGÉNICA DEL CPG MATAPIONCHE**☐ Pasos a seguir en la simulación:**

Como se vio anteriormente la simulación es una herramienta imprescindible para la solución y mejora de problemas de procesos, permitiendo analizar plantas químicas en operación.

Para realizar cualquier simulación, utilizando el simulador ASPEN PLUS, hay que tener muy bien definido el esquema general de lo que se llevará a cabo, analizando y ordenando la información recopilada para el simulador, además de seguir un procedimiento específico o una serie de pasos que se muestran a continuación.

1. Abrir el programa ASPEN PLUS y seleccionar Abrir una simulación en blanco, esto empezando una nueva simulación, en caso contrario se elige del menú la simulación que estemos realizando:

2. Seleccionar unidades en las que estarán los datos de entrada y salida:

Al abrir la carpeta SETUP se deben especificar:

- | | |
|---------------|---|
| I. El título: | Planta Criogénica de Matapionche |
| II. Unidades: | De los datos de entrada y del reporte de resultados. |
| | 1. Flujo Total: kmol/hr kg/hr |
| | 2. Variables de estado: |
| | T °C |
| | P KG/SQCM |
| | 3. ENTALPÍA: kcal/h |
| | 4. ENTROPIA: cal/mol-k cal/gm-k |
| III. Usuario: | Vanessa Real Berriozábal |

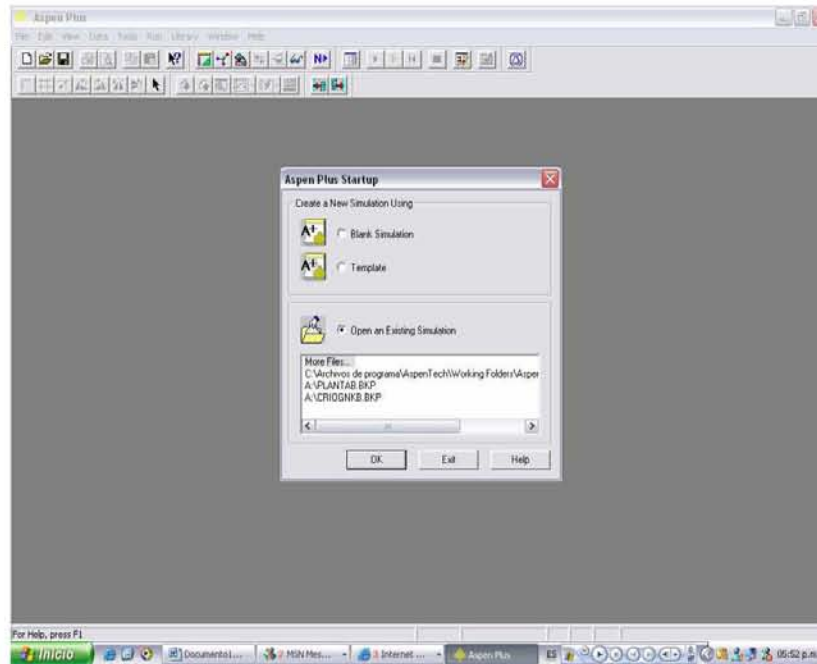


FIG. IV.1 Abrir una simulación en blanco.

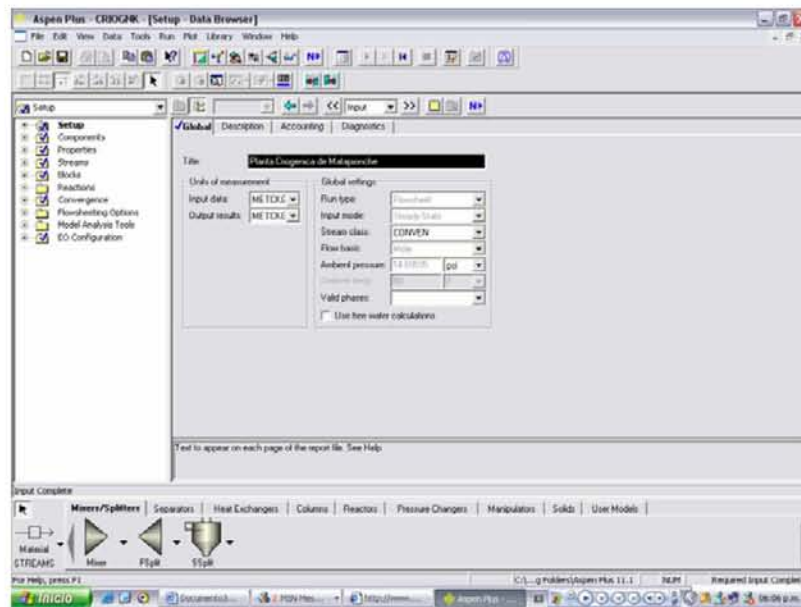


FIG. IV.2 Seleccionar unidades.

3. Seleccionar modelos de cálculo para las propiedades termofísicas:

Se debe elegir el modelo que calcule con mayor precisión las propiedades de los compuestos que maneja el proceso a simular, siendo posible utilizar diferentes ecuaciones de estado o modelos termodinámicos en las diferentes operaciones unitarias, lo que da mayor flexibilidad a la simulación.

Para seleccionarlo se debe abrir la carpeta de Properties y en especificaciones, el modelo se puede elegir en la opción: Método de propiedades.

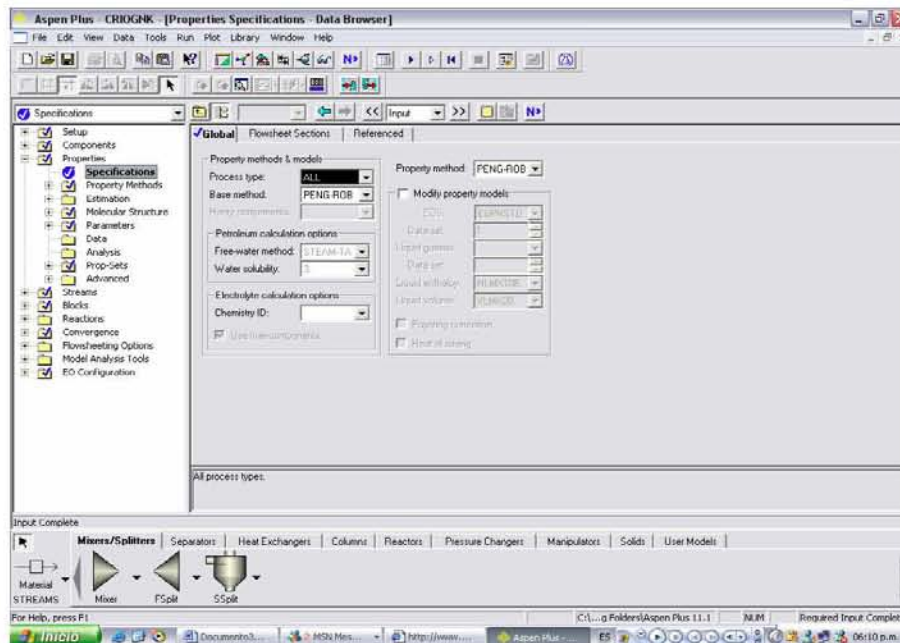


FIG. IV.3 Selección modelos de cálculo.

Hay 52 opciones disponibles, pero entre las más comunes, están:

- K10
- HAO-SEA
- RAYSON
- B
- K-SOAVE
- C
- ENG-ROB
- G
- DEAL

Para este trabajo se eligió la ecuación PENG-ROBINSON (PNG-ROB) para mezclas no polares o medianamente polares, como lo son los hidrocarburos y gases ligeros.

Esta ecuación utiliza:

- I. La ecuación cúbica de estado Peng–Robinson para todas las propiedades termodinámicas, excepto volumen líquido molar.
- II. Modelo API para el volumen molar líquido para pseudocomponentes y el método Rackett para modelar componentes reales.

Este modelo es recomendable para procesos refinería, petroquímica, procesamiento de gas. Un ejemplo donde se puede aplicar incluye plantas de gas, torres de crudo y plantas de etileno. Es recomendado también para procesos de altas temperaturas y presiones, como es el caso de procesos de hidrocarburos o extracciones supercríticas.

4. Diagrama de flujo de proceso:

En este paso se dan a conocer las condiciones de operación del proceso con las que se cuentan y las corrientes que están interconectadas. De manera que se modificaran algunas condiciones del proceso para obtener los resultados deseados.

