



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTILÁN

**SIMULACIÓN DE UNA PLANTA CRIOGÉNICA DE
DESMETANIZACIÓN**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTA
VICTOR BALDERAS JIMENEZ**

**DIRECTOR DE TESIS
DR. ARTURO ORTEGA DÍAZ**

CUAUTILÁN IZCALLI, ESTADO DE MÉXICO, 2021



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
SECRETARÍA GENERAL
DEPARTAMENTO DE TITULACIÓN

ASUNTO: VOTO APROBATORIO

M. en C. JORGE ALFREDO CUÉLLAR ORDAZ
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE

ATN: I.A. LAURA MARGARITA CORTAZAR FIGUEROA
Jefa del Departamento de Titulación
de la FES Cuautitlán.

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **Tesis**

Simulación de una planta criogénica de desmetanización

Que presenta el pasante: **Victor Balderas Jimenez**
Con número de cuenta: **313243284** para obtener el Título de: **Ingeniero Químico.**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO.**

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 25 de Mayo de 2021.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	<u>Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez</u>	<u></u>
VOCAL	<u>I.Q. Carlos Orozco Hernández</u>	<u></u>
SECRETARIO	<u>Dr. Arturo Ortega Díaz</u>	<u></u>
1er. SUPLENTE	<u>M.C. Gilberto Atilano Amaya Ventura</u>	<u></u>
2do. SUPLENTE	<u>I.Q. Ismael Núñez Barrón</u>	<u></u>



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
SECRETARÍA GENERAL
DEPARTAMENTO DE TITULACIÓN

ASUNTO: VOTO APROBATORIO

M. en C. JORGE ALFREDO CUÉLLAR ORDAZ
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE

ATN: I.A. LAURA MARGARITA CORTAZAR FIGUEROA
Jefa del Departamento de Titulación
de la FES Cuautitlán.

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **Tesis**

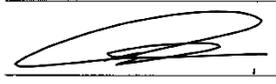
Simulación de una planta criogénica de desmetanización

Que presenta el pasante: **Victor Balderas Jimenez**
Con número de cuenta: **313243284** para obtener el Título de: **Ingeniero Químico.**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO.**

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 25 de Mayo de 2021.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	<u>Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez</u>	
VOCAL	<u>I.Q. Carlos Orozco Hernández</u>	
SECRETARIO	<u>Dr. Arturo Ortega Díaz</u>	
1er. SUPLENTE	<u>M.C. Gilberto Atilano Amaya Ventura</u>	
2do. SUPLENTE	<u>I.Q. Ismael Núñez Barrón</u>	



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
SECRETARÍA GENERAL
DEPARTAMENTO DE TITULACIÓN

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
ASUNTO: VOTO APROBATORIO

M. en C. JORGE ALFREDO CUÉLLAR ORDAZ
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE

ATN: I.A. LAURA MARGARITA CORTAZAR FIGUEROA
Jefa del Departamento de Titulación
de la FES Cuautitlán.

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **Tesis**

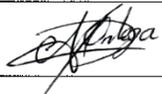
Simulación de una planta criogénica de desmetanización

Que presenta el pasante: **Victor Balderas Jimenez**
Con número de cuenta: **313243284** para obtener el Título de: **Ingeniero Químico.**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO.**

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 25 de Mayo de 2021.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	<u>Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez</u>	_____
VOCAL	<u>I.Q. Carlos Orozco Hernández</u>	_____
SECRETARIO	<u>Dr. Arturo Ortega Díaz</u>	
1er. SUPLENTE	<u>M.C. Gilberto Atilano Amaya Ventura</u>	_____
2do. SUPLENTE	<u>I.Q. Ismael Núñez Barrón</u>	_____



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
SECRETARÍA GENERAL
DEPARTAMENTO DE TITULACIÓN

ASUNTO: VOTO APROBATORIO

M. en C. JORGE ALFREDO CUÉLLAR ORDAZ
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE

ATN: I.A. LAURA MARGARITA CORTAZAR FIGUEROA
Jefa del Departamento de Titulación
de la FES Cuautitlán.

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **Tesis**

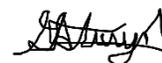
Simulación de una planta criogénica de desmetanización

Que presenta el pasante: **Victor Balderas Jimenez**
Con número de cuenta: **313243284** para obtener el Título de: **Ingeniero Químico.**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO.**

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 25 de Mayo de 2021.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez	_____
VOCAL	I.Q. Carlos Orozco Hernández	_____
SECRETARIO	Dr. Arturo Ortega Díaz	_____
1er. SUPLENTE	M.C. Gilberto Atilano Amaya Ventura	
2do. SUPLENTE	I.Q. Ismael Núñez Barrón	_____



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
SECRETARÍA GENERAL
DEPARTAMENTO DE TITULACIÓN**

ASUNTO: VOTO APROBATORIO

**M. en C. JORGE ALFREDO CUÉLLAR ORDAZ
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE**

**ATN: I.A. LAURA MARGARITA CORTAZAR FIGUEROA
Jefa del Departamento de Titulación
de la FES Cuautitlán.**

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **Tesis**

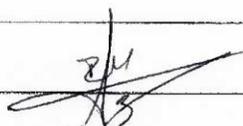
Simulación de una planta criogénica de desmetanización

Que presenta el pasante: **Victor Balderas Jimenez**
Con número de cuenta: **313243284** para obtener el Título de: **Ingeniero Químico.**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO.**

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 25 de Mayo de 2021.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	<u>Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez</u>	_____
VOCAL	<u>I.Q. Carlos Orozco Hernández</u>	_____
SECRETARIO	<u>Dr. Arturo Ortega Díaz</u>	_____
1er. SUPLENTE	<u>M.C. Gilberto Atilano Amaya Ventura</u>	_____
2do. SUPLENTE	<u>I.Q. Ismael Núñez Barrón</u>	

DEDICATORIAS

A mis padres, María Cristina Jimenez Soto y Victor Manuel Balderas González. Por cuidarme y apoyarme a lo largo de mi trayectoria académica, gracias por todo el sacrificio, tiempo y amor invaluable que me han obsequiado.

A mis hermanos Christian Balderas Jimenez y Karina Balderas Jimenez, por siempre mantener mis ánimos, agregando a mis días felicidad y tranquilidad.

A la IQ. Paola Rodríguez Delgado por hacerme una mejor persona con todas las experiencias juntos, e impulsarme a realizar nuevas cosas en mi desarrollo profesional.

AGRADECIMIENTOS

A la UNAM por brindarme la oportunidad de realizar estudios medio superiores y superiores, dando dirección y perspectiva a mis decisiones de vida.

A la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, UNAM, por permitir el desarrollo de mi trabajo de tesis.

Al Dr. Arturo Ortega Díaz, por su tiempo, guía, paciencia, conocimientos compartidos, y acceder a ser mi asesor de tesis, instruyéndome a pesar de las dificultades del año 2020 y 2021.

A todos mis profesores de la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, UNAM, por brindar su conocimiento y despertar entusiasmo e interés en nuestro campo de estudio.

CONTENIDO

NOMENCLATURA	i
RESUMEN	ii
OBJETIVOS	iii
CAPÍTULO 1	
SIMULACIÓN DE PROCESOS Y PLANTA CRIOGÉNICA	1
1.1 INTRODUCCIÓN	1
1.2 Antecedentes	2
1.3 Metodología	2
1.4 Simulación de procesos	3
1.5 Simuladores de procesos y algoritmos de cálculo	3
1.6 Plantas criogénicas.	4
1.7 Producción de gas LP a partir del crudo	5
CAPÍTULO 2	
PRO/II	6
2.1 Introducción a Pro/II	6
2.2 Sistemas de unidades	8
2.3 Selección de las especies químicas	9
2.4 Modelos termodinámicos.	10
2.4.1 Tipos de modelos termodinámicos	12
2.5 Líneas de proceso y especificación de condiciones	16
2.6 Flujo en tuberías	18
2.6.1 Método para la caída de presión en la tubería	20
2.6.2 Datos para el montaje de la línea	22
2.6.3 Parámetros para el dimensionamiento de la tubería	23
2.6.4 Transferencia de calor en la tubería	25
2.6.5 Válvula	26
2.6.6 Expansor	26
2.6.7 Bombeo	29
2.7 Intercambiadores de calor.	31
2.8 Separador flash	33
2.9 Destilación método corto	34

2.9.1	Especificaciones del condensador	35
2.9.2	Reflujo mínimo	36
2.9.3	Especificaciones de los productos	37
2.9.4	Productos	39
2.10	Destilación Método riguroso	40
2.10.1	Perfil de presión en la torre	41
2.10.2	Alimentación y productos	42
2.10.3	Rehervidor	43
2.10.4	Condensador	44
2.10.5	Estimaciones iniciales y reflujo	45
2.10.6	Especificaciones de operación	46
2.11	Optimizador	47
2.12	Puesta en marcha de la simulación y extracción de resultados	48
2.13	Simulación de destilación de una mezcla difícil de fraccionar.	48
CAPÍTULO 3		
SIMULACIÓN DE LA PLANTA DESMETANIZADORA CON PRO/II		51
3.1	Diagrama de flujo de procesos.	51
3.2	Condiciones de entrada y características de algunas líneas en el proceso	53
3.3	Descripción filosófica del diagrama de flujo de procesos.	54
3.4	Simulación de la planta desmetanizadora	55
3.6	Segundo bloque de simulación	56
3.6.1	Primera torre de destilación	58
3.6.2	Segunda torre de destilación	62
3.7	Tercer bloque de simulación	63
3.7.1	Dimensionamiento de tuberías	63
CAPITULO 4		
RESULTADOS Y ANÁLISIS		65
4.2	Diámetros internos para todas las tuberías.	66
4.3	Intercambiadores de calor	67
4.4	Torres de destilación	67
4.5	Bomba	71
CONCLUSIONES GENERALES		72
REFERENCIAS		73

NOMENCLATURA

Abreviaturas

EOS	Ecuaciones de estado
LACM	Modelos de coeficiente de actividad
SRK	Soave-Redlich-Kwong
PR	Peng Robinson

Letras romanas

p	Presión	bar
T	Temperatura	K
M	Flujo molar	kg-mol hr ⁻¹
C	Calor	10 ⁶ kJ hr ⁻¹
C_c	Calor en el condensador	10 ⁶ kJ hr ⁻¹
C_r	Calor en el rehervidor	10 ⁶ kJ hr ⁻¹
R	Reflujo de la torre destilado/reflujo de entrada	L L ⁻¹

RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo principal, la simulación de una planta criogénica de desmetanización para la obtención de gas LP como producto final, realizada fundamentalmente con el simulador de procesos Pro/II.

Dicho proceso criogénico se ha llevado a cabo desde 1930 por lo que se dispone del diagrama de flujo, donde se especifican las operaciones unitarias. La aportación principal de este trabajo es dar un ejemplo de cómo realizar los balances de materia y energía en estado estacionario, utilizando software comercial. Se parte de las condiciones físicas de las corrientes de alimentación en límite de batería y con ello, modificando las condiciones de operación, se calculan los flujos másicos, flujos de calor y composición de las corrientes de proceso, además de realizar el diseño termodinámico de los equipos.

Inicialmente se explica la utilidad de los simuladores de procesos, y metodologías de cálculo, pues, se deben saber las ventajas y desventajas al simular ciertos equipos y su utilización en general.

Se enfatizan y enlistan los modelos termodinámicos más importantes, ya que estos algoritmos y consideraciones componen los cálculos de las propiedades de los componentes presentes en la simulación, en consecuencia, otorgan el comportamiento real del proceso.

Finalmente, sabiendo los principios operacionales de la planta, se simula el proceso con Pro/II y se extraen los resultados de interés que provee el programa.

OBJETIVOS

Objetivo general:

Realizar la simulación de los balances de materia y energía en estado estacionario de una planta desmetanizadora para la obtención de gas LP, mediante el uso del simulador de procesos "Pro/II", con la finalidad de optimizar las condiciones de operación.

Objetivos particulares:

Describir la filosofía de operación de los equipos presentes en la planta criogénica, tomando como punto de partida los módulos del simulador y su correcta aplicación.

Enlistar los modelos termodinámicos más importantes, resaltando los casos para los que su aplicación es recomendable, en función de las especies químicas y las variables del proceso, como la presión y temperatura, para hacer una selección correcta del modelo.

Establecer una metodología para la utilización del simulador "Pro/II", y así tener la capacidad de analizar y simular una gran variedad de procesos químicos y sus operaciones unitarias.

CAPÍTULO 1

SIMULACIÓN DE PROCESOS Y PLANTA CRIOGÉNICA

El primer capítulo provee una visión general de lo que la simulación de procesos implica y la metodología para simular el proceso con Pro/II, así mismo se expone de una forma global el funcionamiento y objetivos de una planta criogénica.

1.1 INTRODUCCIÓN

Los procesos realizados en ingeniería química, en su mayoría conllevan el uso de mezclas; la utilización de sustancias puras tiene poca presencia en las actividades a gran escala, ya que éstas suelen ser el producto final, pero se obtienen a partir de sistemas multicomponentes y en ocasiones multifásicos.

Existiendo una reacción química o una separación, las mezclas son omnipresentes en los procesos. Por ello es importante saber cómo y con qué calcular sus propiedades; estas se ven afectadas según el tipo de mezcla que se tiene. Las variaciones de los valores dependen si se está en presencia de sustancias polares, no polares, polímeros, hidrocarburos, alcoholes, electrolitos, etc.

Actualmente hay un gran número de modelos matemáticos que describen las propiedades de las mezclas, en función de sus componentes químicos y variables como la presión o la temperatura, pero, la desventaja de algunos de éstos modelos, es que los algoritmos de cálculo son muy largos y en ocasiones iterativos, que requieren un largo tiempo para realizarlos.

En la literatura encontramos datos tabulados o diagramas de entalpía para algunas mezclas, sin embargo, estos además de tener un rango de datos bastante estrecho, no son tan variados y en su gran mayoría son para mezclas binarias.

La respuesta del porqué se tiene esta situación es evidente, la realización de estos diagramas es una tarea extensa, ya que se pueden realizar una infinidad de ellos, dependiendo de la concentración, de la temperatura, presión, fases o la variable que nos interese.

Es así que, los simuladores de procesos son una herramienta muy útil; podemos resolver un problema que sin ellos podría necesitar demasiado tiempo, ya que estos programas como "Pro/II", tienen una amplia biblioteca digital que incluye equipos, modelos termodinámicos, especies químicas y propiedades de ellas. Entonces, el correcto uso de estos simuladores puede ayudar enormemente al entendimiento y solución de los procesos que necesitemos trabajar. De forma similar, es posible formular nuestros propios algoritmos de cómputo para los mismos fines.

El uso de estas herramientas genera una percepción diferente, en comparación a realizar los cálculos para algún problema de forma escrita, debido a que el tiempo puede ser grande para resolver incluso una situación relativamente sencilla. Sin embargo, estas herramientas, como ya se dijo, sólo son beneficiosas si existe un conocimiento suficiente para su uso, no refiriéndose al propio simulador, sino al proceso que se quiere simular, las especies químicas, los equipos, los posibles escenarios, etc.

Podría decirse que, el simulador ayuda a resolver un problema rápidamente y con cálculos más precisos, pero si no se saben los principios fundamentales que el problema incluye, podríamos perder de vista el camino a seguir y no llegar a ninguna solución.

1.2 Antecedentes

Desde que se comenzó a estudiar la química como ciencia en el siglo XVII, han existido distintos modelos que describen del comportamiento y las propiedades de las especies químicas. Estos modelos fundamentales, algunos considerados en la actualidad bastante inadecuados para la descripción de los sistemas químicos, fueron evolucionando con el tiempo para una mejor precisión en el cálculo de algunas variables, que hoy en día tienen extrema importancia en el desarrollo de los procesos a gran escala.

Muchos de estos modelos, que describen las propiedades de los sistemas químicos, necesitan de una serie de operaciones tediosas y que requieren a su vez la investigación de algunas propiedades fisicoquímicas específicas. En este escenario es cuando se necesita el uso de un simulador que trae consigo estos métodos de cálculo, optimizando así el tiempo del que disponemos.

Pro/II con el paso del tiempo, ha evolucionado, permitiendo generar una experiencia intuitiva en su uso, creando una potente herramienta para la simulación, diseño y análisis operativo de los procesos.

1.3 Metodología

De acuerdo con los objetivos planteados, es necesario analizar los fundamentos de los equipos, acorde a las condiciones que implica el proceso de desmetanización criogénica, esto con el fin de familiarizarse con los aspectos intrínsecos del proceso, resaltando su lado operacional y así poder incluir todo de manera correcta en Pro/II.

En cuanto al simulador, posterior a la explicación básica de su uso, se explicará un ejemplo aislado de operaciones unitarias, para que con ello se puedan unir de manera correcta todas aquellas del proceso principal. En esta parte también se incluirá un análisis de los diferentes modelos termodinámicos utilizados en una misma operación unitaria y se compararan las propiedades del sistema con cada modelo.

Finalmente, con la explicación detallada del proceso de desmetanización, se realizará la simulación con el modelo termodinámico seleccionado y se analizarán los resultados obtenidos.

1.4 Simulación de procesos

La simulación de procesos es la técnica que permite evaluar un proceso, mediante la resolución de los modelos matemáticos de los elementos que lo conforman. Las ecuaciones presentes en un proceso completo pueden ser centenas o millares. Por ello, el uso de una computadora o un programa dedicado a la simulación es muy útil.