Debido a que el proceso está compuesto por varios equipos para hacer la simulación completa se va simulando por equipo, esto es, no se recomienda poner todos los equipos de una sola vez y después simularlos ya que se arriesga a que haya más errores, que se pueden ir evitando al ir haciendo la simulación paso a paso.

a) Selección del equipo:

Primero se debe ir a la barra de menú de modelos la cual está constituida por 9 carpetas, explicadas anteriormente, que se encuentra en la parte inferior de la pantalla. De ahí se elige el equipo necesario, cuidando de revisar los datos con los que contamos y las necesidades que necesitamos cubrir ya que hay diferentes modelos pero no todos sirven para el mismo propósito.

b) Se agregan las corrientes de alimentación y salida:

Estas se definen seleccionando en Streams y de acuerdo al tipo de corriente que vamos a definir podemos seleccionar entre tres opciones: Material, Calor o trabajo.

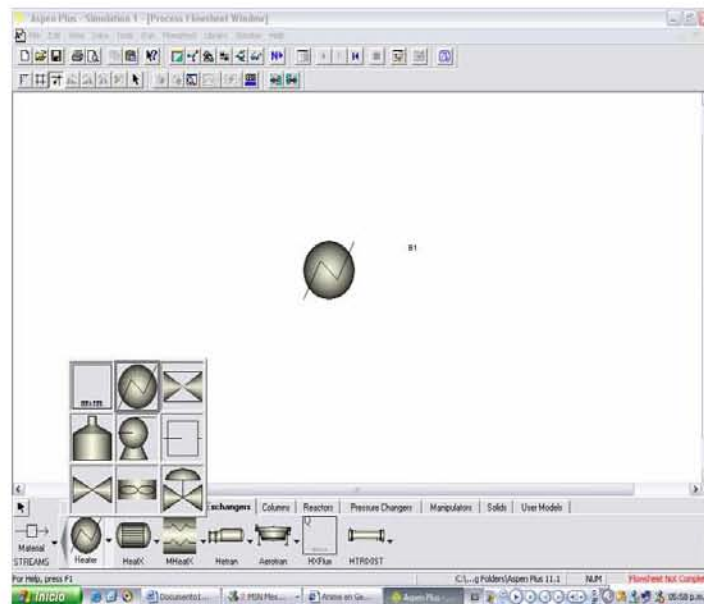


FIG. IV.4 Selección del equipo.

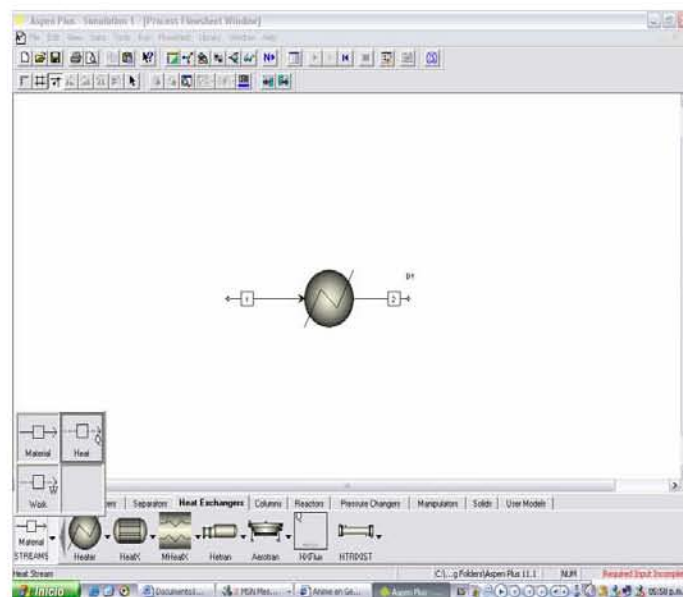


FIG. IV.5 Corrientes de alimentación y salida.

5. Especificación de componentes

El siguiente paso es definir los componentes que intervienen en el proceso. En el simulador ASPEN PLUS se pueden definir diferentes tipos de compuestos como:

- convencional P
- no convencional S
- sólido C
- arreglo P
- mezcla C
- oligómero P
- segmento S
- compuesto puro C
- pseudocomponente P
- componente caracterizado C

En el caso de que se defina el componente puro, el simulador posee todas sus propiedades específicas, las otras dos opciones se utilizan cuando el compuesto deseado no forma parte del banco de datos. El compuesto puede especificarse por medio del menú en base a: su nombre y/o fórmula.

Se abre la carpeta de especificación de componentes y en esta parte se debe definir: La identificación (ID), tipo, nombre y fórmula de cada componente:

- ☐ ID: Se refiere al código que el usuario le da a cada componente para identificarlos.
- ☐ Tipo: De acuerdo al compuesto definido el simulador elige el tipo de compuesto, se puede elegir entre 10 diferentes tipos de componentes, en este caso se eligió el convencional.
- ☐ Nombre del componente: Lo puede dar el simulador de acuerdo a la fórmula que da el usuario.
- ☐ Formula del componente: Se debe especificar la fórmula exacta del componente ya que de lo contrario se puede estar ingresando otro componente, si se tiene alguna duda se puede recurrir al menú del que dispone ASPEN PLUS.

Component ID	Type	Componente name	Formula
CH4	Conventional	METHANE	CH4

FIG. IV.6 Especificación de componentes.

Los compuestos, en este trabajo, fueron definidos como:

ID	Tipo	Componente	Formula
CH ₄	Convencional	Metano	CH ₄
C ₂ H ₆	Convencional	Etano	C ₂ H ₆
C ₃ H ₈	Convencional	Propano	C ₃ H ₈
C ₄ H ₁₀₋₂	Convencional	i-Butano	C ₄ H ₁₀₋₂
C ₄ H ₁₀₋₁	Convencional	n-Butano	C ₄ H ₁₀₋₁
C ₅ H ₁₂₋₂	Convencional	i-Pentano	C ₅ H ₁₂₋₂
C ₅ H ₁₂₋₁	Convencional	n-Pentano	C ₅ H ₁₂₋₁
C ₆ H ₁₄₋₁	Convencional	n-Hexano	C ₆ H ₁₄₋₁
C ₃ H ₆₋₂	Convencional	Propileno	C ₃ H ₆₋₂
H ₂ O	Convencional	Agua	H ₂ O

TABLA. IV.1 Especificación de componentes.

En la siguiente figura se muestran todos los componentes definidos en el simulador:

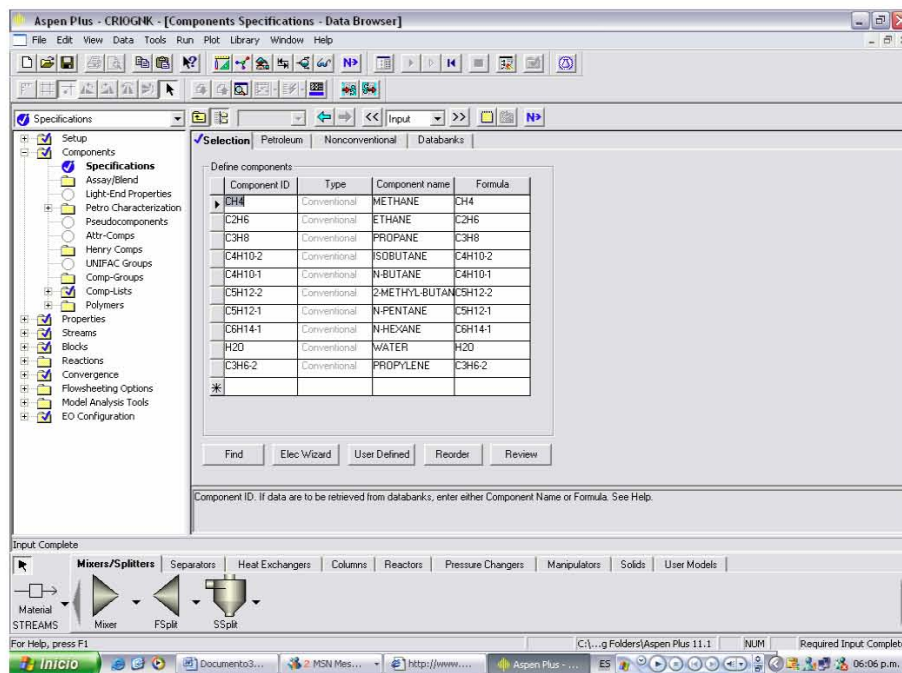


FIG. IV.7 Componentes definidos en el simulador.

6. Partir el proceso en bloques de operaciones unitarias y escoger el modelo para cada bloque.

Primero se realiza una simulación, considerando las torres compuestas por un solo equipo, cerrada con condensador y rehevador incluidos, que servirán como guía ya que después se procede a fragmentar la torre considerando cada operación unitaria por separado.

Los modelos de operaciones unitarias utilizados en la simulación fueron:

- | | |
|-------------|------------|
| 1. RADFRAC. | 2. VALVE. |
| 3. HEATX. | 4. FLASH2. |
| 5. MIXER. | 6. PUMP. |
| 7. FSPLIT. | 8. COMPR. |

En el caso de la simulación abierta se puede estimar las cargas de condensadores y rehevadores, además al agregar la bomba podemos conocer la caída de presión.

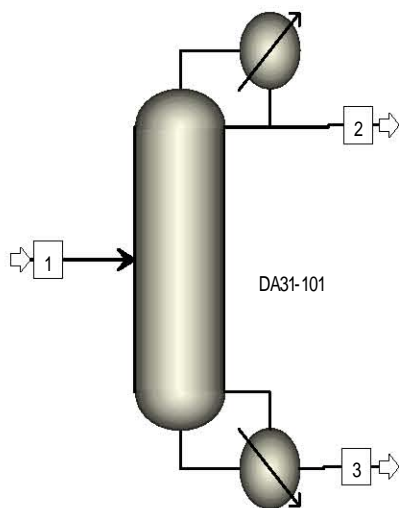


FIG. IV.8 Simulación cerrada del equipo DA31-101.

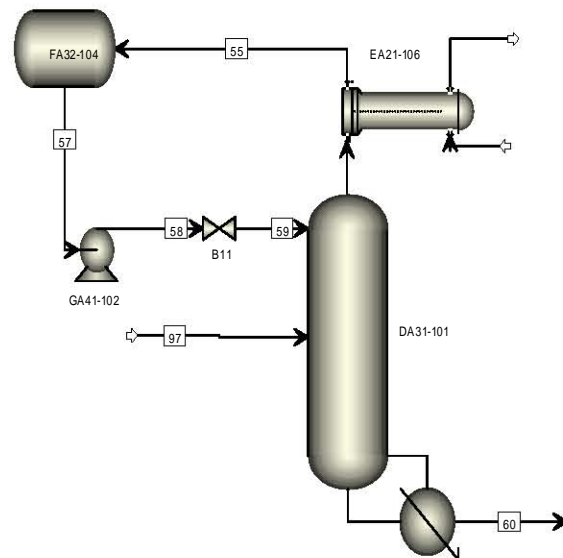


FIG. IV.9 Simulación abierta del equipo DA31-101.

7. Definición de los datos de las corrientes de entrada:

Los datos de cada corriente de entrada, que se deben especificar son:

- I. En la carpeta de Streams se deben dar los siguientes datos de cada corriente:
- II. Nombre de la corriente. 1
- III. Temperatura. 38°C
- IV. Presión. 66.819Kg/sqcm
- V. Composición por componente. Kmol/h
- VI. Flujo Total. 5933.09Kmol/h

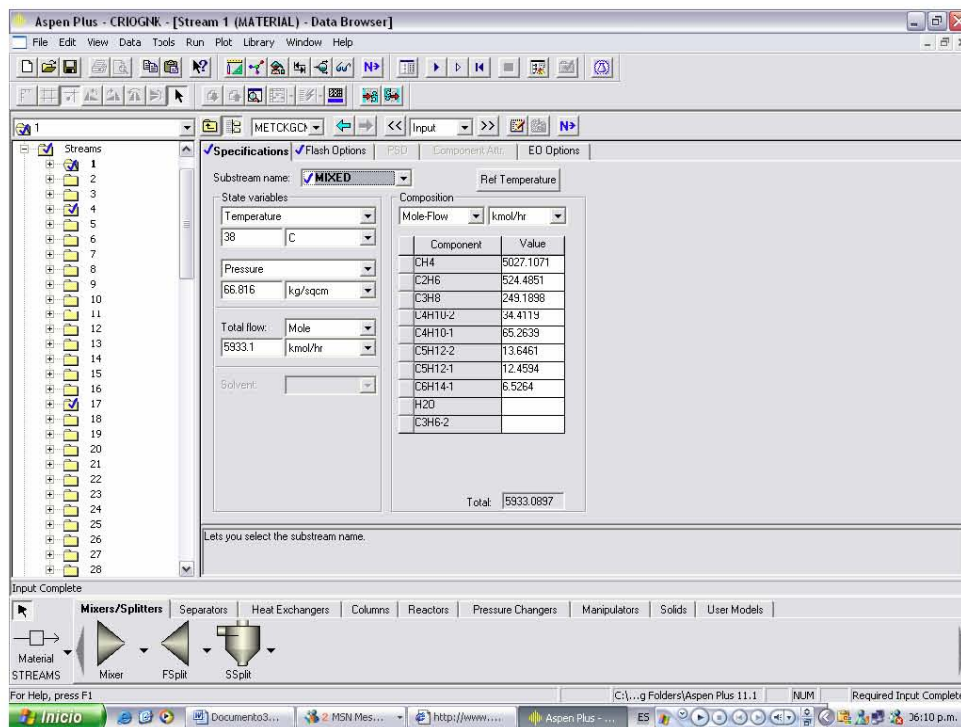


FIG. IV.10 Definición de los datos en el simulador.

A continuación se presenta los datos de la alimentación del proceso:

Los datos de las corrientes se proporciona en base seca, el contenido de agua en la alimentación es de 1.03 kgH₂O/Mm³std de gas, además de H₂S y CO₂ en trazas, el gas efluente de los deshidratadores tiene 1.0 ppm de H₂O máximo.

	1	2	3	5	6	9	10
CH ₄	5027.107	4566.512	460.6194	0	0	643.4735	5027.107
C ₂ H ₆	524.4852	475.5885	47.97213	0	0.940726	67.1345	524.4852
C ₃ H ₈	249.1898	25.70612	2.59295	0	220.8281	31.89648	249.1898
C ₄ H ₁₀₋₂	34.41192	1.06475	0.1074	0.060968	33.1518	4.404752	34.41192
C ₄ H ₁₀₋₁	65.26399	1.26756	0.127858	1.242393	62.60448	8.35384	65.26399
C ₅ H ₁₂₋₂	13.64611	0.050702	0.005114	12.63962	0.931159	1.746712	13.64611
C ₅ H ₁₂₋₁	12.45949	0.050702	0.005114	11.99294	0.414557	1.594824	12.45949
C ₆ H ₁₄₋₁	6.526399	0	0	6.501566	0.019133	0.835384	6.526399
F kmol/h	5933.09	5070.24	511.43	32.43	318.89	759.44	5933.09
T °C	38	35	30	38	22	35	35
P kg/sqcm	66.819	70	25.15	4.001	5.5	65.76	65.761
Descripción	Gas dulce de Entrada	Gas residual A.L.B.	Gas residual A combustible	Gasolina producto a almto.	L.P.G a almto	Gas regeneración Deshidratadores	Gas seco de FD26 101 a EA21 101
	----	B9	B8	GA41-105	B14	B5	B5
	EA21-118	----	---	----	---	B6	EA21-101

	11	12	13	14	15	16	17
CH ₄	5027.107	5027.107	5027.107	5027.107	5027.107	5027.107	472.5175
C ₂ H ₆	524.4852	524.4852	524.4852	524.4852	524.4852	524.4852	299.8606
C ₃ H ₈	249.1898	249.1898	249.1898	249.1898	249.1898	249.1898	221.4578
C ₄ H ₁₀₋₂	34.41192	34.41192	34.41192	34.41192	34.41192	34.41192	33.208
C ₄ H ₁₀₋₁	65.26399	65.26399	65.26399	65.26399	65.26399	65.26399	63.86586
C ₅ H ₁₂₋₂	13.64611	13.64611	13.64611	13.64611	13.64611	13.64611	14.2336
C ₅ H ₁₂₋₁	12.45949	12.45949	12.45949	12.45949	12.45949	12.45949	12.40245
C ₆ H ₁₄₋₁	6.526399	6.526399	6.526399	6.526399	6.526399	6.526399	6.515778
F kmol/h	5933.09	5933.09	5933.09	5933.09	5933.09	5933.09	1124.062
T °C	15	4	-18	-34	-45	-68	-68
P kg/sqcm	65.405	65.058	64.706	64.003	63.652	28.145	28.15
Descripción	Gas EA21 101 a A21 102	Hidrocarburos de EA21 102 a EA21 103	Hidrocarburos de EA21 103 a EA21 104	Hidrocarburos de EA21 104 a EA21 105	H.C. de EA21 105 a válvula de expansión	H.C. de válvula de expansión a FA31 103	H.C líquido de EA21 108 a valv. LC de FA32 103
	EA21-101	EA21-102	EA21-103	EA21-104	EA21-105	B19	FA32-103
	EA21-102	EA21-103	EA21-104	EA21-105	B19	FA32-103	GA41-108