La ingeniería de procesos, como lo detalla el libro “Simulación de procesos en Ingeniería química” de Víctor Hugo Martínez Sifuentes [1], se puede considerar constituida por tres etapas:

1. Síntesis de proceso: Etapa en la cual se crea la estructura básica del diagrama de flujo, se seleccionan los equipos a ser utilizados, con sus correspondientes interconexiones, y se establecen los valores iniciales de las condiciones de operación,
2. Simulación de procesos: Es la etapa en la cual se requiere solucionar los balances de materia y energía para un proceso en estado estacionario, calcular las dimensiones y costos de los equipos y efectuar una evaluación económica preliminar del proceso.
3. La optimización: Puede ser paramétrica, modificando parámetros tales como presión o temperatura, o estructural cuando se hacen modificaciones al diagrama de flujo involucrando a los equipos y/o sus interconexiones.

Las tres etapas están relacionadas entre sí. El principal objetivo de este trabajo es analizar la primera parte del segundo paso de la ingeniería de procesos, para el diseño de una planta criogénica de desmetanización, dando detalles de cómo se realiza una simulación y los aspectos que deben tomarse en cuenta para su éxito, específicamente usando el programa Pro/II.

1.5 Simuladores de procesos y algoritmos de cálculo

Existen distintos simuladores de comerciales, cada uno de ellos con aplicaciones específicas, unos dedicados a la simulación del estado estacionario, y otros útiles tanto en estado estable como transitorio.

Algunos simuladores de procesos son Aspen Plus y Speedup (de Aspen Technology, USA), Pro/II (de Simulations Science, USA), Hysys (de Hypotech, Canada), Chemcad (de Chemstations, USA) y muchos más.

Los algoritmos de cálculo se pueden clasificar elementalmente en tres:

- Método modular secuencial: Interpretación del diagrama de flujo del proceso como un grupo de unidades de proceso (equipos), para cada una de las cuales existen subrutinas de cálculo o módulos. El simulador cuenta con una biblioteca de módulos que se pueden usar para simular numerosos diagramas de flujo de procesos.
- Método orientado a ecuaciones: Soluciona simultáneamente las ecuaciones que describen el diagrama de flujo de procesos, resuelve el sistema de ecuaciones no lineales que abarcan todo el diagrama (el modelo matemático del proceso completo), mediante un procedimiento de solución de ecuaciones.
- Método modular simultáneo: Aprovecha las ventajas de los métodos anteriores. Usa la estructura modular tradicional, pero a la vez resuelve un sistema de ecuaciones simultáneas incluyendo todas las variables de las corrientes. La diferencia principal es que el sistema de ecuaciones a resolver, es uno más sencillo y simplificado que el que se tendría en el método orientado a ecuaciones.

1.6 Plantas criogénicas.

Aquellas plantas industriales en las que se realizan procesos a temperaturas muy bajas, generalmente por debajo de los -50°F (-45.5°C) [2], las cuales varían en función de los objetivos y productos buscados, se denominan plantas criogénicas. Designadas así, al provenir del congelamiento ultra frío; la criogenia es una técnica utilizada para diversos fines como la conservación de alimentos, de medicamentos, procesamiento de metales e hidrocarburos, etcétera.

Existen distintas aplicaciones para la operación criogénica en los procesos, algunas de ellas son las siguientes:

- Separación de los gases del aire (nitrógeno, oxígeno, argón, neón, etc).
- Separación del gas natural de los líquidos.
- Producción de gas licuado de petróleo a partir de una mezcla de hidrocarburos presentes en el crudo.
- Licuefacción de gas natural para una mayor viabilidad en su transporte.
- Recuperación de etileno y propileno.

1.7 Producción de gas LP a partir del crudo

El procesamiento del gas LP consta de la obtención de los hidrocarburos líquidos del gas extraído del crudo, como una mezcla conocida como GLP (gas licuado del petróleo), y su posterior fraccionamiento en los componentes individuales presentes, como metano y etano. El fraccionamiento depende mucho del país, la región o alguna necesidad en particular, además de la carga que se debe procesar.

El gas LP está constituido en su mayoría de propano y butano. El proceso analizado en este trabajo, tiene varias décadas desde su creación y funcionamiento, por lo cual, una de las características actuales del GLP no fue tomada en cuenta, la cual es que el producto debe tener menos del dos por ciento en volumen de hidrocarburos con más de 4 átomos de carbono [3].

El procesamiento criogénico del GLP consta de cinco secciones fundamentales, las cuales son:

1. Acondicionamiento: Remueve impurezas sólidas o líquidas. Mediante filtros separadores se remueve cualquier impureza sólida. De ser necesario se tienen secciones de endulzamiento para remoción de H_2S y CO_2 .
2. Deshidratación: Elimina la humedad del gas, esta puede realizarse en dos fases; la deshidratación primaria mediante absorción con etilenglicol y deshidratación secundaria con tamices moleculares.
3. Enfriamiento y expansión: Licúa o condensa parte del gas, operación realizada mediante intercambiadores criogénicos con propano.
4. Separación: Retira los compuestos más ligeros del gas como metano y etano mediante el fraccionamiento de la mezcla de gases.
5. Compresión: Aumentar la presión del gas para su comercialización.

Las secciones tres y cuatro serán las presentes en el proceso que se simulará en Pro/II.

CAPÍTULO 2

PRO/II

En este capítulo se expone la manera de trabajar una simulación en Pro/II, explicando las características del programa, enfocándose a los equipos que están presentes en el proceso de desmetanización y las consideraciones o limitaciones que existen con cada módulo. Al final se realizará una simulación de una destilación ternaria de isómeros con temperaturas cercanas de ebullición, comparando los resultados que se obtienen al usar dos modelos termodinámicos.

2.1 Introducción a Pro/II

Pro/II es un simulador de procesos de estado estacionario del tipo modular secuencial, para el diseño de procesos y su análisis operativo, útil en los sectores químico, del petróleo, gas natural, sólidos y polímeros.

Tiene en su biblioteca una gran cantidad de objetos o módulos para simular equipos y accesorios, así como de componentes químicos y métodos de predicción para propiedades termodinámicas.

Una vez se tiene el programa en un equipo de cómputo, es necesario comprender cómo realizar de manera general la simulación de un proceso:

La metodología para simular será la siguiente:

1. Establecer un sistema de unidades.
2. Seleccionar las especies químicas presentes en todo el proceso.
3. Elegir el o los modelos termodinámicos de la simulación.
4. Realizar el diagrama de flujo de procesos con los equipos, accesorios y líneas existentes.
5. Proveer a las líneas conocidas sus propiedades (temperatura, presión, composición, flujo másico, etcétera).
6. Especificar en cada módulo las condiciones deseadas de salida, en función de su objetivo operacional (presión, temperatura, composición, fase, etcétera).
7. Poner en marcha la simulación y extraer la información requerida de las tuberías y equipos.

Estando dentro de Pro/II, en el entorno de simulación deben estar todos los elementos como equipos y líneas de proceso, los cuales se encuentran en la “PFD Palette”:

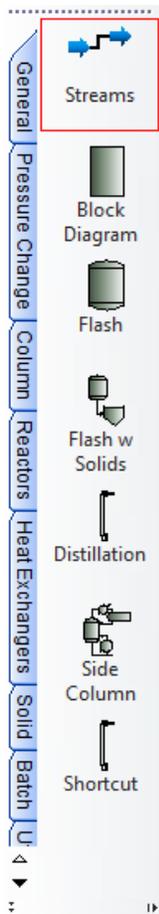


Figura 2.1 PFD Palette

En esta paleta de opciones se encuentran módulos u objetos que simulan a los equipos, accesorios, servicios y opciones adicionales para resolver las operaciones dentro del procesos.

2.2 Sistemas de unidades

El primer paso de una simulación es escoger el sistema de unidades, en función de los parámetros que necesitemos o de las condiciones de las líneas conocidas:

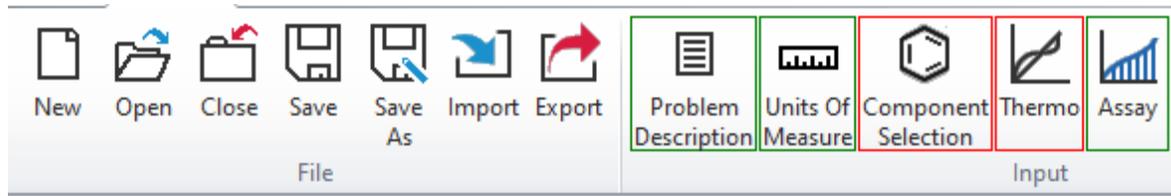


Figura 2.2. Opciones iniciales para una simulación.

Seleccionando “Units of Measure” se despliegan las siguientes opciones:

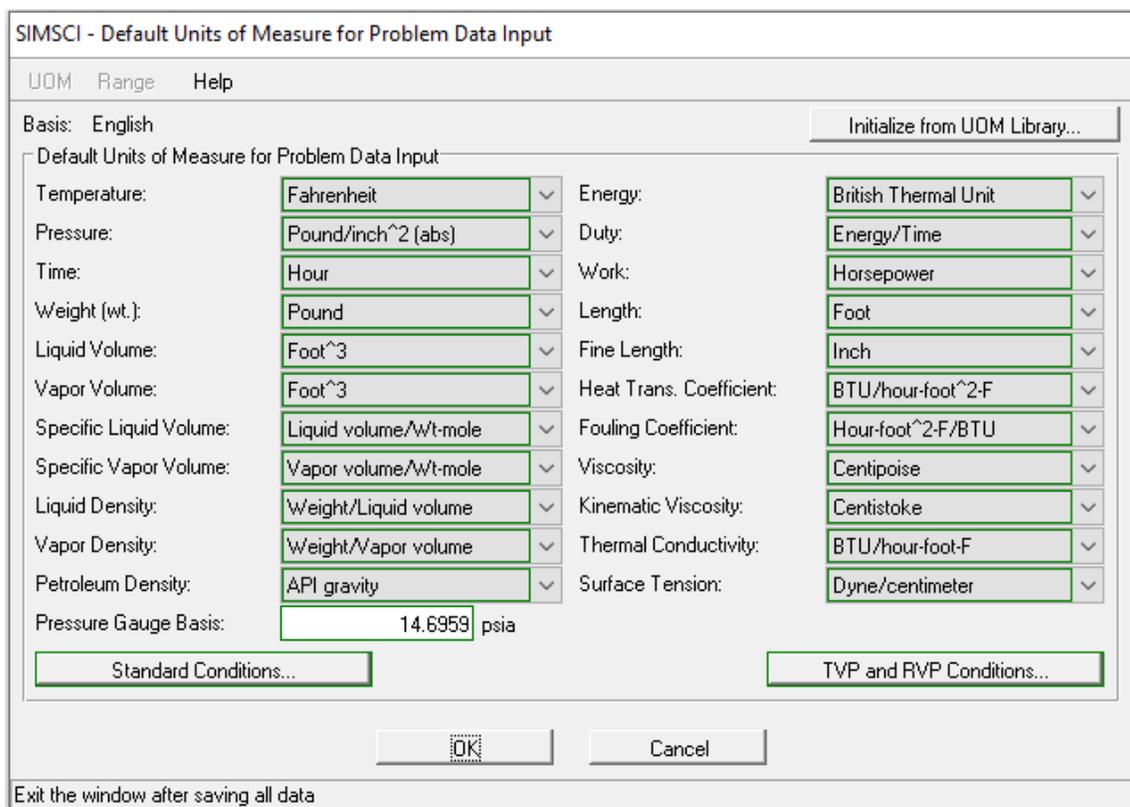


Figura 2.3. Selección del sistema de unidades

Aquí es posible elegir un sistema de unidades completo desde la opción “Initialize from UOM Library”, que permite seleccionar entre el sistema inglés, el métrico o el internacional. También es válido elegir cada variable en las unidades deseadas. Un parámetro que se puede introducir de manera manual es la presión atmosférica en “Pressure Gauge Basis”, que dependerá del lugar en que se trabaje el proceso que se simulará, por defecto el simulador tiene la presión de una atmósfera.

2.3 Selección de las especies químicas

En la opción “Component Selection” de la figura 2.4, se eligen los componentes que estarán en la simulación; en la ventana se selecciona la opción “Select From List”, que abre en siguiente panel:

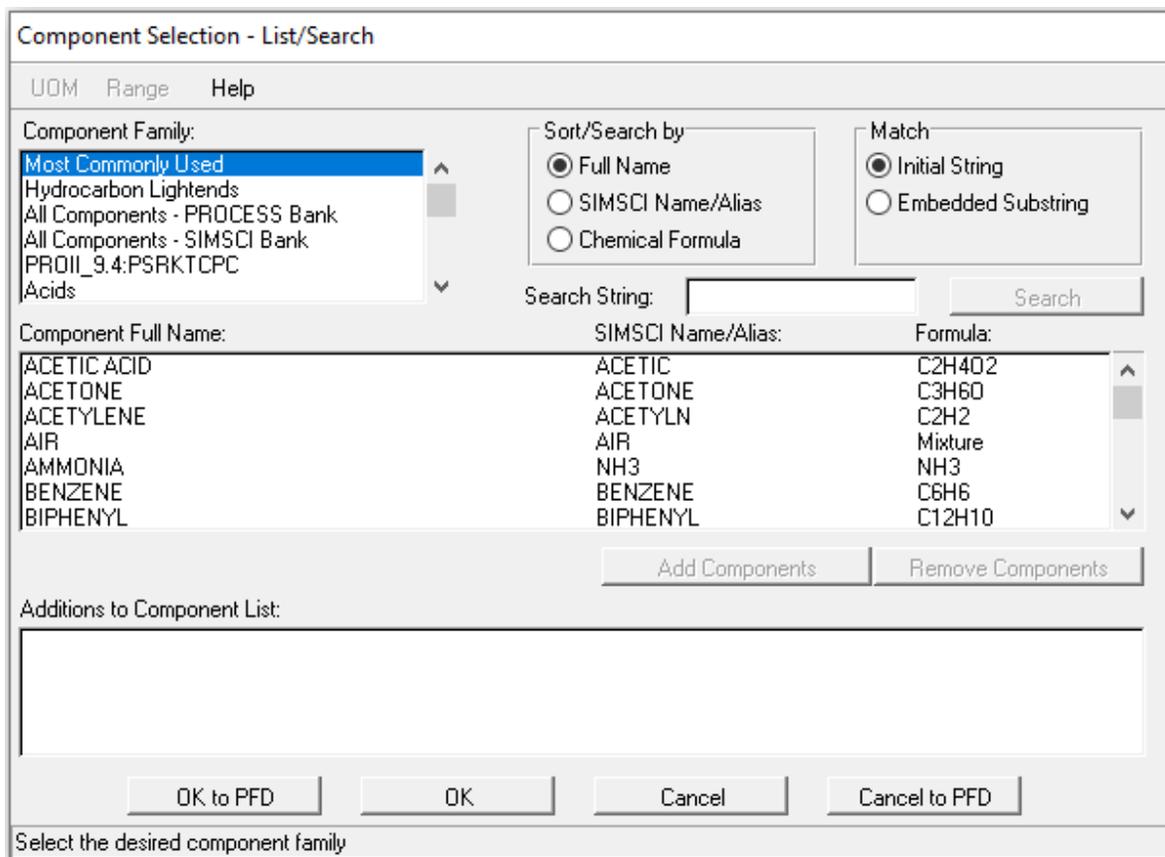


Figura 2.4 Selección de los componentes

Se debe seleccionar en la parte superior izquierda la familia de componentes, de esta forma, se muestran en la parte de en medio todas las especies presentes de esa familia. Eligiendo “All Components – SIMSCI Bank” estará disponibles todas las especies que tiene cargadas el programa. Es posible añadir un segundo filtro al seleccionar las opciones nombre completo “Full Name”, el nombre con el que se tiene registrado en el programa (que suele ser el nombre común), o su fórmula molecular.

2.4 Modelos termodinámicos.

Una de las decisiones que marcará el éxito de cualquier simulación que llevemos a cabo, es la correcta selección del modelo termodinámico. Esta crucial elección, otorga validez a los resultados que obtengamos, ya que con el modelo se calculan las características fisicoquímicas y de transporte para el dimensionamiento de equipos.

Los modelos termodinámicos son herramientas matemáticas, un conjunto de ecuaciones y algoritmos, diseñados para el cálculo de las propiedades energéticas y equilibrios de fase, en las sustancias puras o mezclas; en virtud de estos parámetros calculados, es posible llevar a cabo los balances de materia y energía en los equipos y, por ende, su dimensionamiento.

Es importante seleccionar adecuadamente el modelo termodinámico con el que se simulará el proceso. En el caso de que seleccionemos uno erróneo, el simulador puede llegar a una “solución”, ya que realizará los cálculos que el modelo elegido le indique, sin embargo, estos resultados finales no serán correctos; al no tener valores reales de las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, la simulación se invalida.

Cuando se inició el análisis de los procesos químicos, se planteó una forma de describir específicamente el comportamiento de los gases; mediante la ley de los gases ideales, podemos relacionar la presión, temperatura y volumen específico de la forma:

$$PV = RT$$

Donde:

P = Presión absoluta del sistema

V = Volúmen específico del gas

T = Temperatura en escala absoluta

R = Constante de los gases ideales

Esta ecuación de estado, como su nombre indica, ayuda a describir el comportamiento de sus variables considerando la idealidad, ya que, establece partículas puntuales sin interacciones entre ellas.

Actualmente, es bien sabido que la mayoría de los gases, difícilmente se acercan al comportamiento ideal. Aunque, compuestos como algunos gases apolares y los inertes, pueden comportarse bajo las condiciones combinadas de alta temperatura y presión baja, como un gas ideal.