	18	19	20	21	22	23	24
CH ₄	4554.584	4554.584	5027.131	5027.131	5027.131	472.5135	4650.778
C ₂ H ₆	224.6125	224.6125	523.5606	523.5606	523.5606	298.9184	224.6125
C ₃ H ₈	27.75191	27.75191	28.29907	28.29907	28.29907	0.578985	27.75191
C ₄ H ₁₀₋₂	1.202423	1.202423	1.172151	1.172151	1.172151	0	1.202423
C ₄ H ₁₀₋₁	1.39481	1.39481	1.395418	1.395418	1.395418	0	1.39481
C ₅ H ₁₂₋₂	0.096194	0.096194	0.055817	0.055817	0.055817	0	0.096194
C ₅ H ₁₂₋₁	0.048097	0.048097	0.055817	0.055817	0.055817	0	0.048097
C ₆ H ₁₄₋₁	0	0	0	0	0	0	0
F kmol/h	4809.69	4809.69	5581.67	5581.67	5581.67	772.0109	4905.884
T °C	-68	-40	-40	3	30	-33	-68
P kg/sqcm	28.145	27.09	26.387	25.895	25.473	26.739	27.794
Descripción	HC gas de FA32 103 a válvula. LC	Gases de EA21105 a mezcla con vapores de FA32 104	Gas residual EA21 103	Gas residual de EA21 103 a EA21 101	Gas residual de EA21 101 a GB42 101/ gas combustible	Gas residual de FA32 104 a mezcla	Gas residual de válvula. LC de FA32 103 a EA 21 105
	FA32-103	EA21-105	B10	EA21-103	EA21-101	FA32-104	B28
	B28	B10	EA21-103	EA21-101	B8	B10	EA21-105

	25	26	27	28	29	30	31
CH ₄	472.5175	706.2332	706.2332	233.4797	0.105426	0	233.4797
C ₂ H ₆	299.8606	1294.788	1294.788	995.7211	0.938291	0.938291	995.7211
C ₃ H ₈	221.4578	7.129004	7.129004	6.586814	219.0893	220.9026	6.586814
C ₄ H ₁₀₋₂	33.23047	0.020082	0.020082	0.012358	33.22325	33.22325	0.012358
C ₄ H ₁₀₋₁	63.86586	0	0	0.012358	65.76122	63.86356	0.012358
C ₅ H ₁₂₋₂	13.55956	0	0	0	13.54021	13.5613	0
C ₅ H ₁₂₋₁	12.40245	0	0	0	12.40864	12.40864	0
C ₆ H ₁₄₋₁	6.515778	0	0	0	6.522355	6.522355	0
F kmol/h	1123.41	2008.17	2008.17	1235.812	351.5887	351.42	1235.812
T °C	-68	-13	-33	-33	93	64	-33
P kg/sqcm	27.442	27.09	26.739	29.179	27.315	14.153	28.145
Descripción	HC liq. de válvula. LC de FA32 103 a DA31 101	Gases de domo de DA31 101 a EA21 106	HC de EA21 106 a FA32 104	Reflujo de GA41 102 a válvula. FC.	Liq. Fondo de DA31 101 a válvula. FC/LC de torre	Liq. de válvula. FC/LC de torre a DA31 102	Reflujo de válvula. F.C. de Ga41 102 a DA31 101
	GA41-108	DA31-101	EA21-106	GA41-102	DA31-101	EA21-116	B11
	DA31-101	EA21-106	FA32-104	B11	EA21-116	DA31-102	DA31-101

	32	33	34	35	36	37
CH ₄	0	0	0	0	0	0
C ₂ H ₆	0	0	3.48218	3.48218	0.941021	2.540747
C ₃ H ₈	0	0	817.4152	817.4152	220.8974	596.4209
C ₄ H ₁₀₋₂	0.060968	0.060968	122.7144	122.7144	33.1622	89.53763
C ₄ H ₁₀₋₁	1.242393	1.242393	231.7361	231.7361	62.62412	169.0845
C ₅ H ₁₂₋₂	12.63213	12.63213	3.446768	3.446768	0.931451	2.514908
C ₅ H ₁₂₋₁	11.99294	11.99294	1.53452	1.53452	0.414687	1.119651
C ₆ H ₁₄₋₁	6.501566	6.501566	0.070824	0.070824	0.019139	0.051676
F kmol/h	32.43	32.43	1180.4	1180.4	318.99	861.27
T °C	145	38	63	53	53	53
P kg/sqcm	13.942	13.239	13.732	13.38	15.82	14.158
Descripción	Gasolina de fondo de DA31 102 a EA21 111	Gasolina de EA21 111 a válvula. LC de torre	H.C gas domos de DA31 102 a EA21 110/FA32 105	LPG de FA32 105 a GA41 103	LPG de GA41 103 a EA21 102	LPG de GA41 103 a DA31 102
	DA31-102	EA21-111	DA31-102	FA32-105	B13	B13
	B12	B18	EA21-110	GA41-103	EA21-112	DA31-102

	38	39	41	43	45
CH ₄	0	0	0	4566.512	1.331798
C ₂ H ₆	0.941021	0	10.3574	475.5885	517.9401
C ₃ H ₈	220.8974	0.009049	1432.962	25.70612	1127.682
C ₄ H ₁₀₋₂	33.1622	3.293654	150.4938	1.06475	60.20839
C ₄ H ₁₀₋₁	62.62412	59.49389	262.2253	1.26756	102.4375
C ₅ H ₁₂₋₂	0.931451	392.0082	41.31279	0.050702	17.40587
C ₅ H ₁₂₋₁	0.414687	337.1109	35.49162	0.050702	15.42666
C ₆ H ₁₄₋₁	0.019139	113.3053	14.037	0	7.306394
F kmol/h	318.99	905.221	1946.88	5070.24	1849.738
T °C	33	141	86	141	56
P kg/sqcm	15.117	13.995	27.372	78.065	27.231
Descripción	LPG de EA21 112 a válvula. LC de FA32 105	HC de DA31 102 a EA21 107	HC de DA31 101 a EA21 107	Gas residual de GB42 101 a EA21 113	Extracción de HC de DA31 101 a EA21 108
	EA21-112	DA31-102	DA31-101	GB42-101	DA31-101
	B15	EA21-107	EA21-107	EA21-113	EA21-108

8. Definir condiciones de operación de los equipos:

Se deben establecer las variables de operación de cada equipo, dependiendo de la operación a calcular son las variables que se deben especificar, el simulador ofrece opciones de variables a especificar, este paso se facilita a medida de la cantidad de información con la que se cuente, aún así todo dependerá de la decisión que tomemos sobre los valores a definir en cada operación unitaria.