La idealidad de los gases está relacionada directamente con las condiciones ya dichas; temperatura y presión, así como la naturaleza de los compuestos presentes y sus concentraciones, son las razones por las cuales los gases se desvían del comportamiento ideal.

De forma equivalente, los líquidos se comportan de manera real, no ideal, prueba de ello es que, al mezclar dos líquidos diferentes, en consecuencia, del acomodo de sus moléculas, el volumen resultante es diferente al de la suma de los dos líquidos puros; esto es comportamiento de una propiedad no aditiva, fenómeno que no existiría al considerar partículas puntuales, sin interacciones moleculares.

Estos fenómenos no pueden ser descritos con los modelos idealizados. Dicha situación, ha llevado a realizar modelos teóricos y predictivos, que describen el comportamiento de líquidos y gases no ideales.

Existe una gran variedad de modelos termodinámicos, cada uno fue creado para trabajar en cierto intervalo de presión, temperatura y concentración. Algunos modelos son eficaces para el cálculo de las propiedades de hidrocarburos ligeros, otros más para compuestos polares, no polares, polímeros, etcétera.

Los criterios a tomar en cuenta para la selección del modelo termodinámico en una simulación, considera tres factores principales:

1. Naturaleza de los componentes (polaridad), idealidad o no idealidad de la mezcla.
2. Intervalo de composición, temperatura y presión.
3. Tipo de aplicación (equilibrio vapor-líquido, equilibrio líquido-líquido, una fase, etcétera).

La no idealidad de las especies químicas o mezclas está determinada por las interacciones a escala molecular y las condiciones existentes de presión y temperatura pueden acentuar o suavizar el comportamiento no ideal del sistema.

Algunas de las fuerzas intermoleculares, que favorecen la no idealidad de los sistemas son:

1. Ión-dipolo.
2. Dipolo-Dipolo.
3. Dipolo-Dipolo inducido.
4. Puentes de hidrógeno.
5. Fuerzas de dispersión de London (dipolo instantáneo-dipolo inducido).

2.4.1 Tipos de modelos termodinámicos

Los modelos termodinámicos fundamentalmente se agrupan en los siguientes tipos [4]:

1. **Ecuaciones de estado (EOS: Equations of state)**, se aplican a fluidos normales (gases raros, nitrógeno, oxígeno, monóxido de carbono, hidrocarburos), CO₂, H₂S, H₂, especies de baja polaridad y fluidos súper críticos. Estos modelos son continuos en la región de dos fases y predicen el equilibrio líquido vapor.
No se pueden aplicar a mezclas de componentes polares, a moléculas grandes o electrolitos.
2. **Modelos de coeficiente de actividad (LACM: Liquid activity coefficient methods)**, describen el comportamiento no ideal de líquidos puros y mezclas, especialmente para compuestos polares, especies que forman enlaces de hidrógeno, polímeros y electrolitos, a presiones bajas, menores a 10 bar.
Debido a que sólo describen el comportamiento de la fase líquida, es necesario utilizar una ecuación de estado para la fase vapor, si es que la hubiera.
3. **Modelos Especiales**, diseñados para trabajar con compuestos y procesos específicos como electrolitos, polímeros, aminas, etcétera.

Hay una gran cantidad de EOS, LACM y modelos especiales, incluso se siguen desarrollando nuevos métodos. Sin embargo, sólo unos cuantos son los utilizados, gracias a su correcto cálculo de las propiedades termodinámicas y de transporte. La mayoría de los simuladores comerciales tienen, en su base de datos, los modelos más usados de cada categoría.

La elección del modelo termodinámico para una simulación puede tornarse confusa, siendo la naturaleza de los componentes presentes y los intervalos de presión y temperatura, las variables que actúan de forma combinada, desviando la idealidad del sistema. Existen distintas reglas y recomendaciones que, dependiendo de las condiciones de la simulación, nos ayudan en la selección del modelo.

Eric C. Carlson creó un árbol de decisiones para la correcta selección del modelo matemático en la simulación de procesos [5]:

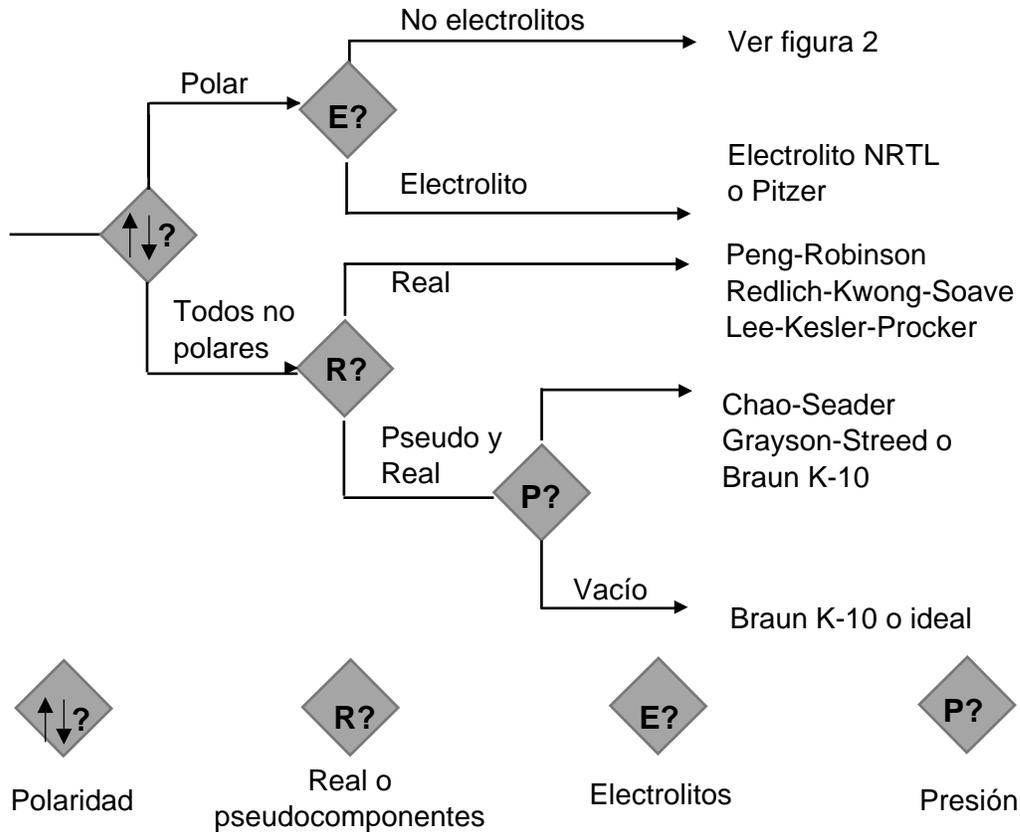
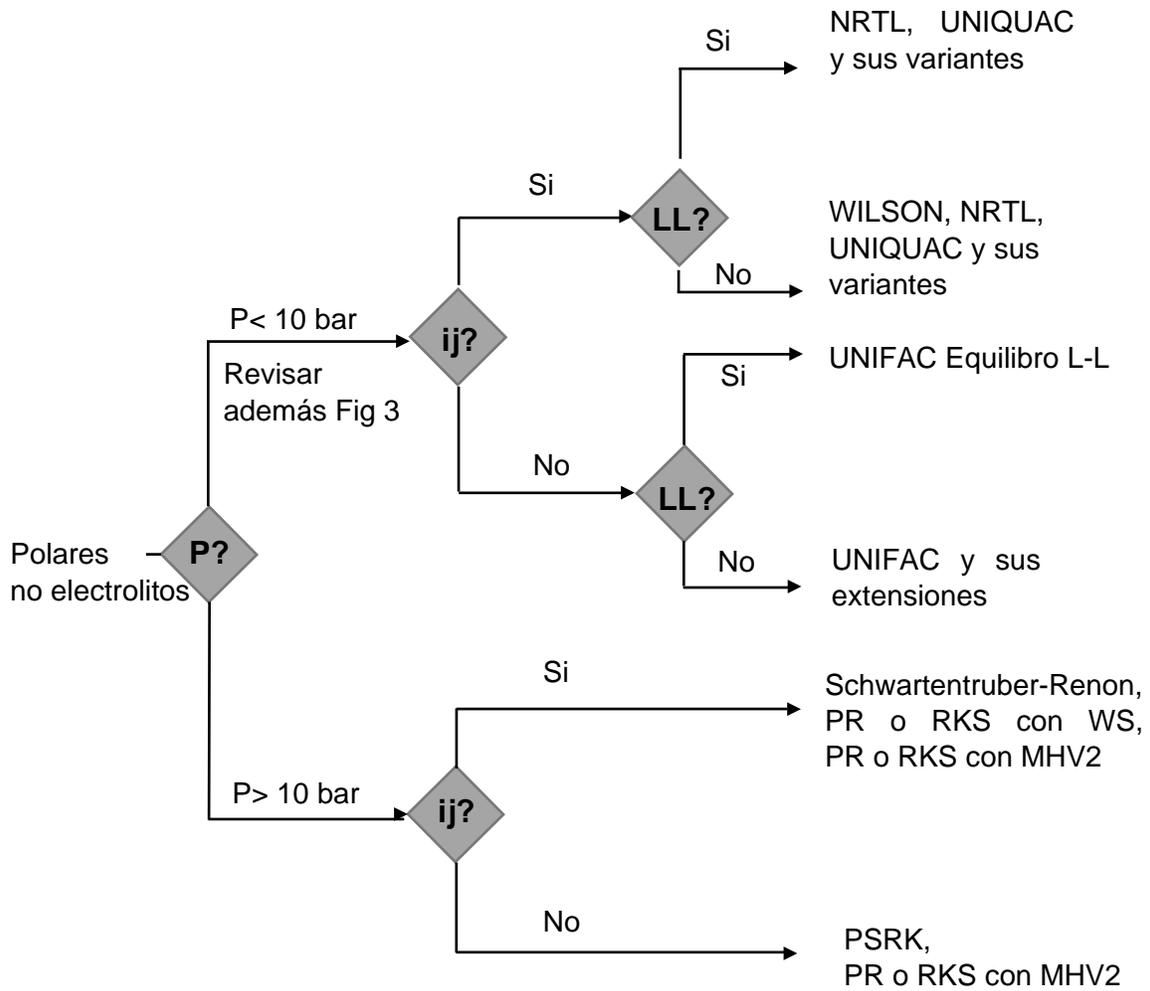


Figura 2.5 El primer paso para la selección de métodos de propiedades físicas

Pseudocomponentes: Para algunos sistemas formados por compuestos no polares, generalmente hidrocarburos, la mezcla es recurrentemente compleja, al existir una enorme cantidad de componentes. En este caso, es posible agrupar mediante una propiedad, como el punto de ebullición. Así, una mezcla con varias decenas o cientos de componentes, puede ser reducida a 30 o menos pseudocomponentes. Las propiedades de estos componentes congregados, se caracterizan con su punto de ebullición, gravedad específica y pesos moleculares promedios ponderados.

Unifac y extensiones: En los últimos años, se han alcanzado mejoras al método Unifac, permitiendo una mejor predicción del equilibrio líquido-vapor, en un rango más amplio de temperatura. Estas mejoras del método, son tomadas en cuenta en las actualizaciones de los simuladores de procesos.



Presión



Parámetros de interacción disponibles



Líquido/Líquido

Figura 2.6. Continuación para componentes polares y no electrolitos

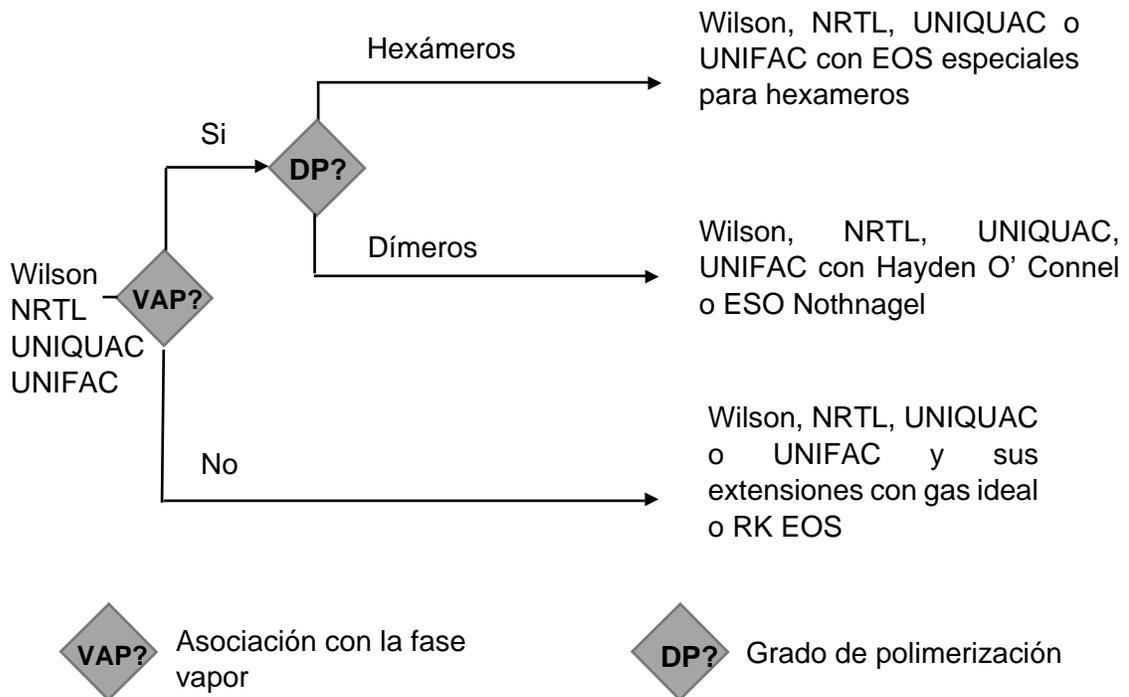


Figura 2.7. Opciones para cálculos fase-vapor con modelos de coeficiente de actividad

Para elegir el modelo termodinámico de una simulación, se selecciona la opción “Thermo”, que genera la siguiente ventana:

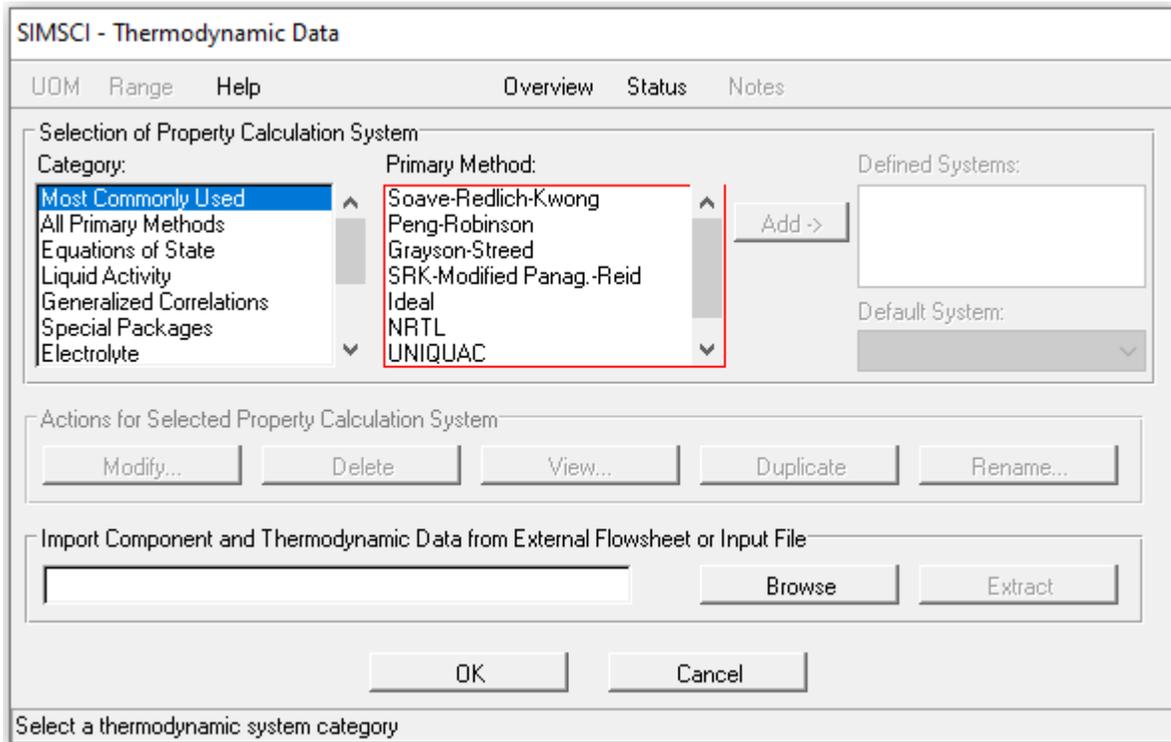


Figura 2.8 Selección del método termodinámico de la simulación

En la sección “Category” se selecciona el tipo de modelo termodinámico, se agrupan como: más comúnmente usados, ecuaciones de estado, modelos de coeficientes de actividad, correlaciones generalizadas, polímeros, aminas, etcétera. Después de seleccionar la categoría, se elige el modelo específico en la sección “Primary Method”. Es posible seleccionar más de un modelo termodinámico, y se aplicará según las especies y la sección del proceso que lo requiera.

2.5 Líneas de proceso y especificación de condiciones

Posterior a la selección del método termodinámico, y se coloquen los equipos en el entorno de desarrollo (los cuales serán explicados más adelante), se deben incluir las características de las corrientes conocidas. Generalmente los equipos constan de una o varias corrientes de entrada, las cuales deben estar especificadas, y el módulo del equipo realizará los cálculos unitarios intrínsecos a su operación. Por tanto, debe existir al menos una línea que tendrá especificadas sus propiedades.