En la carpeta de Blocks se selecciona el equipo y dependiendo de cada uno son los datos que se deben definir:

1. Cargas.
2. Flujo.
3. Temperatura y Presión.
4. Fracción Vapor.
5. No de Etapas.
6. Platos de alimentación.
7. Caída de presión

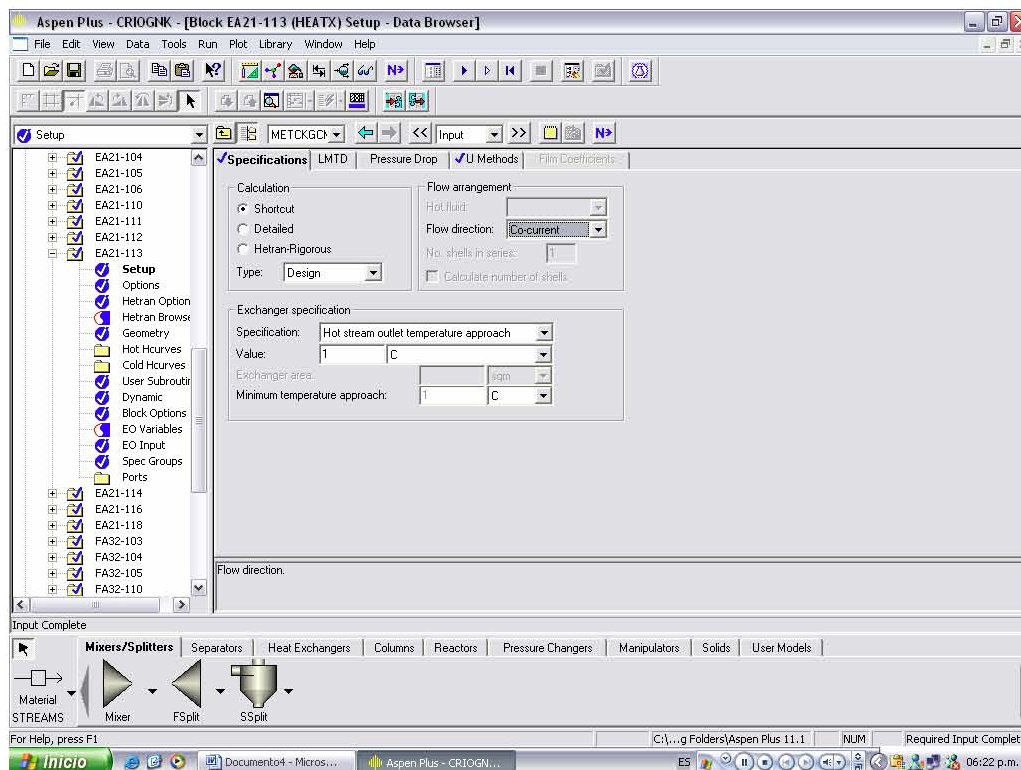


FIG. IV.11 Definición de las condiciones de operación de los equipos.

Especificación de los datos de diseño de los equipos:

☆ Torre Desetanizadora DA31 101:

↪ Número de etapas:	32
↪ Condensador:	3172.604 kcal/h
↪ Rehervidor :	4351.234 kcal/h
↪ Rehervidor lateral :	2343.247 kcal/h
↪ Etapas de alimentación:	1 y 11
↪ Etapas de salida:	1 y 32
↪ Presión por etapa:	
1	27.09 kg/sqcm
26	27.372 kg/sqcm
32	27.315 kg/sqcm
↪ Corrientes de entrada:	53 () y 59 ()
↪ Corrientes de salida:	54 () y 60 ()

☆ Torre Desbutanizadora DA31 102:

↪ Número de etapas:	32
↪ Condensador:	4312.374 kcal/h
↪ Rehervidor :	3740.915 kcal/h
↪ Etapas de alimentación:	1 y 6
↪ Etapas de salida:	1 y 32
↪ Presión por etapa:	
1	13.732 kg/sqcm
32	13.942 kg/sqcm
↪ Corrientes de entrada:	61 () y 66 ()
↪ Corrientes de salida:	62 () y 73 ()

☆ Enfriador de alto nivel EA21 102:

↪ Carga:	861.411 kcal/h
↪ Corriente de entrada:	34 (11)
↪ Corriente de salida:	35 (12)
Refrigerante:	Propano
↪ T _{entrada} :	2° C
↪ Presión:	3.9 kg/sqcm

☆ Enfriador de bajo nivel EA21 104:

↪ Carga:	2079.832 kcal/h
↪ Corriente de entrada:	36 (13)
↪ Corriente de salida:	37 (14)
Refrigerante:	Propano
↪ T _{entrada} :	-37° C
↪ Presión:	0.27 kg/sqcm

En la siguiente tabla se presentan los datos de operación y descripción de los equipos, que operan en la planta criogénica:

Equipos :	Servicio:	Características:
BA 23 101	Calentador gas de regeneración	2477740 kcal/h (x1.25)
EA 21 101	Intercambiador gas de carga/ gas residual	1540.224 kcal/h
EA21 102	Enfriador de alto nivel	861.411 kcal/h
EA21 103	Intercambiador gas frío/ gas residual	2414.462 kcal/h
EA21 104	Enfriador bajo nivel	2079.832 kcal/h
EA21 105	Intercambiador gas enfriado/ gas residual	1485.192 kcal/h
EA21 106	Condensador de la torre desetanizadora	3172.604 kcal/h
EA21 107	Rehervidor de la torre desetanizadora	4351.234 kcal/h
EA21 108	Rehervidor lateral de la torre desetanizadora	2343.247 kcal/h
EA21 109	Rehervidor de la torre desbutanizadora	3740.915 kcal/h
EA21 110	Condensador de la torre desbutanizadora	4312.374 kcal/h
EA21 111 AB	Enfriador de gasolina producto	165.469 kcal/h
EA21 112 AB	Enfriador de LPG producto	145.681 kcal/h
EA21 113 AD	Enfriador de gas residual	5896.120 kcal/h
EA21 114	Enfriador de gas regeneración	2384.775 kcal/h
EA21 116	Pre calentador de la alimentación a la torre DC ₄	

Equipos :	Servicio:	Características:
EA21 118	Enfriador del gas de alimentación	202.331 kcal/h
FA32 101	Filtro separador de gas de alimentación	762 mm x 4267 mm
FA32 103	Tanque separador liq. – vap.	1829 mm ϕ x 7315 mm TT
FA32 104	Acumulador de reflujo de la torre DC ₂	2286 mm ϕ x 9144 mm TT
FA32 105	Acumulador de reflujo de la torre DC ₄	1829 mm ϕ x 7313 mm TT
FA32 106	Tanque lavador de gas de regeneración	914 mm ϕ x 2438 mm TT
FA32 110 AC	Tanques deshidratadores de gas de alimentación	1931 mm ϕ x 7925 mm TT
FA32 114	Tanque lavador del gas de alimentación	2134 mm ϕ x 6096 mm TT
GA41 104 AB	Bomba de LPG producto	$\Delta P=0$ kg/cm ² M 0=LPM
GA41 105 AB	Bomba de gasolina producto	$\Delta P=0$ kg/cm ² M 0=LPM
GA41 108 AB	Bomba de alimentación a DC ₂	$\Delta P=127$ kg/cm ² M1125=LPM
GB42 101 SCD	Compresor del gas residual	BHP = 8353
GB42 105	Compresor de gas de regeneración	BHP = 38

9. Determinar el método de convergencia:

Los resultados de la simulación dependen del método de convergencia que utilizemos, el método que tiene predeterminado el simulador es el Wegstein, pero el que presentó mejores resultados fue el método de Broyden.

El método de Broyden es una modificación del método Broyden Quasi-Newton. Se puede utilizar para converger corrientes de corte o variables, dos o más especificaciones de diseño, o bien, corrientes de corte y especificaciones de diseño simultáneamente. Este método es útil cuando se presentan múltiples corrientes de corte y/o especificaciones de diseño, cuando las variables son altamente interdependientes o cuando las recirculaciones y las especificaciones del proceso están altamente relacionadas.

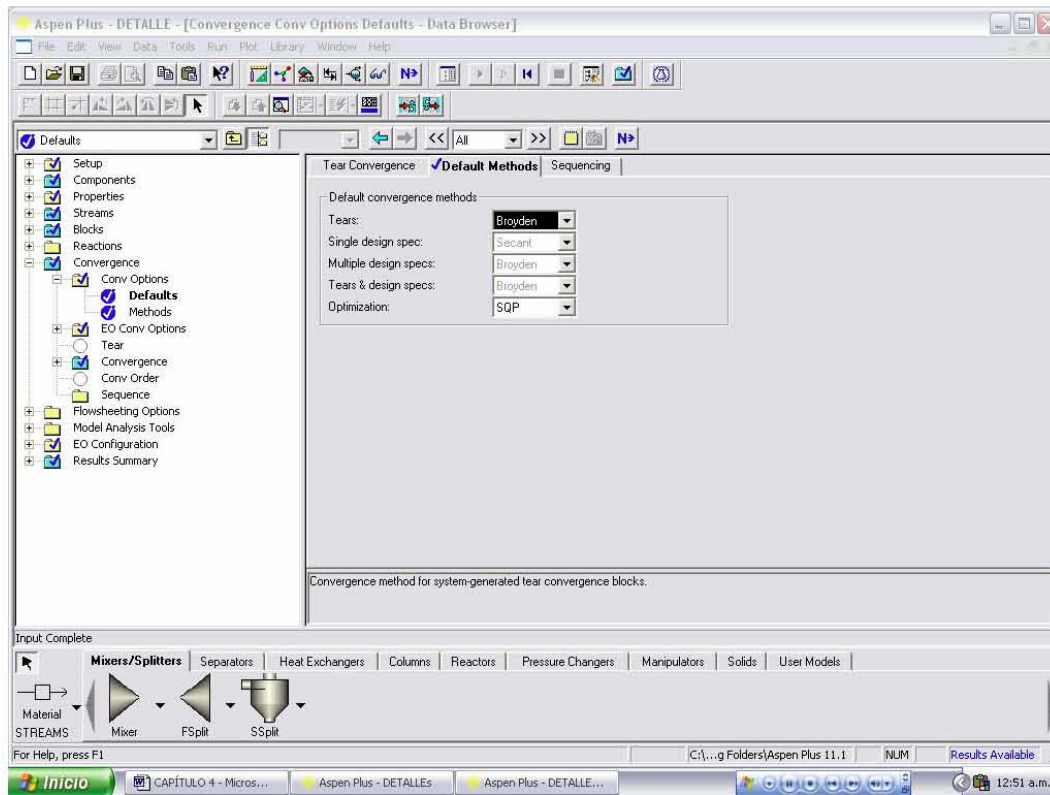


FIG. IV.12 Método de convergencia.

10. Generación del reporte de la simulación:

Una vez que terminamos de introducir los datos de cada equipo, el simulador nos indica que ya podemos correr la simulación, indicado por una paloma azul al lado de cada carpeta, si los resultados son correctos se puede genera un reporte con los resultados y así hacer el análisis del proceso, encontrar los puntos en los que se puede mejorar ya sea haciendo una propuesta de mejora a alguna sección del proceso, revisando equipos que no contribuyen al proceso y que pueden ser eliminados y de ser el caso revisar los resultados de los servicios auxiliares.

Capítulo 5

Análisis de Resultados y Conclusiones

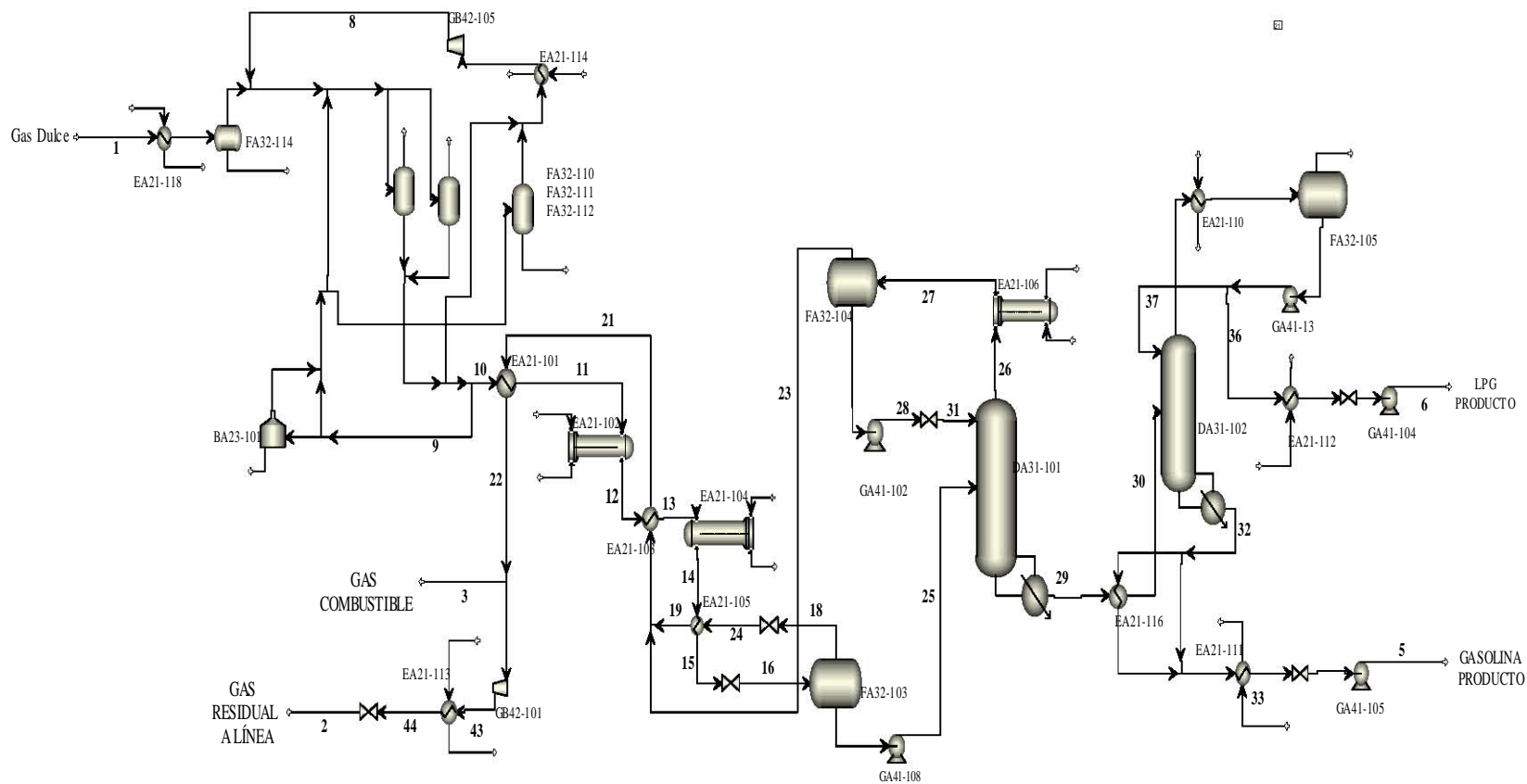


FIG. VI Planta Criogénica Complejo Procesador de Gas Mataponce

ANÁLISIS DE RESULTADOS

El proceso de la planta, como ya se mencionó se puede dividir en diferentes secciones:

Deshidratación. Desetanización.
Enfriamiento. Debutanización.

Por lo tanto, los resultados de las corrientes se presentarán así, para facilitar su análisis:

▪ **Deshidratación:**

	1		9		10	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
T kmol/h	5933.09	5933.1	759.44	759.0076	5933.09	5932.7971
T °C	38	38	35	35.7642	35	35.7642
P kg/cm ²	66.819	66.816	65.76	65.7619	65.761	65.7619
De:	----		B5		B5	
A:	EA21-118		B6		EA21-101	

% Error	1	9	10
T kmol/h	0.000	0.057	0.005
T °C	0.000	2.183	2.183
P kg/cm ²	0.004	0.003	0.001

En esta sección lo importante es que la fracción de agua no rebase el 1.03 kgH₂O/Mm³std gas, para esto se realiza una simulación incluyendo estos datos y el resultado, después de pasar por los deshidratadores, contiene solo 0.0058 kgH₂O/Mm³std gas, pero no se consideran para el resto de la simulación ya que no afectan el resultado del proceso.