Las corrientes representan una condición puntual con parámetros definidos, que pueden ser un producto, un servicio o una corriente de alimentación a un equipo. La manera de representar estas corrientes es con el módulo “Stream” que se encuentra en la pestaña “General” de la “PFD Palette”.

Al tener una línea en el entorno de desarrollo, normalmente va unida al algún módulo, a menos que necesitemos, por ejemplo, averiguar alguna condición específica como la presión o temperatura de rocío o burbuja del sistema, un valor de entalpía, u otra cosa que no precisa averiguarse con una operación unitaria.

Cuando se tenga el módulo “Stream” en el entorno de desarrollo, al entrar en él se presentan las siguientes opciones:

PRO/II - Stream Data

UDM Range Help Tag Overview Status Notes

Stream: S1 Description:

To Unit: (Product Stream)

Stream Type

- Composition Defined
- Petroleum Assay
- Spiral CrudeSuite
- Referenced to Stream
- Solids Only Stream

Flowrate and Composition...

Stream Solids Data...

Stream Polymer Data...

Thermal Condition

First Specification: Temperature F

Second Specification: Pressure psia

Thermodynamic System: Determined From Connectivity

OK Cancel

Enter the stream temperature

Figura 2.9 Opciones del módulo “stream”

El módulo, como todos los demás en Pro/II, presenta en parte superior izquierda el nombre de ese objeto, el cual podemos cambiar al que se necesite.

En estas opciones están las especificaciones de la línea; se deben introducir dos propiedades, la presión y la temperatura, o en caso contrario sólo una de estas, y en segunda opción alguna condición que especifique a la otra, como el punto de rocío, de burbuja, la fracción líquida, volumen o peso líquido.

En “Flowrate and Composition” se añaden los datos de flujo de la línea:

Stream Data - Flowrate and Composition

UOM Range Help Tag

Specify flowrate and composition for stream S1

Fluid Flowrate Specification

Total Fluid Flowrate: [] lb-mol/hr Total LV or GV rate Basis: Standard Basis

Individual Component Flowrates

Component Concentrations

Total Fluid Flowrate: [] lb-mol/hr

Component	
ACETONE	
H2O	

Clear Compositions Total: 0.00000

Normalize Component Flowrates Based on Specified Fluid Flowrate

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

Figura 2.10 Opciones para el flujo y composiciones de una línea

Para introducir el flujo másico existen tres opciones: (a) definir el flujo total y añadir las fracciones molares de cada componente, (b) incluir los flujos individuales de cada componente; (c) la concentración por componente.

2.6 Flujo en tuberías

Los materiales de las tuberías no pueden incluirse de manera directa en el simulador; para el cálculo de caída de presión debido a la altura y a la fricción, únicamente es necesario proveer al simulador de los datos de la tubería; su longitud total, longitud de elevación y la rugosidad absoluta del material seleccionado.

Para simular las tuberías, se selecciona el objeto “Pipe” ubicado en la pestaña “Pressure Change” en la “PFD Palette”. Inicialmente, la tubería debe estar en el entorno de simulación, la cual necesita una línea de entrada con los datos cargados del flujo que circulará por ésta (caudal, composición, presión y temperatura), y de su lado contrario, la línea de salida, tal como se muestra en la figura 1; siendo la línea “1” la entrada, el objeto “P1” la tubería y la línea “2” la salida.

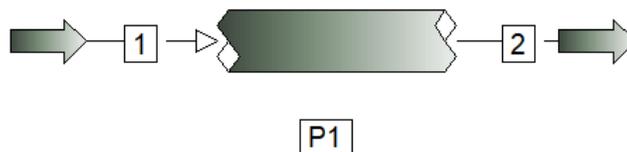


Figura 1. Representación inicial para simular tuberías

Una herramienta muy útil en este apartado, que proporciona Pro/II, es el dimensionamiento de las tuberías. Seleccionando el objeto “Pipe”, se abre el menú de opciones de la simulación:

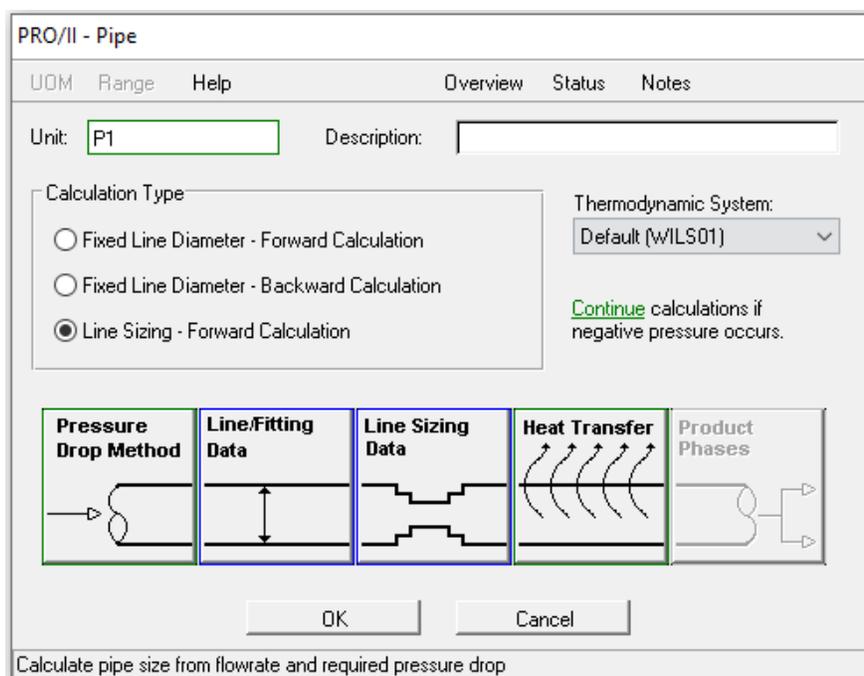


Figura 2.11 Menú de opciones para el objeto “Pipe”

En las opciones de “Calculation type”, se selecciona “Line Sizing – Forward Calculation”, que permitirá dimensionar la tubería en función del caudal que la atraviese, el material de construcción (rugosidad absoluta), la longitud total de la línea, su elevación y la caída de presión permitida hasta la salida. Igualmente es posible, dimensionar la tubería con una restricción de presión en las opciones “Fixed Line Diameter”.

Siempre deben especificarse las opciones que se encuentran en la parte de abajo de la figura 2.11.

2.6.1 Método para la caída de presión en la tubería

Al seleccionar el recuadro “Pressure Drop Method”, se desplegará el siguiente menú:

Pipe - Pressure Drop Method

UOM Define Range Help

Pressure Drop Correlation: Beggs-Brill-Moody

Estimated Pressure Drop: 0 psi

Convergence Tolerance: 0.01 Percent

Flow Efficiency: 100 Percent

Moody Friction Factor:

Include Acceleration Term in Pressure Drop Equation

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

Figura 2.12 Opciones para Pressure Drop Method del objeto Pipe

La primera opción “Pressure Drop Correlation”, permite seleccionar el modelo matemático con el que se calculará la caída de presión en la tubería, que depende del tipo de flujo que exista (a dos fases, líquido, compuesto principalmente por fase gaseosa, con elevación en la línea, etc.). Cada versión de Pro/II tiene distintos métodos de la caída de presión, sin embargo, algunos de ellos están presentes en la mayoría, y la guía de usuario contiene los métodos que incluye cada versión del programa.

A continuación, se muestra una tabla de los métodos presentes y sus casos de aplicación [6]:

Correlación de caída de presión	Aplicación
Beggs-Brill-Moody	Este es el método predeterminado por PRO/II y es el método recomendado para la mayoría de los sistemas, especialmente los sistemas monofásicos.
Olimens	Se utiliza para sistemas de gas condensado, que utiliza la correlación de Eaton para calcular la retención de líquidos y los diagramas de Moody para el factor de fricción.
Dukler-Eaton-Flanigan	Esta correlación híbrida es para sistemas de condensado de gas que son principalmente gas.
Gray	Recomendado para sistemas de condensado de gas vertical. No es adecuado para líneas horizontales.
Hagedorn-Brown	Este método también se recomienda para tuberías verticales y no debe usarse para tuberías horizontales.
Mukherjee-Brill	Utilizado para sistemas de gas condensado. Este método debe usarse con cuidado debido a sus discontinuidades. Debe usarse en al menos 2 segmentos de tubería para evitar fallas debido a cambios en los regímenes de flujo.
Beggs-Brill-Moody-Palmer	Similar a Beggs-Brill-Moody, pero también incluye la modificación Palmer para tener en cuenta la retención de líquido, basado en datos experimentales para líneas cuesta arriba y cuesta abajo.

Tabla 2.1. Correlaciones para el cálculo de caída de presión en tuberías

Las demás opciones del menú del método de caída de presión, pueden dejarse como están predeterminadas, al ser “Estimated Pressure Drop” una estimación no requerida, ya que la simulación calculará la caída de presión, “Convergence Tolerance” y “Flow Efficiency” son valores fijos de 0.01 y 100, que permiten a la caída de presión calculada ser más real, al tener un porcentaje bajo de error en las iteraciones para su cálculo.

2.6.2 Datos para el montaje de la línea

Seleccionando la opción “Line/Fitting Data” en el menú de opciones de la tubería, se despliega la ventana siguiente:

UQM Define Range Help

Line/Fitting Diameter:

Inside Diameter: in

Nominal Pipe Size: in Schedule:

Line Length: ft

Elevation Change: ft

Roughness:

Absolute: in

Relative:

Divide line length into 1 segments for pressure drop calculation.

Print Segmentwise Data in Output Report

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Enter line length

Figura 2.13 Características de la tubería

Los datos que ingresemos en este menú, darán las características físicas para simular un tipo específico de tubería.

En opción “Line Length” se ingresa el valor de la longitud total de la tubería, “Elevation Change” representa la altura respecto a un nivel de referencia (el cambio de nivel de la tubería), que también puede tener un valor negativo, representado una línea con un nivel descendente.

Por último, es necesario incluir el valor de la rugosidad en la sección de la ventana “Roughness”, que será el parámetro con el que se calcularán las pérdidas de carga por fricción, la rugosidad absoluta dependerá del tipo de material de la tubería.

2.6.3 Parámetros para el dimensionamiento de la tubería

En el menú de opciones de tubería, se selecciona el recuadro “Line Sizing Data” que abrirá otra ventana como la siguiente:

Pipe - Line Sizing

UQM Define Range Help

Primary Sizing Criterion

Maximum Pressure Drop: [] psi

Minimum Outlet Pressure: [] psia

Maximum Average Fluid Velocity: [] FT/SEC

Line Inside Diameter Selection Method

Use Explicitly Defined Inside Diameters

Use Nominal Pipe Sizes [Enter Data...]

Pipe Diameters Used in Sizing Search

Inside Diameters
in
2
4
6
8
10
12
16
24
30
36

Restore Defaults

Clear All

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Enter maximum allowable pressure drop

Figura 2.14 Opciones de dimensionamiento

En “Maximum Pressure Drop” se introduce el valor deseado de la caída de presión total en la tubería, o en su defecto, en la opción “Minimum outlet pressure” dando el valor de la presión mínima que se tendría que tener a la salida de la tubería.

El valor de “Maximum Average Fluid Velocity” se puede dejar en blanco, a menos que se quiera incluir la velocidad promedio máxima que alcanza el fluido en la tubería, útil si se incluyen las velocidades máximas recomendadas en las tuberías.

Para el cálculo del diámetro interno, en función de todos los datos que ya han sido definidos, como la caída de presión, la longitud total, elevación y rugosidad, se tienen dos opciones. La primera es seleccionar “Use Explicitly Defined Inside Diameters”, al hacer eso, se deberán definir en la parte derecha del menú de la figura 5, los diámetros internos de las tuberías que tengamos disponibles, y el simulador realizará los cálculos para la selección de uno de los diámetros que definimos, y que cumpla con las condiciones impuestas.

Alternativamente a lo anterior, se elige “Use Nomial Pipe Sizes” y “Enter Data”, al hacer esto se debe completar lo siguiente:

	NPS IN	Pipe Schedule Number
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

Buttons: Reset, Clear All, OK, Cancel, OK to PFD, Cancel to PFD

Footer: Select nominal pipe size

Figura 2.15 Selección de diámetros de tuberías estándar

En este menú, se colocan una serie de diámetros nominales estándar en la columna izquierda “NPS IN”, y en la columna derecha “Pipe Schedule Number”, se introduce el número de cédula, relacionado con el espesor y la presión que resiste esa tubería. Con esos dos datos, el simulador tendrá el diámetro interno para la tubería seleccionada, y cuando corra la simulación, seleccionará la tubería adecuada, según las especificaciones dadas en los puntos anteriores.

2.6.4 Transferencia de calor en la tubería

En el apartado “Heat Transfer” dentro del menú de la tubería, se encontrará la siguiente ventana:

UOM Define Range Help

Duty Calculation Options:

Fixed Duty: x 10⁶ BTU/hr

Ambient Heat Transfer

Overall U: BTU/hr-ft²-F

Ambient Temperature: F

Isothermal Operation

OK to PFD OK Cancel Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

Figura 2.16 Opciones de transferencia de calor en la tubería

En el apartado se encuentran tres opciones para el intercambio de energía en la sección de tubería:

“Fixed Duty” es la cantidad de calor que se intercambia con el medio a lo largo del material, es posible incluirlo en distintas unidades de energía; si simulamos un proceso adiabático, permanece en cero el valor.

“Ambient Heat Transfer” Requiere del coeficiente global de transferencia de calor con el medio “Overall U” y la temperatura ambiente, para que el programa calcule el calor intercambiado.

“Isothermal Operation” podemos utilizarla en secciones cortas de tubería, y en diferencias de temperatura no muy grandes respecto al medio, para que pueda considerarse isoterma.

2.6.5 Válvula

El módulo “Valve” permite realizar un proceso de caída de presión, descrito por el efecto Joule-Thompson, un proceso de estrangulamiento de la línea, que provoca el descenso de la presión y temperatura. Este procedimiento necesita de un aislamiento térmico, y es relativamente lento.

El objeto requiere de una entrada y una salida, al seleccionarlo se presenta lo siguiente:

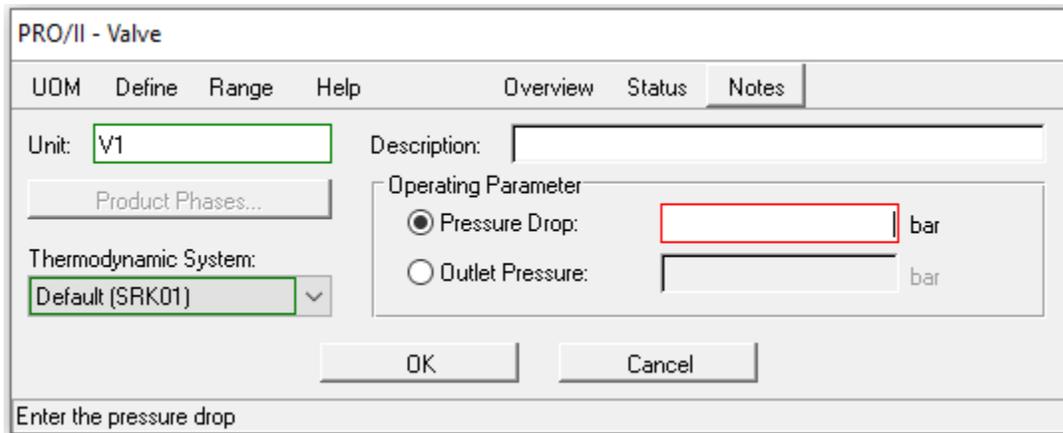


Figura 2.17 Opciones para la válvula de estrangulamiento

Se puede incluir el valor de la caída de presión en el accesorio “Pressure Drop” o la presión de salida “Outlet Pressure”,

2.6.6 Expansor

Para simular una expansión de un flujo gaseoso, se utiliza el módulo “Expander”, el cual necesita de una entrada y una salida, representadas por la línea 1 y 2 respectivamente, en la siguiente figura:

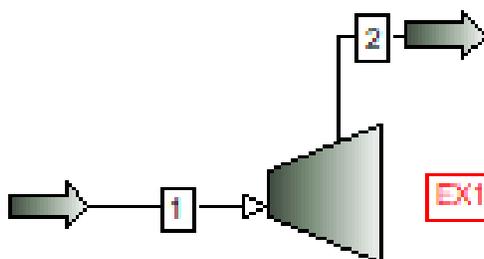


Figura 2.18 Representación para el modelado de un expansor

Entrando en el menú del objeto “Expander”, se encuentran las siguientes opciones:

PRO/II - Expander

UOM Define Range Help Overview Status Notes

Unit: EX1 Description:

Product Phases... Thermodynamic System: Default (SRK01)

Pressure and Work Specifications

Outlet Pressure: psia Outlet Temperature Estimate: F

Pressure Ratio: Minimum Outlet Pressure: psia

Pressure Drop: psi

Work: HP

Relative Tolerance: 0.001 Percent

Adiabatic Efficiency: 100 Percent OK Cancel

Enter the outlet pressure value

Figura 2.19 Ventana de opciones de un expansor

En las especificaciones del expansor, es posible incluir un valor para la operación, en función de lo que se esté buscando. Para indicar la presión de salida, será necesario incluir el dato en la opción “Outlet Pressure”, o una caída de presión respecto a la de entrada en la opción “Pressure drop”.