▪ **Enfriamiento.**

	22		3		43		2	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
Tkgmol/h	5581.67	5581.3771	511.43	511.2541	5070.24	5070.1229	5070.24	5070.1229
T °C	30	30	30	30	141	146.9701	35	35
P kg/cm ²	25.473	25.9	25.15	25.9	78.065	84.0676	70	70
De:	EA21-101		B8		GB42		B9	
A	B8		---		EA21		----	

% Error	3	22	43	2
T kgmol/h	0.034	0.005	0.002	0.002

T °C	0.000	0.000	4.234	0.000
P kg/cm ²	2.982	1.676	7.689	0.000

	11		12		13		14	
Tkgmol/h	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
	5933.09	5932.7971	5933.09	5932.7971	5933.09	5932.7971	5933.09	5932.7971
T °C	15	16.3917	4	5.1213	-18	-17.1298	-34	-33.3945
P kg/cm ²	65.405	65.761	65.058	65.058	64.706	65.058	64.003	65.058
De:	EA21-102		B9		EA21-103		EA21-104	
A:	EA21-103		----		EA21-104		EA21-105	

% Error	11	12	13	14
T kmol/h	0.005	0.005	0.005	0.005
T °C	9.278	28.033	4.834	1.781
P kg/cm ²	0.544	0.000	0.544	1.648

	15		16		17		18	
Tkgmol/h	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
	5933.09	5932.7971	5933.09	5932.7971	1124.062	1123.0785	4809.69	4809.7186
T °C	-45	-43.9796	-68	-73.4578	-68	-67.5317	-68	-67.5317
P kg/cm ²	63.652	63.652	28.145	22.652	28.15	28.147	28.145	28.147
De:	EA21-105		B19		FA32-103		FA32-103	
A:	B19		FA32-103		GA41-108		B28	

% Error	15	16	17	18
T kmol/h	0.005	0.005	0.087	0.001
T °C	2.268	8.026	0.689	0.689
P kg/cm ²	0.000	19.517	0.011	0.007

	24		19		20		21	
kgmol/h	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
	4905.884	4809.7186	4809.69	4809.7186	5581.67	5581.3771	5581.67	5581.3771
T °C	-68	-67.881	-40	-40	-40	-39.0616	3	3
kg/cm ²	27.794	27.794	27.09	25.15	26.387	26.387	25.895	25.9
De:	B28		EA21-105		B10		EA21-103	
A:	EA21-105		B10		EA21-103		EA21-101	

% Error	24	19	20	21
T kmol/h	1.960	0.001	0.005	0.005
T °C	0.175	0.000	2.346	0.000

P kg/cm ²	0.000	7.161	0.000	0.019
----------------------	-------	-------	-------	-------

▪ **Desetanización:**

	25		26		27		23	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
Tkgmol/h	1123.41	1123.0785	2008.17	2009.5273	2008.17	2009.5273	772.0109	771.6585
T °C	-68	-67.5318	-13	-17.5614	-33	-6.687	-33	-33
P kg/cm ²	27.442	28.147	27.09	27.09	26.739	26.7369	26.739	29.8869
De:	GA41-108		DA31-101		EA21-106		FA32-104	
A:	DA31-101		EA21-106		FA32-104		B10	

% Error	25	26	27	23
T kmol/h		0.030	0.068	0.068
T °C		0.689	35.088	79.736
P kg/cm ²		2.569	0.000	0.008

	28		29		31	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
T kmol/h	1235.812	1237.8688	351.5887	351.42	1235.812	1237.8688
T °C	-33	-33.0547	93	90.7875	-33	-34.5962
P kg/cm ²	29.179	29.179	27.315	27.153	28.145	28.145
De:	GA41-102		DA31-101		B11	
A:	B11		EA21-116		DA31-101	

	28	29	31
T kmol/h	0.166	0.048	0.166
T °C	0.166	2.379	4.837
P kg/cm ²	0.000	0.593	0.000

▪ **Debutanización:**

	30		34		35		36	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
T kgmol/h	351.42	351.42	1180.4	1181.4447	1180.4	1181.4447	318.99	318.9901
T °C	64	60.9122	63	59.4867	53	53	53	51.5308
P kg/cm ²	14.153	14.153	13.732	13.732	13.38	14.6493	15.82	14.158
De:	EA21-116		DA31-102		FA32-105		B13	
A:	DA31-102		EA21-110		GA41-103		EA21-112	

	30	34	35	36
T kgmol/h	0.000	0.089	0.089	0.000
T °C	4.825	5.577	0.000	2.772

P kg/cm ²	0.000	0.000	9.487	10.506
----------------------	-------	-------	-------	--------

	37		38		6	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
T kmol/h	861.27	862.4547	318.99	318.9901	318.89	318.9901
T °C	53	51.5308	33	33	22	14.083
P kg/cm ²	14.158	14.158	15.117	15.117	55	5.5
De:	B13		EA21-112		B14	
A:	DA31-102		B15		---	

	37	38	6
T kmol/h	0.138	0.000	0.138
T °C	2.772	0.000	2.772
P kg/cm ²	0.000	0.000	0.000

	32		33		5	
	Datos	Simulación	Datos	Simulación	Datos	Simulación
T kmol/h	32.43	32.43	32.43	32.43	32.43	32.43
T °C	145	143.4739	38	38	38	38.3192
P kg/cm ²	13.942	13.942	13.239	13.942	4.001	4.001
De:	DA31-102		EA21-111		GA41-105	
A:	B12		B18		----	

	32	33	5
T kmol/h	0.000	0.000	0.000
T °C	1.052	0.000	0.840
P kg/cm ²	0.000	5.310	0.000

En las tablas anteriores se presentan los resultados y porcentajes de error de las corrientes, en cada sección se puede observar que se obtuvieron buenos resultados, resaltando que de las corrientes importantes, como las involucradas en la recuperación de etano y propano se consigue un mayor porcentaje, como se muestra a continuación:

Primero se muestra la corriente de alimentación y de recuperación de ambos compuestos, reportados en los datos del proceso, después los reportados por el simulador:

Diseño	1	2	6
CH ₄	5027.107	4566.512	0
C ₂ H ₆	524.4852	475.5885	0.940726
C ₃ H ₈	249.1898	25.70612	220.8281
C ₄ H ₁₀₋₂	34.41192	1.06475	33.1518
C ₄ H ₁₀₋₁	65.26399	1.26756	62.60448
C ₅ H ₁₂₋₂	13.64611	0.050702	0.931159
C ₅ H ₁₂₋₁	12.45949	0.050702	0.414557
C ₆ H ₁₄₋₁	6.526399	0	0.019133
F kmol/h	5933.09	5070.24	318.89
T °C	38	35	22
P kg/sqcm	66.819	70	5.5
Descripción	Gas dulce de Entrada	Gas residual A.L.B.	L.P.G a almto
	----	B9	B14
	EA21-118	----	---

Simulación	1	2	6
CH ₄	5027.11583	4566.39964	1.6515e-08
C ₂ H ₆	524.486011	476.416646	0.00088096
C ₃ H ₈	249.190233	18.6287089	228.676838
C ₄ H ₁₀₋₂	34.4119597	0.38514755	33.9858172
C ₄ H ₁₀₋₁	65.2640133	0.46166244	64.662961
C ₅ H ₁₂₋₂	13.6461237	0.02377657	0.15921698
C ₅ H ₁₂₋₁	12.4594216	0.01725680	0.08414240
C ₆ H ₁₄₋₁	6.52641133	0.00138374	0.00013662
F kmol/h	5933.1	5062.33422	327.569994
T °C	38	35.4124202	14.599195
P kg/sqcm	66.816	70	5.5

Recuperación %	Diseño	simulación
etano	90.677	90.83
propano	88.618	91.66

En la recuperación del propano del que era más importante mejorar el rendimiento del proceso se consigue mejorarlo, además de una recuperación del 90% de los hidrocarburos pesados.

Las condiciones de operación presión, temperatura o fracción de vapor determinaba que tan exactos serian los resultados o incluso las fracciones de los separadores, fueron decisivos en la recuperación del propano, si se obtiene un mejor resultado a pesar de que en algunos equipos su carga aumento un poco, pero como se vio en los resultados no fue demasiado, por lo que se pueden considerar aceptables.

En la simulación de procesos es muy importante reducir el consumo de energía, a continuación se presentan los porcentajes de error de los equipos:

Equipo	Diseño	Simulación	% ERROR
	Kcal/h	Kcal/h	
EA21-118	202.331	202.331	0.000
EA21-114	2384.775	2384.70	0.0031
BA23-101	24777.4	24777.40	0.000
EA21-101	15402.24	14615.9441	5.105
EA21-113	58961.20	61601.199	4.477
EA21-102	86141.1	86141.1	0.000
EA21-103	24144.62	23241.037	3.742
EA21-104	20798.32	20798.32	0.000
EA21-105	14851.92	14803.28	0.327
EA21-106	31726.04	31726.04	0.000
EA21-107	48512.34	63056.24	29.979
EA21-108	2843.247	2843.747	0.0175
EA21-109	3740.915	38612.6475	3.217
EA21-110	43123.7	43123.74	9.275E-05
EA21-111	16546.9	16463.8872	0.501
EA21-112	1456.81	2112.09	44.980
	Hp	Hp	
GB42-105	38	38.0000012	3.157E-06
GB42-101	8353	8353.00025	2.99E-06

Si bien hay equipos que presenta un porcentaje de error muy pequeño hay algunos que son altos, pero son equipos en los que sólo con esa carga se cumplen verdaderamente las condiciones del proceso.