Si nuestro expansor es una turbina, o algún equipo que se necesite para producir un trabajo, se deberá incluir el valor en “Work”.

La característica que le dará el comportamiento más real al equipo, es su eficiencia adiabática. Un expansor ideal, es aquel que aprovecha por completo toda la energía interna transformada a energía cinética para generar un trabajo, este proceso conlleva una expansión isentrópica, que equivale a una eficiencia adiabática de expansión del 100%. Un expansor diseñado correctamente, puede alcanzar una eficiencia del 70 al 80% [7].

El siguiente diagrama de Entalpía-Entropía, representa un proceso de expansión real en una turbina, y su proceso ideal, ambos casos a las mismas condiciones de presión a la entrada y la salida.

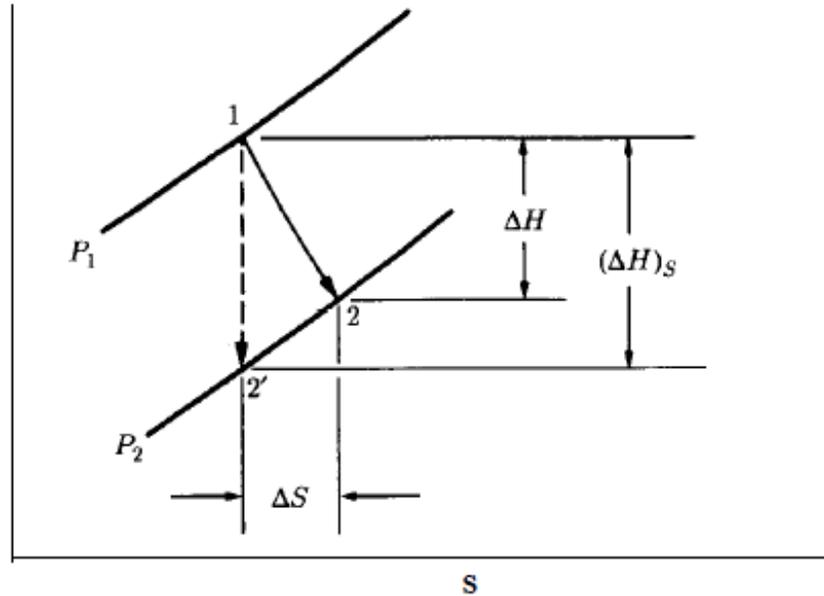


Figura 2.20 Proceso de expansión adiabática en una turbina o expansor

La trayectoria ideal es una línea vertical, de entropía constante, que inicia del punto 1 con la presión de entrada de la isóbara P_1 , hasta el punto 2' con la presión de la isóbara P_2 que es la línea de descarga.

La trayectoria que representa una expansión real, es la línea que inicia también en el punto 1, que baja hasta el punto 2 de la isóbara P_2 , y conlleva un aumento de entropía.

Entre más a la derecha se encuentre el punto de la descarga, menor será la eficiencia del proceso de expansión, la entropía tendrá un mayor aumento y el cambio de entalpía será menor, lo que también sería un cambio menor en la temperatura de salida.

2.6.7 Bombeo

Para simular el aumento de presión en una línea de líquido mediante una bomba, en la “PFD Palette” se selecciona el objeto “Pump”, el cual precisa de una línea de succión representada por la línea 1, y una de descarga representada por la línea 2 como en la siguiente figura:

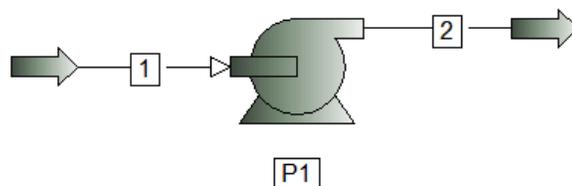


Figura 2.21 Representación para el modelado de una bomba

Seleccionando el objeto “Pump” se abrirá una ventana para la especificación de la bomba:

La imagen muestra una ventana de software titulada 'PRO/II - Pump'. En la parte superior hay un menú con las opciones 'UOM', 'Define', 'Range', 'Help', 'Overview', 'Status' y 'Notes'. El campo 'Unit' contiene 'P1' y 'Description' está vacío. 'Product Stream' está configurado en '2' y 'Thermodynamic System' en 'Default (SRK01)'. La sección 'Pressure Specification' tiene tres opciones: 'Outlet Pressure' (seleccionada con un botón de radio), 'Pressure Rise' y 'Pressure Ratio'. El campo de 'Outlet Pressure' tiene un cuadro de texto vacío con una línea roja parpadeante. El campo de 'Pressure Rise' muestra el valor '0' y 'psi'. El campo de 'Pressure Ratio' está vacío. A la derecha, 'Efficiency' tiene un cuadro de texto vacío y la unidad 'Percent'. En la parte inferior hay botones 'OK' y 'Cancel'. Una barra de estado en la base indica 'Enter the outlet pressure value'.

Figura 2.22 Opciones para el modelado de bombas

Si es seleccionado “Outlet Pressure” se digitará la presión absoluta de descarga, en caso contrario, si se elige “Pressure Rise” se colocará el aumento de presión que se desea, respecto a la línea de succión.

“Efficiency”, si no se incluye ningún valor, estará predeterminado en 100%, normalmente la eficiencia de equipos de compresión, al igual que los de expansión, es de un 70 a 80%. Este valor será usado para los cálculos de la potencia necesaria de la bomba y para la temperatura de salida, que para fluidos líquidos, considerados incompresibles, no tendrá un aumento grande.

La siguiente figura representa el diagrama Entalpía-Entropía para una compresión:

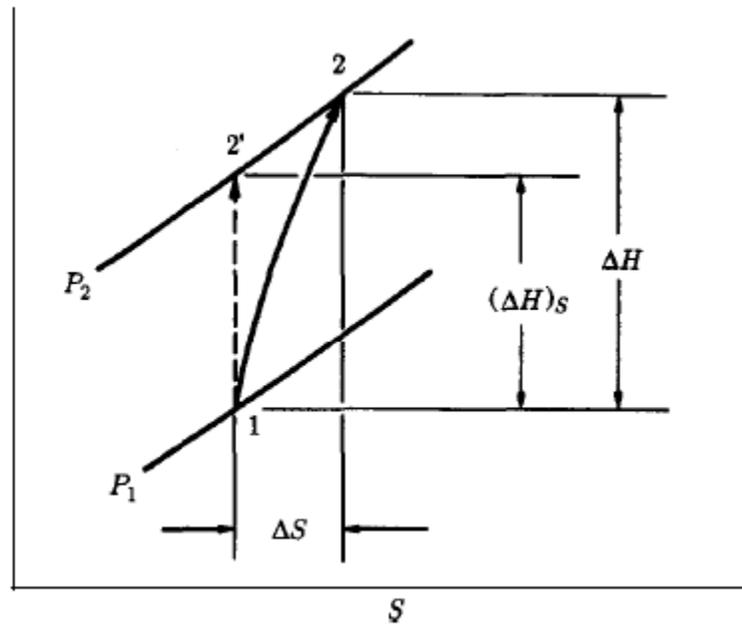


Figura 2.23 Proceso de compresión adiabática

La trayectoria vertical del punto 1 al punto 2', representa un proceso de compresión isentrópico, desde P_1 hasta P_2 , este escenario necesita de una eficiencia del 100%. El proceso de compresión real, está descrito por la trayectoria del punto 1 al punto 2, el cual provoca un aumento en la entropía y un mayor cambio en la entalpía, respecto al proceso isentrópico. Entre menos eficiente sea la compresión, las condiciones de salida serán más hacia arriba y a la derecha en el diagrama de entalpía-entropía, físicamente se necesitaría una potencia mayor de la bomba para llevar el fluido a la presión de salida, y también el aumento de la temperatura será mayor.

2.7 Intercambiadores de calor.

Pro/II provee distintas opciones para simular en intercambio de energía en forma de calor; en la pestaña “Heat Exchangers” de la “PFD Palette”, se encuentran varios objetos usados para la transferencia de calor.

El simulador no puede realizar un diseño específico de un intercambiador de calor, ya que, no hay una única configuración para un proceso específico. Lo que sí es posible, es simular la operación de un intercambiador de calor ya existente, al incluir los parámetros de entrada de las corrientes y las características del intercambiador, así se calcularán las condiciones de salida de ambas corrientes de entrada, todo eso se puede realizar con el objeto “Rigorous HX”.

En tema del proceso de este trabajo, interesa simular el intercambio térmico de dos corrientes, y el que se tendría con un servicio de enfriamiento o calentamiento, dependiendo el caso.

El objeto “Simple HX” permite calentar o enfriar una o dos líneas del proceso (simulando a un intercambiador de calor). Al tener sólo una línea de entrada, se estaría modelando únicamente el intercambio térmico que existiría con un servicio de calentamiento o enfriamiento. Si se colocan las corrientes de entrada y salida del fluido caliente y fluido frío, el simulador calculará las temperaturas de salida para ambas líneas. En la figura siguiente se muestra la disposición para el “Simple HX”:

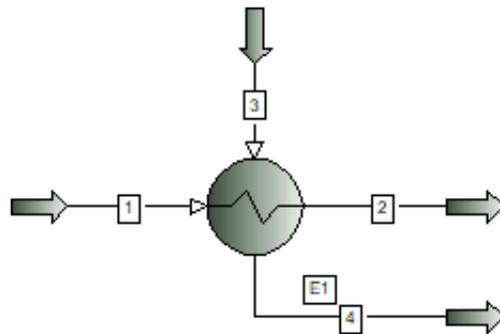


Figura 2.24 Representación para el modelado de un intercambiador de calor

En el esquema, la línea 1 y 2 representan la entrada y salida del fluido caliente, respectivamente. Y la entrada y salida del fluido frío están representadas por las líneas 3 y 4.

Al entrar en las opciones del intercambiador de calor simple, se tiene la siguiente ventana:

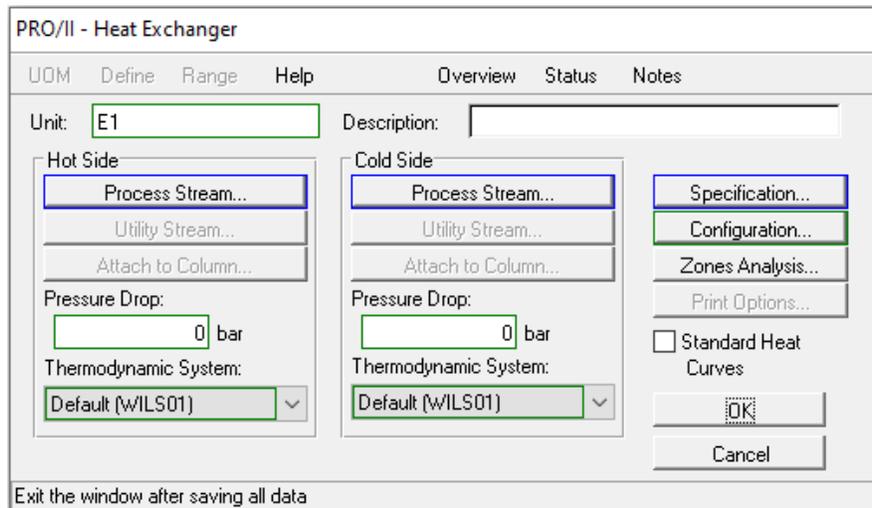


Figura 2.25 Opciones para el modelado de un intercambiador de calor simple

En el menú de opciones, se encuentran “Hot Side” y “Cold Side”, en la parte inferior de ambas columnas, se coloca la caída de presión para cada línea, las cuales se toman como especificación cuando se haga un diseño completo del intercambiador de calor. La caída de presión puede afectar la composición de las fases en la salida para una misma temperatura.

Para que se simule el intercambio de calor, es necesario especificar la temperatura de salida del lado frío o del lado caliente, seleccionando la opción “Specification” se tienen las siguientes opciones:

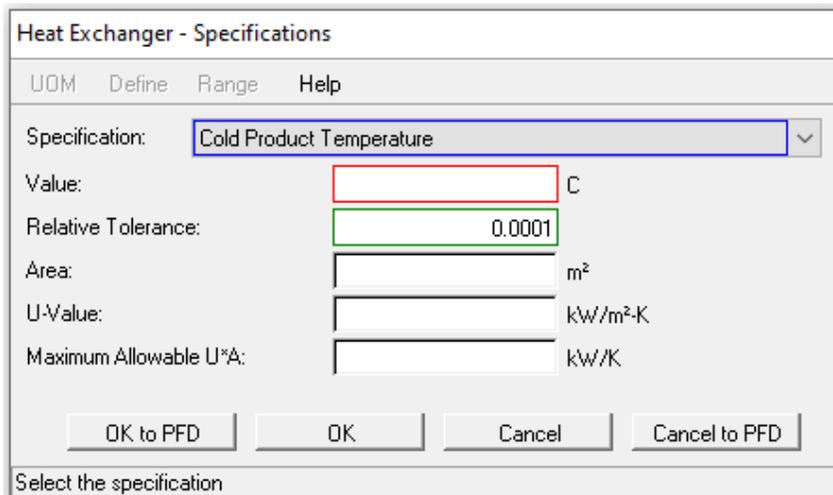


Figura 2.26 Especificaciones del intercambiador de calor

En la primera opción se elige la especificación para el intercambiador: la temperatura de salida del lado caliente o frío, una diferencia de temperatura respecto a la temperatura del punto de burbuja o de rocío, una fracción determinada de líquido a la salida de uno de los productos, o algunas otras más.

2.8 Separador flash

Para realizar una separación de una corriente bifásica de líquido y vapor, o llevar a cabo una destilación instantánea, se utiliza el módulo “Flash”. El objeto precisa para su operación una entrada y dos salidas (vapor y líquido), tal como se muestra:

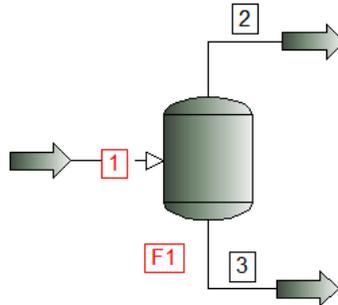


Figura 2.27 Representación para el modelado del objeto “Flash”

Ingresando al menú de opciones del objeto, se tiene lo siguiente:

Figura 2.28 Representación para el modelado del objeto “Flash”

Es necesario ingresar al módulo dos especificaciones, la primera puede ser una caída de presión en el equipo, la temperatura o presión de operación.

La segunda especificación puede ser alguna de las anteriores excepto la que se haya seleccionado como primera; se debe añadir una operación isoentrópica, el calor añadido al sistema, el punto de rocío o burbuja, una concentración de salida del vapor o del líquido, el flujo molar o másico de alguna línea de salida, etcétera.

2.9 Destilación método corto

La operación unitaria encargada de realizar el proceso de separación de los gases, en la desmetanización criogénica, es la destilación

El simulador de procesos, tiene dos módulos u objetos necesarios para realizar el proceso de destilación, ambos en la sección “Column” de la “PFD Palette”. Uno de ellos es “Shortcut” o método corto, en el cual se incluye la o las corrientes de entrada y las condiciones de salida del destilado y los fondos. Cuando se complete la simulación, en los resultados del objeto, se detallará la cantidad de etapas necesarias y la energía necesaria en el condensador y rehervidor para llevar a cabo la destilación. Es posible tener diferentes opciones de diseño para un mismo proceso de destilación, especificando un rango para el reflujo externo del destilado.

Para simular el método corto, el objeto Shortcut tendrá que estar en el entorno de simulación y especificar que tendrá un condensador y un rehervidor (cuando se coloca el objeto). Debe tener conectada la alimentación con las condiciones de entrada a la torre, así como se ilustra con la corriente 1 en la siguiente figura. Además, son necesarias las corrientes de destilado y de los fondos, representadas por las líneas 2 y 3 respectivamente.