Las condiciones de operación a la salida del agua de enfriamiento para cada equipo de intercambio son variadas siendo el valor máximo de 46°C.

También hay equipos que no se reportan ya que a pesar de estar en el diagrama y contar con datos ya no operan en la planta actual.

CONCLUSIONES

Este trabajo se empezó a realizar con la versión 9.3 del simulador ASPEN PLUS, después se presentó la oportunidad de terminarlo con la versión 11.1, algunas de las ventajas sobre la versión anterior que se pudieron encontrar fueron: el formato de introducción de datos, resulta más sencillo, es más fácil revisar de un equipo a otro o de una corriente a otra los datos o especificaciones que nos falten o que estén mal, el tiempo de simulación, se reduce considerablemente, realización del diagrama del proceso, y manejo del reporte de resultados y permite trabajar al mismo tiempo con otros programas sin tener la necesidad de salir del simulador.

Para obtener buenos resultados en la simulación de la planta se tuvieron que revisar los balances de materia de las corrientes ya que en algunos casos no coincidían los flujos de los compuestos con el flujo total.

Al comenzar el proyecto se aconseja realizar una simulación considerando los equipos condensador y rehervidor integrados a cada una de las torres desetanizadora y debutanizadora, por que al realizar esto nos podemos establecer un criterio de cómo va orientado el proceso y nos da una idea de si se puede o no mejorar más adelante.

Después de realizar la simulación cerrada se lleva a cabo la simulación abierta, donde los equipos como el condensador, rehervidor, bombas, separadores y tanques se agregan por separado a la torre, gracias a esto se tiene mayor libertad en el manejo de las variables que se necesite cambiar como las cargas de los intercambiadores, las fracciones de recuperación de los compuestos, temperatura y presión y reduce el tiempo que se tarda en llegar el proceso a la convergencia, además de que al manejar equipo por equipo es como se pueden dar las condiciones para aumentar la recuperación de algunos compuestos. El hacer la simulación de este modo se debe hacer un equipo a la vez ya que de lo contrario es probable que no se obtengan buenos resultados.

Se realizan varias corridas a la simulación ya que al obtener los primeros resultados las temperaturas no convergían y la composición de las corrientes principales no se alcanzaba, es por eso que algunos intercambiadores muestran un porcentaje de error más alto que los demás.

Dentro de los aspectos que quedan pendientes a analizar en este trabajo, que se pueden hacer más adelante, están:

- Realizar un estudio a conciencia del impacto de los servicios auxiliares en los costos de operación de la planta.
- Buscar los valores óptimos de las variables de proceso mediante la minimización del consumo de energía de los intercambiadores.
- Hacer un análisis de si hay o no un impacto al medio ambiente por parte de este proceso.

Bibliografía

1. Giral José. Ingeniería de Procesos. México. Alambra. 1979
2. Jiménez Arturo. Diseño de procesos en Ingeniería Química. Reverte. España. 2003
3. Husain Asghar. Chemical Process Simulation. Wiley Eastern Limited. India
4. Scenna José [Nicolás](#). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. Universidad Tecnológica Nacional.1999.Argentina
5. García Sánchez Itze. TESIS. Análisis y simulación de las plantas desisobutanizadoras y despropanizadoras. Facultad de Química. 2003
6. Vega Alcalá Bianca. TESIS. Análisis y simulación de las plantas endulzadoras de gas. Facultad de Química. 2003.
7. López Alonso Antonio & López Giral Francisco. TESIS. Propuesta de mejoramiento del tren de recuperación de vapores de la planta catalítica de tula. Facultad de Química.1992.
8. McKetta, John and William A. Conningham. Encyclopedia of Chemical Processing and Design Marcel Dekker inc 1990
9. ASPEN PLUS 11.1. Getting Started Customizing Unit operation Models. Sept 2001
10. ASPEN PLUS 11.1. Unit operation Models. Sept 2001
11. ASPEN PLUS 11.1. Physical Property Methods and Models. Sept 2001
12. ASPEN PLUS 11.1. Physical Property Data. Sept 2001
13. <http://www.modeladoingenieria.edu.ar/>
14. <http://energia3.mecon.gov.ar/home/>

APÉNDICE

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 quizá 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 unciones termodinámicas a partir de esta información.

En el presente trabajo se explicara brevemente la ecuación que se eligió para calcular todas las propiedades termodinámicas del proceso.

Ecuación de estado PENG-ROBINSON

La ecuación esta enfocada al cálculo del equilibrio líquido-vapor y requiere el uso de tres propiedades por compuesto puro: T_c , P_c y el factor acéntrico w .

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a_{PR}}{v^2 + 2bv - b^2}$$

Parámetros para la Ecuación de Estado:

$$a_{PR} = a'_c * \alpha(T_r, \omega) \quad \text{con} \quad a'_c = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$\alpha(T_r, \omega) = \left(1 + k(1 - \sqrt{T_r})\right)^2 \quad \text{con} \quad k = 0.37464 + 1.5422\omega - 0.26992\omega^2$$

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

Si bien la ecuación Peng-Robinson no es muy exacta en el cálculo de volúmenes molares. Debido a que se utiliza esta ecuación, a continuación se muestran algunas derivadas de ésta predicen propiedades de mezclas:

Para cualquier componente i:

$$a_{PR_i} = a'_{ci} \alpha_i^{1/2} \quad \text{Con} \quad \alpha_i^{1/2} = 1 + m_i(1 - T_{ri}^{1/2})$$

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

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

Si se denomina:

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

Las reglas de mezclado utilizadas por la ecuación PNG-ROBINSON quedan:

$$A = \sum_i y_i A_i \quad A^2 = \left(\sum_i y_i A_i \right)^2 = \sum_i \sum_j y_i y_j A_{ij}$$

$$B = \sum_i y_i B_i$$

Nomenclatura:

P Presión

P_c Presión crítica

R Constante de los gases

T Temperatura

T_c Temperatura crítica

T_r Temperatura reducida

V Volumen molar

ω Factor acéntrico

MÉTODO DE CONVERGENCIA: BROYDEN

El método de Broyden se utiliza, debido a que como la simulación se realiza abierta la convergencia se vuelve más complicada y este método resulta favorable y además presenta dos ventajas fundamentales:

1. No hay necesidad de evaluar las derivadas de las funciones, por lo tanto se puede aplicar a sistemas donde no se cuenta con funciones explícitas.
2. No es necesario calcular la inversa de la matriz.

A continuación se indican los pasos que sigue el método de Broyden, que se eligió para este trabajo:

Se propone una matriz identidad de NxN con sus respectivos valores iniciales:

$$H^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad X^{(0)} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

Se calcula el vector de errores:

$$e^{(0)} = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, x_3) \\ f_2(x_1, x_2, x_3) \\ f_3(x_1, x_2, x_3) \end{bmatrix}$$

Como una función de $X^{(0)}$ es decir x_1, x_2, x_3 son el vector $X^{(0)}$

Estimar $\Delta X^{(1)} = -H^{(1)}e^{(0)}$ entonces se supone que $X^{(1)} = X^{(0)} + \Delta X^{(1)}$ y se valúa:

$$e^{(1)} = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, x_3) \\ f_2(x_1, x_2, x_3) \\ f_3(x_1, x_2, x_3) \end{bmatrix} \text{ con } X^{(1)}$$

Se calcula entonces: $\Delta e^{(k)} = e^{(k)} - e^{(k-1)}$

En el siguiente paso se calcula el valor de:

$$d^{(k)} = (\Delta X^{(k)})^T (H^{(k)} \Delta e^{(k)})$$

Por que aquí se obtiene un número real.

Con este valor se calcula:

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} - \left[\frac{(H^{(k)} \Delta e^{(k)} - \Delta X^{(k)}) ((\Delta X^{(k)})^T H^{(k)})}{d^{(k)}} \right]$$

Y después: $\Delta X^{(k+1)} = -H^{(k+1)} e^{(k)}$

$$X^{(k+1)} = X^k + \Delta X^{(k+1)}$$

Se obtiene $e^{(k+1)}$ con los valores de $X^{(k+1)}$

Si $e^T > 0.0001$ se vuelve a calcular $\Delta e^{(k)} = e^{(k)} - e^{(k-1)}$