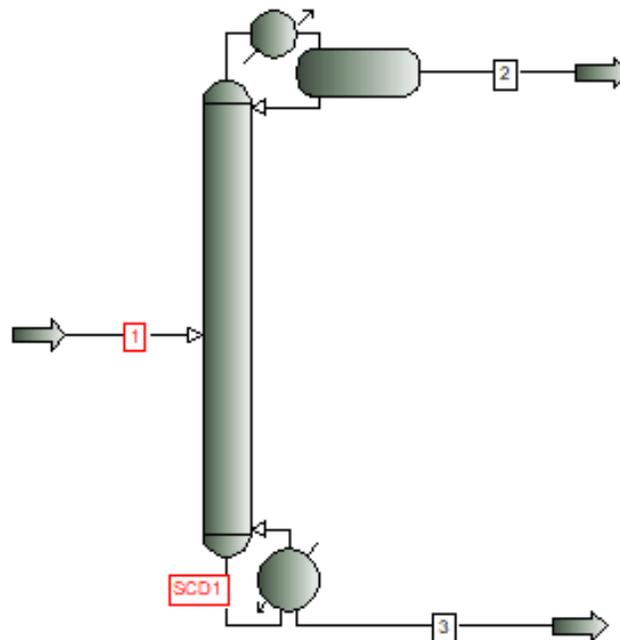


Figura 2.29 Representación para el modelado del método corto de destilación con el módulo Shortcut

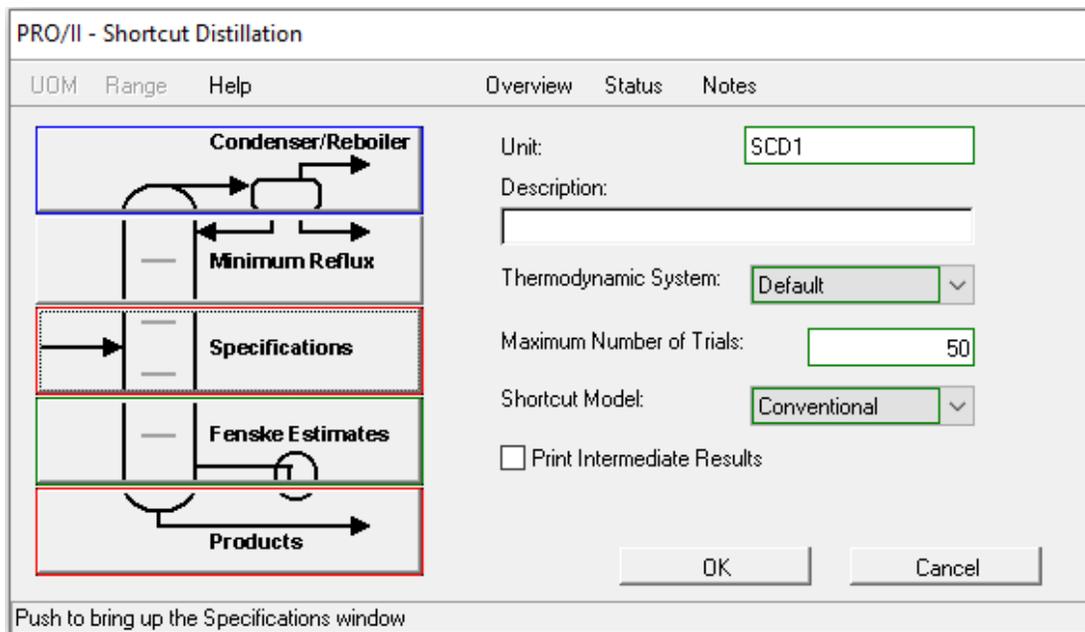


Figura 10. Opciones de simulación para Shortcut

2.9.1 Especificaciones del condensador

La primera opción “Condenser/Reboiler” tiene como función especificar la operación del condensador de la torre, al entrar en esta opción, se despliega lo siguiente:

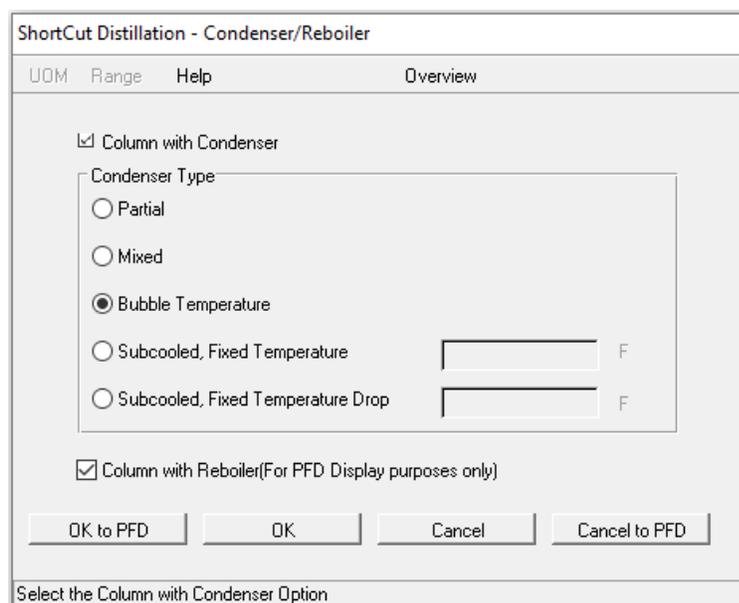


Figura 2.30 Opciones para el condensador de la columna del método corto

Las opciones que están presentes para describir la operación del condensador son:

Partial: El condensador es una etapa de equilibrio, puede tener un producto destilado en forma de vapor. La temperatura del condensador es la del punto de rocío del vapor en equilibrio.

Bubble Temperature: El vapor de la etapa dos, es enfriado hasta el punto de burbuja, una parte es regresada por el reflujo a la etapa dos y la otra es retirada como producto del domo.

Subcooled, Fixed Temperature: El vapor de la etapa dos, es enfriado por debajo de su punto de burbuja. El simulador comprueba que la temperatura fijada cumpla la condición de subenfriamiento, si no es así, se muestra un mensaje de no convergencia de la temperatura.

Subcooled, Fixed Temperature Drop: Funciona de la misma forma que el Subcooled, Fixed Temperature, excepto que la temperatura que se fija en esta opción, serán los grados que estará el producto por debajo de su punto de burbuja.

2.9.2 Reflujo mínimo

Para especificar las opciones del reflujo de operación, en el menú de Shortcut se selecciona la opción “Minimum Reflux”, que abrirá lo siguiente:

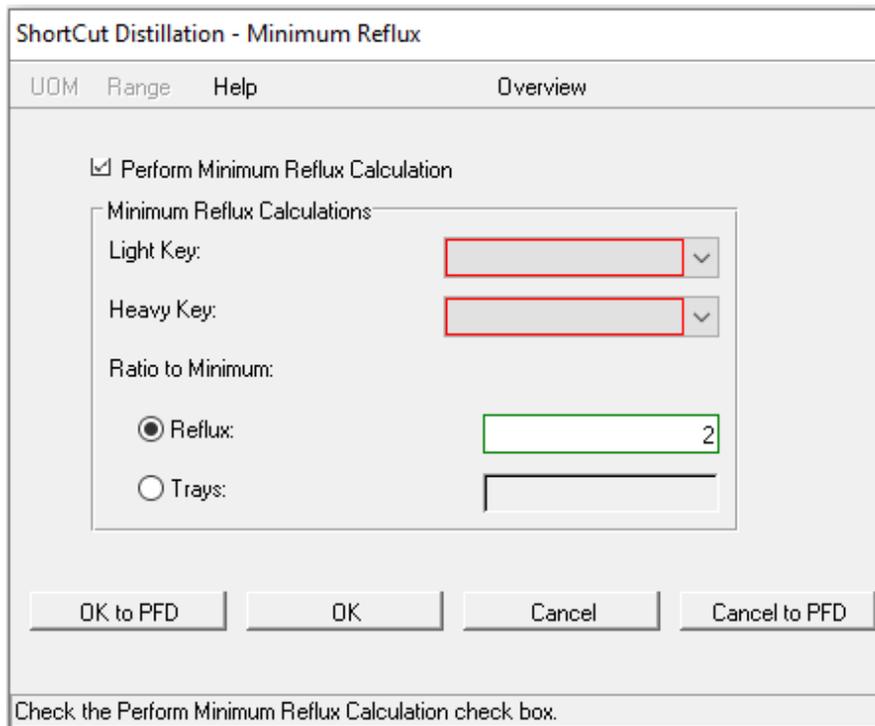


Figura 2.31 Opciones de reflujo mínimo en Shortcut

En esta opción se especifican los componentes clave ligero “Light Key” y el clave pesado “Heavy key” que son aquellos en los que se basa la destilación, ambos componentes están presentes en los fondos y en el destilado a cualquier relación de reflujo. Pero, el clave ligero está en mayor concentración en el destilado, y el componente clave pesado se encuentra mayormente en los fondos.

Hay dos formas de especificar el parámetro con el que se diseña la torre, uno radica en el reflujo mínimo y el otro en el número de platos de la torre. Se debe seleccionar uno de ellos:

Reflux: Será el valor de la relación $\frac{\text{Reflujo}}{\text{Reflujo mínimo}}$, el simulador tomará este dato, y cuando se obtengan los resultados, generará cuatro soluciones adicionales con diferentes valores del reflujo especificado, dos de ellas con un reflujo mayor y otras dos con un reflujo menor. Para todas las soluciones, nos indicará como parámetros de salida: el calor necesario en el rehervidor y condensador, el plato óptimo de alimentación y la relación L/D ($\frac{\text{Reflujo que entra en la columna}}{\text{Reflujo que se acumula como destilado}}$).

Trays: Al seleccionar esta opción de diseño, se deberá especificar la cantidad de platos que se desean por encima de la cantidad de platos mínima para realizar la destilación, y a su vez, este valor será la cantidad de platos de diferencia entre cada solución que calcule Pro/II. Todas las soluciones dan los mismos parámetros de salida que la opción Reflux, únicamente el parámetro que no se podrá controlar es la relación de reflujo L/D, ya que esta dependerá de la cantidad de platos que tenga la torre.

2.9.3 Especificaciones de los productos

Las condiciones buscadas para los productos del destilado y/o fondos de la columna, se detallan en la sección “Specifications” del Shortcut:

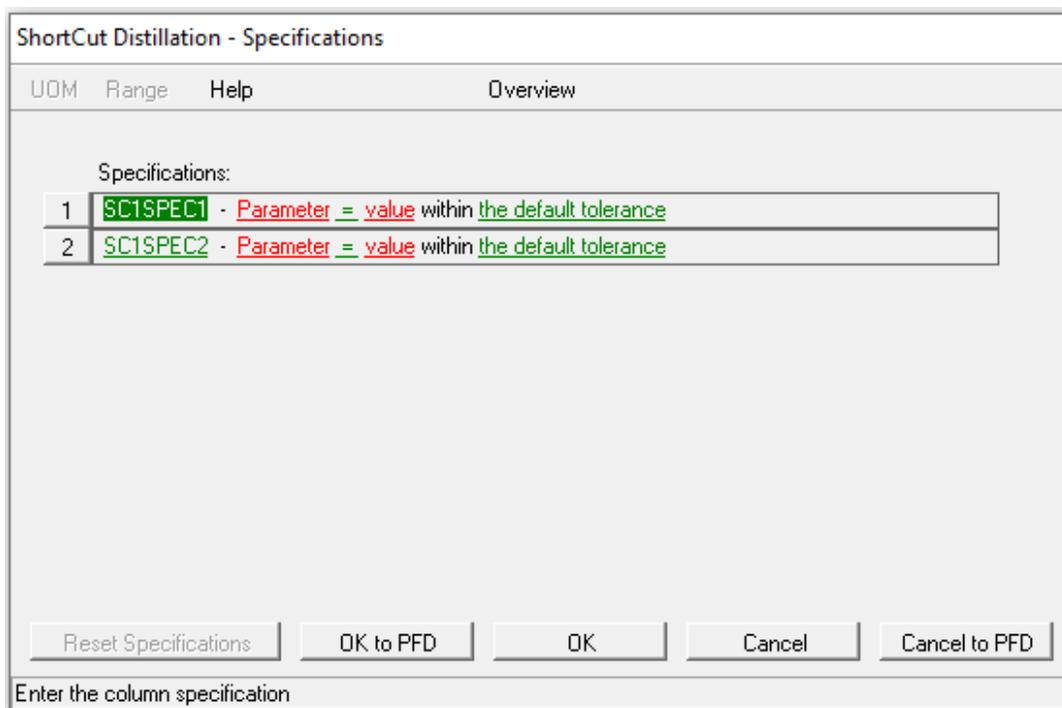


Figura 2.32 Especificaciones de los productos del método corto

Las dos especificaciones deben incluirse para que se pueda realizar la simulación. Al seleccionar la opción “Parameter” para alguna de las dos, se abre un menú como el siguiente:

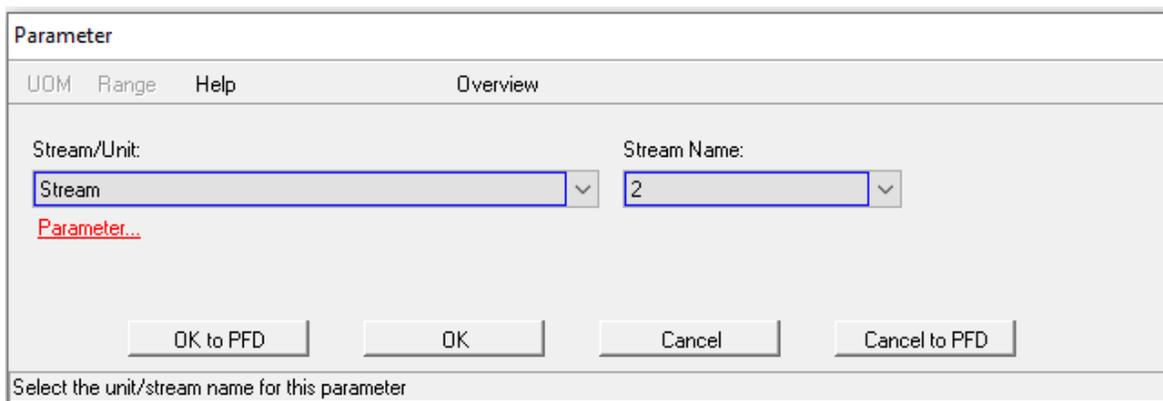


Figura 2.33 Parámetros para la especificación de los productos del Shortcut

En la opción “Stream/Unit”, normalmente se coloca “Stream” como se muestra en la figura 2.33, esto para seleccionar la línea de salida a especificar, que en este caso es la línea 2 que representa el destilado de la figura 2.29.

A continuación, se selecciona la opción “Parameter” que despliega lo siguiente:

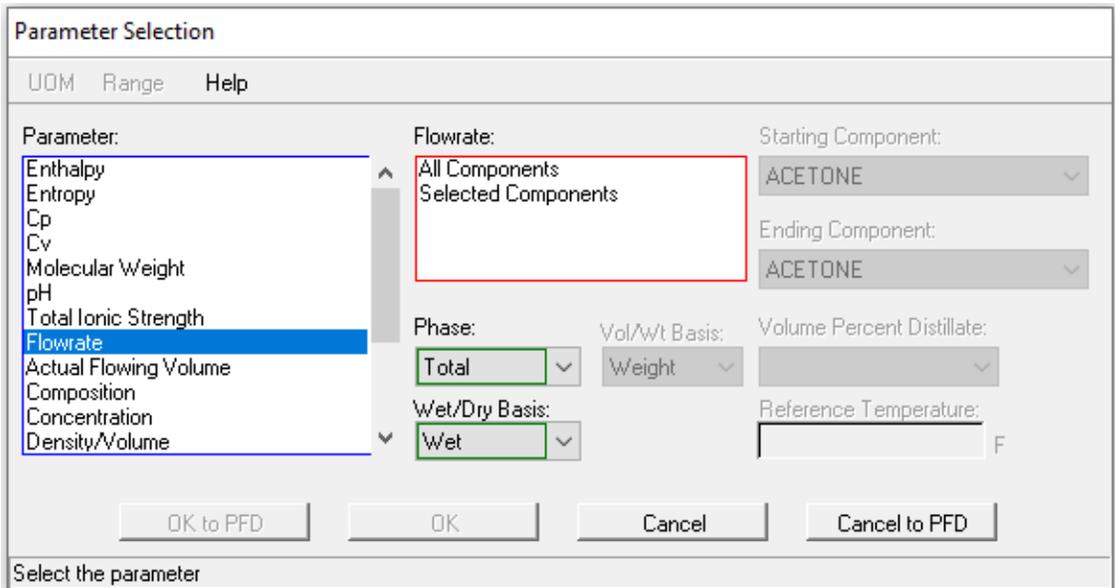


Figura 2.34 Selección del parámetro para la especificación de una línea de producto en Shortcut

En la columna izquierda se selecciona el parámetro de especificación de la línea, que puede ser: entalpía, entropía, peso molecular, pH, flujo másico o caudal, composición, concentración, etcétera.

En función de la opción elegida, se tendrá que especificar el flujo (flowrate) de uno, varios o todos los componentes, la fase considerada (líquido, vapor o total) o la base (húmeda o seca). Y en la parte derecha se seleccionará el componente o componentes de interés.

2.9.4 Productos

El paso final para poder simular el método corto es suministrar datos estimados del flujo de los productos. En las opciones de Shortcut se selecciona "Products":

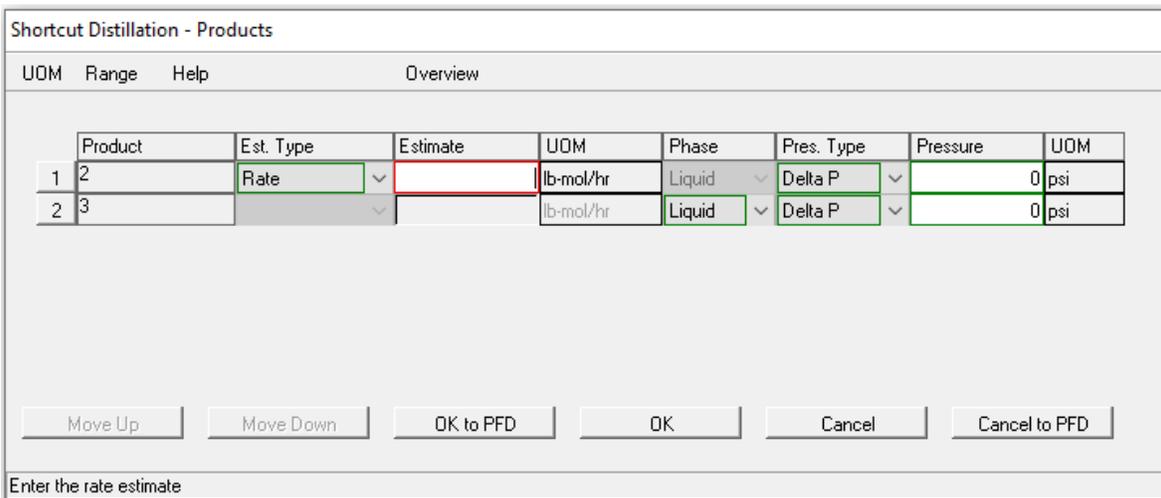


Figura 2.35 Estimaciones para las líneas de productos en Shorcut

En “Estimate” se coloca un flujo aproximado para la corriente de destilado o fondos, este valor no será tomado como especificación, el simulador solo parte de éste para las iteraciones de cálculo.

Puede ser incluido un valor para la caída de presión o la presión final de ambas líneas de salida de la torre.

2.10 Destilación Método riguroso

Los cálculos del método corto deben ser comprobados con un método riguroso, el cual se realiza con el objeto “Distillation”, aquí se introducirán los datos que se obtuvieron con el objeto Shortcut. Cuando se incluye el objeto en el entorno de simulación, se especifica el número de etapas para la torre, que necesariamente deben ser las de una solución del método corto, para comprobarlo.

La torre necesita al menos una entrada para la alimentación, una línea de salida para los fondos y una para el destilado. La línea del destilado se coloca en función del tipo de condensador; al ser parcial, deberá unirse a la parte superior del condensador y, si el condensador lleva el vapor de la última etapa a su punto de burbuja o a un líquido subenfriado, la línea de destilado se colocará por debajo del condensador, como se muestra en la figura:

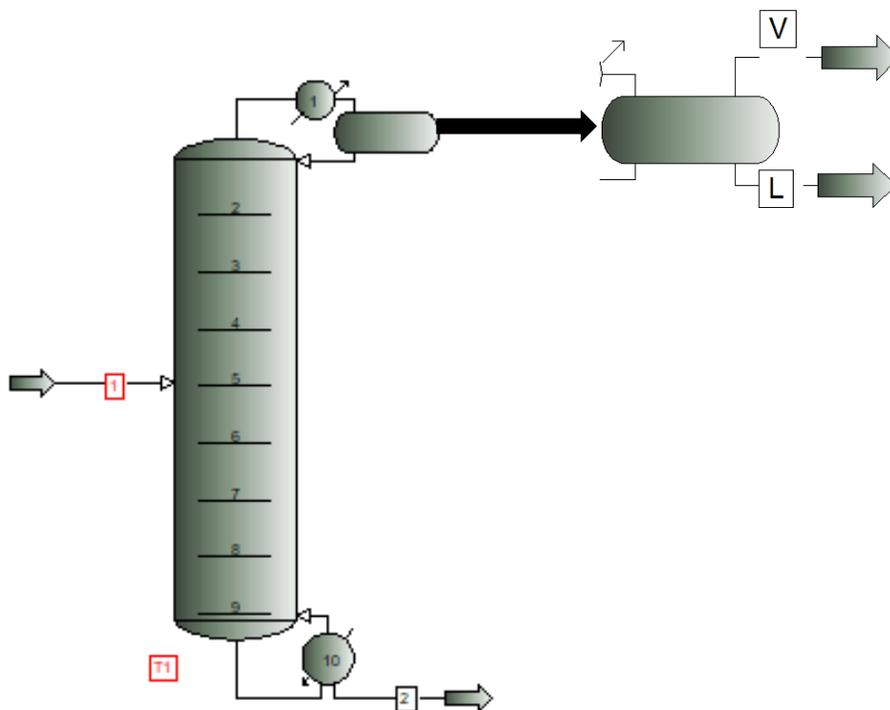


Figura 2.36 Representación para el modelado del objeto “Distillation”

Al entrar en el objeto Distillation, se despliegan las opciones siguientes:

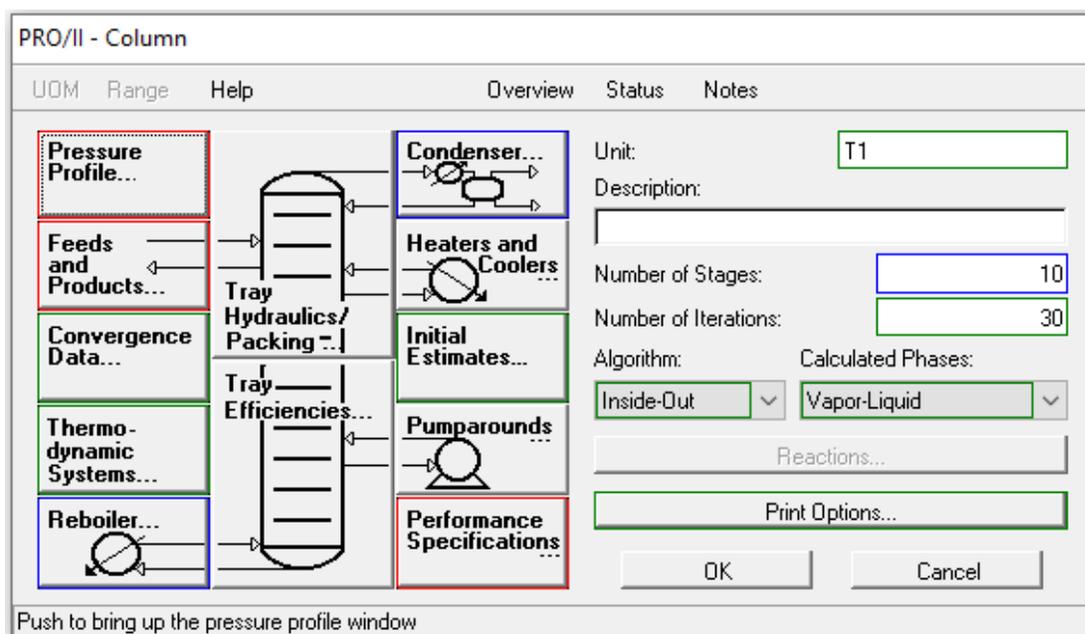


Figura 10. Opciones para el método riguroso del objeto “Distillation”

2.10.1 Perfil de presión en la torre

La primera opción del menú de destilación “Pressure Profile”, requiere la inclusión de un perfil de presión a lo largo de la torre. Seleccionando el apartado, surgen las siguientes opciones:

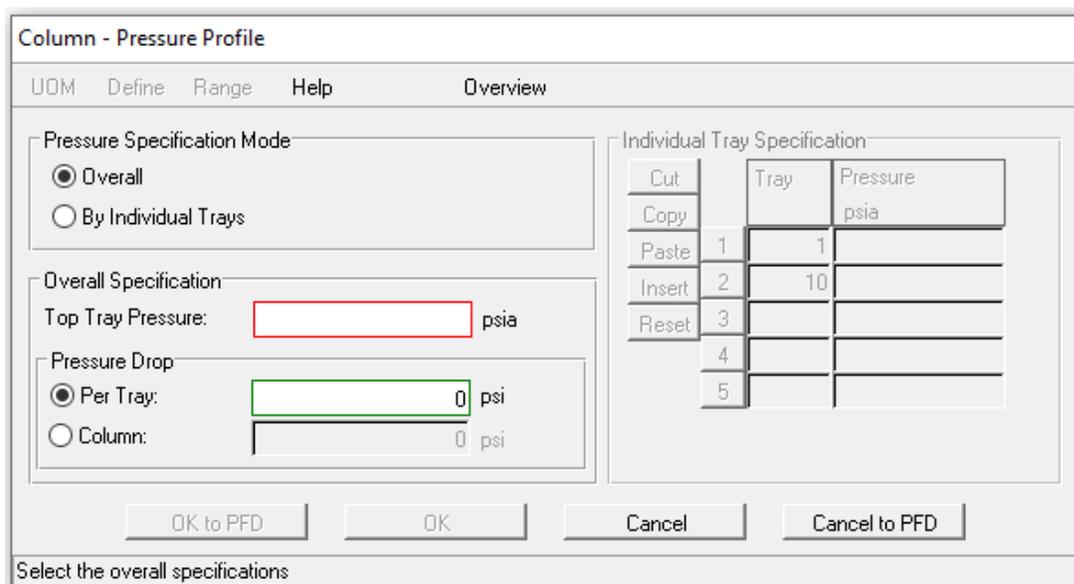


Figura 2.37 Parámetros para el perfil de presión en la columna de destilación

La caída de presión en la torre se puede realizar de forma global o por cada plato, con las opciones “Overall” o “By Individual Trays”, respectivamente.

En el apartado “Top Tray Pressure”, se debe colocar el valor de la presión del producto destilado, a la salida del condensador de la torre.

“Pressure Drop” es la caída de presión de la torre, la cual puede ser indicada por plato “Per Tray” o el total de toda la torre “Column”.

2.10.2 Alimentación y productos

El recuadro “Feeds and Products” necesita de algunos resultados que se obtienen del método corto, al seleccionar la opción el menú emergente es el siguiente:

Feed	Tray	Feed Flash
1		On Tray

Feed Flash Default Convention

Vapor and liquid to be on the feed tray.

Flash the feed adiabatically, vapor onto the tray above and liquid onto the feed tray.

Product	Type of Product	Phase	Tray	Rate	Unit
2	Overhead	Vapor	1		lb-mol/hr
3	Bottoms	Liquid	10		lb-mol/hr

Enter the feed tray number

Figura 2.38 Datos de la alimentación y los productos

La primera opción de la parte superior izquierda “Feed”, precisa el número de etapa para la o las líneas de alimentación, el cual se sabe con los resultados del método corto.

Las opciones de la parte inferior necesitan sólo un valor, el flujo estimado para el destilado “Overhead” o del producto de fondos “Bottoms”, este valor únicamente opera como estimación inicial, este valor será el resultado que arroja el método corto, o uno muy cercano. Sin embargo, al terminar el llenado de opciones, el simulador cuestiona si este flujo se deberá tomar como especificación, para lo cual se responderá en función de lo que se quiera; si lo que se busca es una composición de salida, es recomendable forzar este valor de flujo másico, ya que la torre se podría sobre especificar.

2.10.3 Rehervidor

En la opción “Reboiler” se detallarán algunos datos del rehervidor de la columna, como su diseño o incluso su temperatura de operación.

Figura 2.39 Opciones para el rehervidor de la torre

En la opción “Duty” se puede incluir el valor del calor que se intercambia en el rehervidor, el cual, en primera estimación, es el que resultó del método corto.

Aunque la mejor opción es dejar el apartado vacío, para que el método riguroso lleve a cabo el cálculo con las condiciones que serán dadas.

2.10.4 Condensador

El condensador de la torre del método riguroso, tiene las mismas opciones que con el método corto. Se debe especificar el tipo de condensador: parcial, punto de burbuja o sub-enfriamiento. Entrando en “Condenser” tiene el siguiente menú:

Column - Condenser

UOM Define Range Help Overview

Column with Condenser

Condenser Type

Partial

Bubble Temperature

Subcooled, Fixed Temperature

Subcooled, Fixed Temperature Drop

Condenser Data

Pressure: psia

Temperature Estimate: F

Fixed Temperature: F

Degrees Subcooled: 0 F

Duty: x 10⁶ BTU/hr

Subcooled Reflux Only

Fixed Temperature

Fixed Temperature Drop

OK Cancel

OK to PFD Cancel to PFD

Exit the window after saving all data

Figura 2.40 Menú del condensador del método riguroso

La única diferencia es que se puede incluir el calor que se intercambia en el condensador, en la opción “Duty” (con el dato que calculó el método corto), aunque, lo recomendable es no especificar este campo, ya que el método riguroso se encarga de procesar la energía necesaria para el condensador, en función de los datos que han sido y serán introducidos (plato de alimentación, presión de salida del destilado, relación de reflujo, etcétera).

2.10.5 Estimaciones iniciales y reflujo

Las columnas de destilación resueltas mediante un método riguroso, utilizan procedimientos iterativos de cálculo, estos inician con una estimación de los flujos, perfiles de temperatura y composiciones a lo largo de la torre. Pro/II tiene varios métodos para generar las estimaciones iniciales. Entrando en la opción “Initial Estimates” se entra en el siguiente apartado:

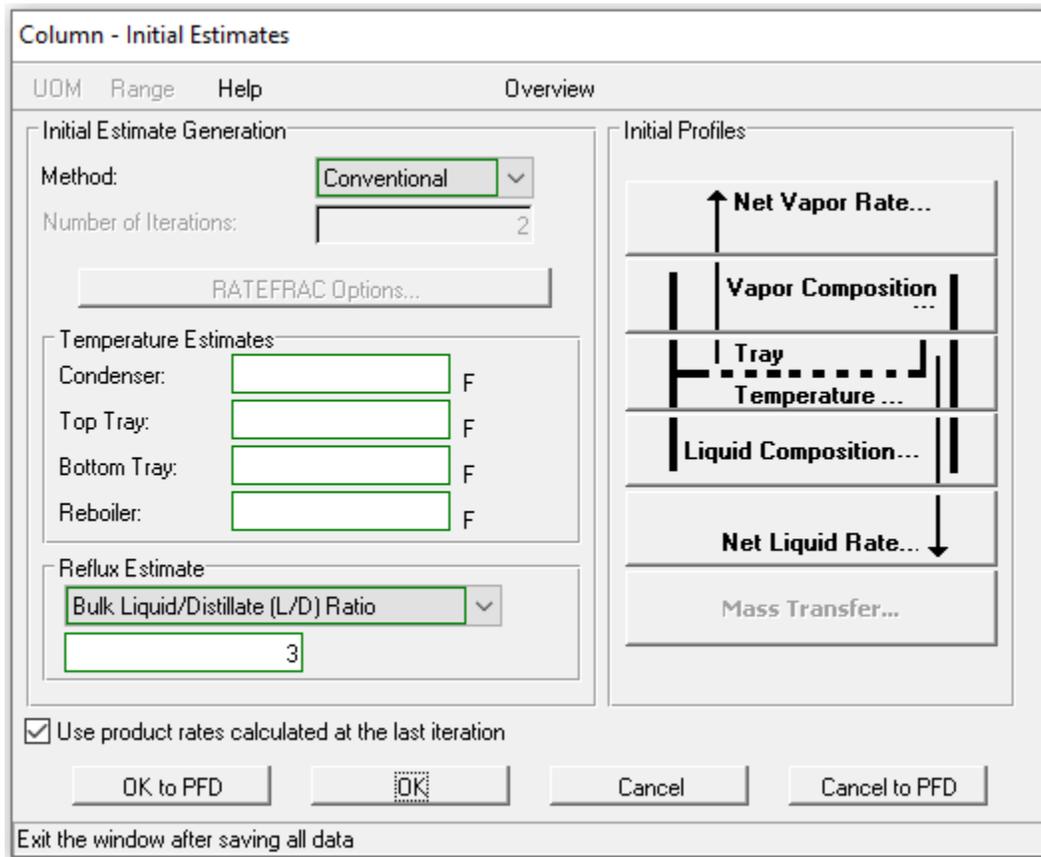


Figura 2.41 Opciones para el método de estimaciones iniciales y reflujo en la columna

En la sección “Method Estimate Generation”, se despliegan los métodos para generar las estimaciones iniciales en la columna, se debe seleccionar uno de ellos en función de la naturaleza de la mezcla del proceso. A continuación, se detallan los métodos y caso de aplicación:

Método	Explicación y aplicación
Simple	Los perfiles se determinan con un balance de materia. Las temperaturas están determinadas con la estimación de las composiciones de los productos. Es un modelo adecuado para configuraciones simples de columna, con mezclas simples de pocas especies.
Conventional	Es útil para la mayoría de los problemas de destilación. Los cálculos del método corto son usados para estimar los flujos y composiciones de los productos. Las composiciones son usadas para calcular las temperaturas. Los flujos internos se estiman con los flujos de productos y el reflujo estimado. El método funciona mejor para fraccionadores convencionales en los cuales las clásicas técnicas de Fenske dan resultados razonables.
Refinery	Diseñado para columnas de refinerías complejas, que tienen vapor en el fondo en lugar de rehervidores, como columnas de crudo y vacío. También se usa para columnas que tienen columnas laterales, circuitos de enfriamiento y agua decantada en el acumulado del domo.
Chemical	Este método debe restringirse a problemas de destilación química, altamente no ideales. Utiliza series sucesivas de flashes adiabáticos hacia arriba y abajo de la columna, para establecer las composiciones de los platos.

Tabla 2.2 Modelos de cálculo para el método riguroso de destilación

El reflujo de diseño también puede ser especificado, en la opción “Reflux Estimate” seleccionando “Bulk Liquid/Destillate (L/D) Ratio”, siendo el dato la relación del flujo que entra a la columna por el domo entre el flujo del destilado. Al incluir el valor y salir de la ventana, el simulador cuestiona si el reflujo se tomará como especificación.

2.10.6 Especificaciones de operación

En el apartado “Performance Specifications” se ingresan las características de operación de la columna. Aquí, las especificaciones pueden añadirse a una o ambas corrientes de productos (composición, flujos, temperaturas, pH, etcétera). Y también pueden ser especificada alguna variable de la torre (calor del condensador o rehervidor, reflujo, temperatura de platos, etcétera).

Se necesitan de dos especificaciones y dos variables. Lo común y lo que se tiene por defecto como variables, son las cargas térmicas del condensador y rehervidor. Y lo que se especifica por lo regular son las composiciones de los productos del fondo y destilado o el reflujo.

El menú que se presenta es equivalente al módulo “Shortcut”, en su apartado “Products”

2.11 Optimizador

El objeto “Optimizer” presente en el apartado “Utilities”, se encarga de maximizar o minimizar una función objetivo, mediante la variación de uno o más parámetros del diagrama de flujo.

Este módulo tiene que cumplir una serie de especificaciones que el usuario detalla, al seleccionar el objeto en el entorno de desarrollo se tienen las siguientes opciones:

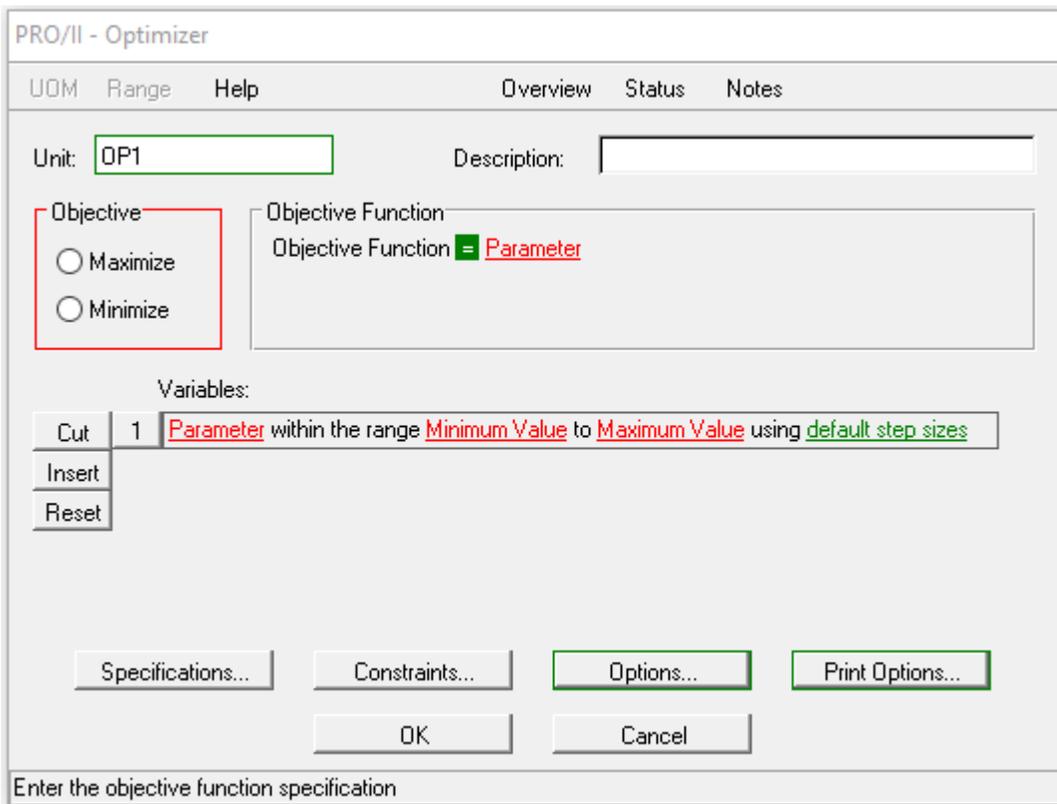


Figura 2.41 Opciones del objeto “Optimizer”

En la sección “Objective” se especifica si se quiere maximizar o minimizar la función. El apartado “Objective Funtion” requiere seleccionar el parámetro, puede ser cualquier propiedad de una línea o equipo.

“Variables” son los o el parámetro que se cambiará para que la función objetivo se maximice o minimice, se necesita incluir el rango de valores que puede adquirir dicha variable.

2.12 Puesta en marcha de la simulación y extracción de resultados

Una vez estén todos los equipos y líneas especificadas, se selecciona la opción “Run” que da inicio a los cálculos para la simulación. Si no existe un error en los parámetros introducidos y el simulador llega a la solución de todas las líneas y módulos, los objetos se sombreatán de color azul. Al no encontrar la solución para un módulo, este se sombrea de color rojo, los errores se muestran en la parte izquierda del programa, que básicamente describe el algoritmo de cálculo de inicio a fin.

Para comprobar los resultados obtenidos de cualquier módulo, se debe seleccionar y dar en la opción “View Results”. Para obtener una serie de resultados más específicos de los equipos, que incluyen también los cálculos de las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, se debe seleccionar la opción “Generate Text Report”, ubicada en pestaña “Output” de la parte superior.

Está la posibilidad de condensar las propiedades de las corrientes a través de una tabla, que se puede generar en “Options” con el apartado “Stream Property Lists”, en la cual se incluyen distintas condiciones de líneas: temperatura, presión, entropía, entalpía, flujo másico, composición, fracción de vapor o líquido, etcétera.

2.13 Simulación de destilación de una mezcla difícil de fraccionar.

Acorde a los diagramas para elección del método termodinámico en una simulación, es posible elegir más de un modelo para un sistema químico. Con esta situación, se compararán los resultados que se obtienen en una destilación de una mezcla ternaria difícil de fraccionar al usar dos métodos termodinámicos diferentes, dicha mezcla tendrá propiedades similares a la que se simulará en la desmetanización, las cuales son: mezcla apolar y presión mayor a 10 bar, los modelos termodinámicos con los que se simularán serán PR y SRK

La corriente de entrada a la torre está compuesta por tres isómeros, que tienen un punto de ebullición cercano, los cuales se detallan en la siguiente tabla:

Compuesto	Composición molecular	Temperatura de ebullición normal [°C]	Momento dipolar
2,2-dimetil butano	C ₆ H ₁₄	49.73	0
2,3-dimetil butano	C ₆ H ₁₄	57.98	0
Hexano	C ₆ H ₁₄	68.73	0

Tabla 2.3 Puntos de ebullición de isómeros

Las especificaciones de la línea se muestran a continuación:

Compuesto	m Kg- mol/hr	Fracción molar	T [°C]	p absoluta [Bar]
2,2-dimetil butano	1500	0.3	40	11
2,3-dimetil butano	1500	0.3		
Hexano	2000	0.4		

Tabla 2.4 Condiciones de la línea de entrada a la torre.

El producto destilado se especificará con 0.95 fracción mol de 2,2-dimetil butano y 0.03 en los fondos, con 5 lb/in² de pérdida de presión en la torre, un condensador parcial y un reflujo/reflujo mínimo= 1.3

La simulación en Pro/II del método corto y riguroso se muestra en la siguiente figura:

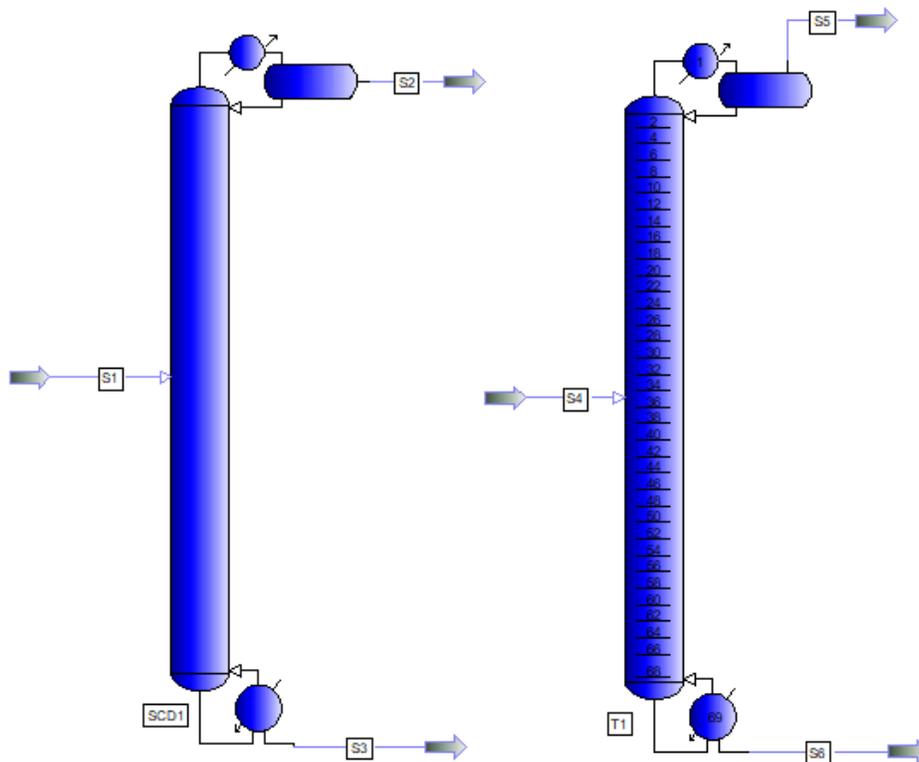


Figura 2.42 Destilación método corto y riguroso de la mezcla de isómeros

Para ambos módulos, se obtienen los resultados con los dos modelos termodinámicos seleccionados:

Método corto:

	PR	SRK	Porcentaje de diferencia
Número de etapas	89	88	1.12
Plato de alimentación	44.19	43.94	0.56
C en condensador	-2.561E+02	-2.559E+02	0.07
C en rehervidor	3.332E+02	3.337E+02	0.14

Tabla 2.5 Resultados del método corto para ambos modelos termodinámicos

Método riguroso:

	PR	SRK	Porcentaje de diferencia
C en condensador [M KJ/hr]	-263.7979	-260.9237	1.08
C en rehervidor [M KJ/hr]	338.2375	336.0911	0.63
R	20.9770	20.6395	1.60

Tabla 2.6 Resultados del método riguroso para ambos modelos

Como se observa, el porcentaje de diferencia en los resultados de la destilación, entre ambos modelos termodinámicos, son muy bajos, por lo que, para este tipo de mezclas, no repercute de manera significativa el seleccionar uno u otro. Indudablemente esto se debe a que la mezcla analizada es del tipo que se acerca más al comportamiento ideal, las desviaciones en sus propiedades respecto a la idealidad, y los modelos que las calculan, no son muy grandes.

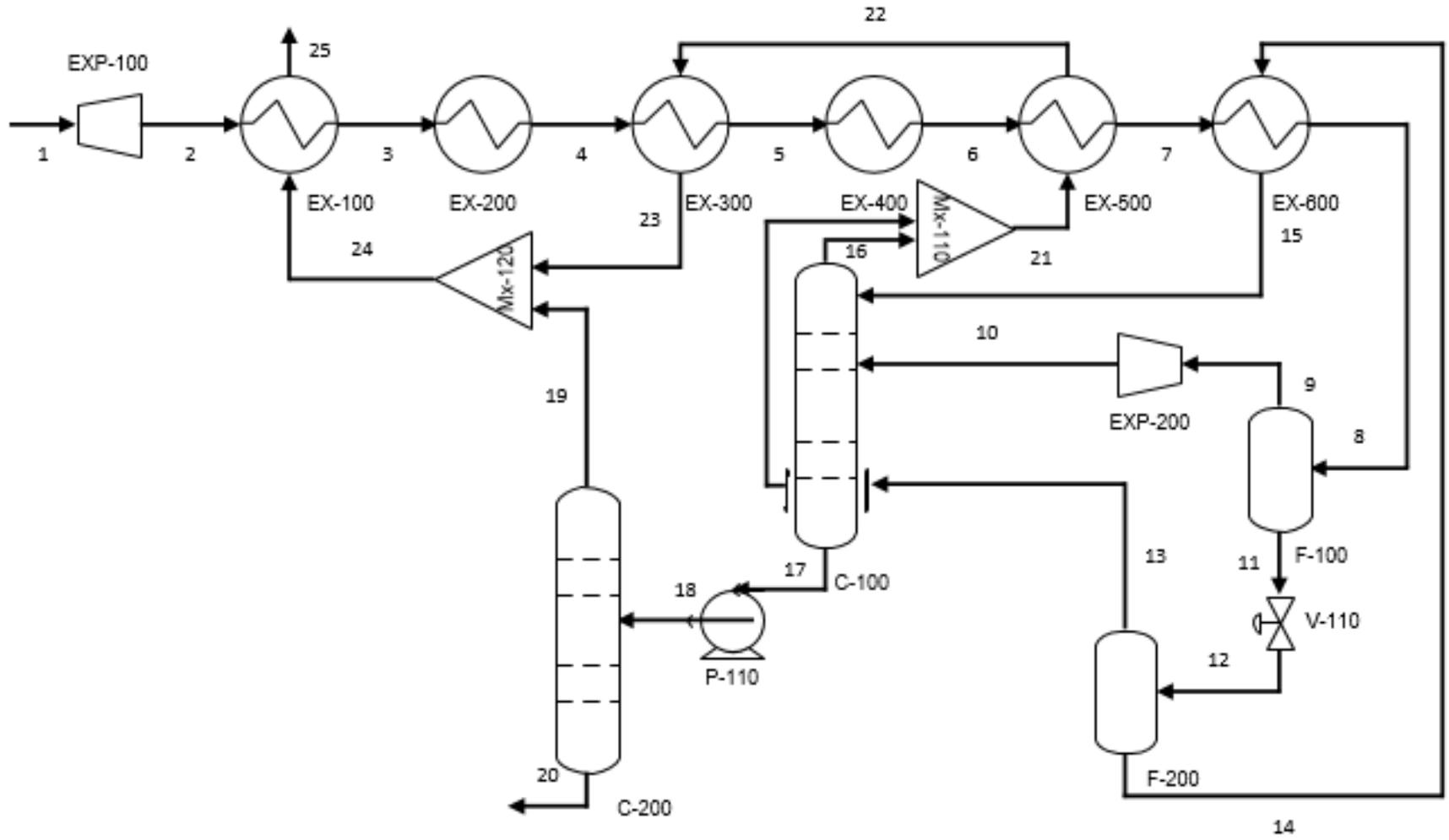
CAPÍTULO 3

SIMULACIÓN DE LA PLANTA DESMETANIZADORA CON PRO/II

El tercer capítulo, partirá de las especificaciones iniciales que se tienen de algunas líneas del diagrama de flujo de procesos, para realizar la simulación de la planta de desmetanización. Después de explicar los principios operacionales de manera filosófica, se fragmentará en tres bloques el diagrama, explicando la secuencia de simulación en cada uno, y los parámetros que se incluirán para cada equipo.

3.1 Diagrama de flujo de procesos.

El proceso criogénico que se analizará engloba las secciones 2 y 3 en el apartado “Producción de gas LP a partir del crudo” de primer capítulo. Una mezcla de hidrocarburos entra a la planta, y después de un proceso de separación, da como resultado gas LP, el diagrama de flujo completo se muestra y explica a continuación [8]:



3.2 Condiciones de entrada y características de algunas líneas en el proceso

La carga a la entrada (corriente número 1), tiene las siguientes características:

	Alimentación [Kg-mol/hr]	Fracción molar Z_i
CH₄	7620	0.8649
C₂H₆	687	0.0780
C₃H₈	300	0.0341
nC₄H₁₀	158	0.0179
nC₅H₁₂	45	0.0051
Total	8810	

Tabla 3.1 Composición de la corriente de entrada a la planta

Se tienen, además, los datos de algunas corrientes del diagrama de flujo de proceso, los cuales se deben cumplir en la simulación y servirán de punto de partida.

Corriente	T (K)	P (Bar)	Fase
1	340	75.2	Gas
2		58.6	Gas
3	290	57.9	
4	261.7	57.4	
5	250	56.8	
6	236.1	56.3	
7	221.1	55.7	
8	211.1	55.2	
9	211.1	55.2	Vapor
10		28.6	
11	211.1	55.2	Líquido
12		29.7	
13		29.7	Vapor
14		29.7	Líquido
15		29.1	

Tabla 3.2 Condiciones conocidas de líneas de proceso

3.3 Descripción filosófica del diagrama de flujo de procesos.

La carga de entrada a la planta, está representada por las condiciones de la corriente 1 del diagrama de flujo de procesos, caracterizada con presión y temperatura elevadas. El objetivo principal de la planta, es la generación de gas LP, rico en propano y butano; es necesario desmetanizar y desetanizar la mezcla de hidrocarburos.

En principio, la corriente principal es sometida a una expansión, para disminuir la alta presión y provocar un descenso en la temperatura, que dependerá de la eficiencia adiabática del proceso, misma que se fijará en 70%.

Posteriormente, la mezcla entra a un tren de intercambiadores de calor, con el fin de condensarla parcialmente, e ingresa a un separador flash, que divide las corrientes 9 y 11 de vapor y líquido, respectivamente; la corriente de vapor es sometida a una expansión que enfría y condensa parcialmente la mezcla para entrar a la torre de destilación.

En cuatro de los intercambiadores de calor, el fluido frío es una corriente de la mezcla de hidrocarburos proveniente de líneas posteriores; por lo cual, al arranque del proceso, será necesario un servicio de enfriamiento para todos los equipos de intercambio de calor de la corriente principal. Al llegar al estado estacionario, esos cuatro intercambiadores tendrán su corriente de enfriamiento de líneas secundarias de baja temperatura. Esto es un aspecto intrínseco de los procesos criogénicos, ya que su eficiencia radica particularmente en la recuperación de calor (recuperación del frío).

La corriente 11 (fase líquida de la mezcla que sale del tren de intercambiadores de calor), es separada de la fase vapor en el recipiente flash, y sometida a una caída de presión en una válvula, para una evaporación súbita parcial, cuyas fases se dividen nuevamente en un segundo separador flash.

En el segundo recipiente flash, la fase líquida resultante entra al último intercambiador de calor del tren, posteriormente a la torre de destilación, y con ello, esta tiene dos alimentaciones. La fase vapor del segundo recipiente flash, que en su mayoría debería estar constituida por los componentes más volátiles (metano y etano), se mezcla con el producto de la primera torre de destilación. Esa mezcla, resulta en la corriente 21, que entra a una parte del tren de intercambio de calor, con el fin de aprovechar su condición térmica, para enfriamiento.

Los fondos de la primera torre, con mínima concentración de metano, se bombean a la segunda torre de destilación, cuyo fin es eliminar el etano. El producto de fondos es el gas LP, el cual no debe constituirse por una cantidad importante de metano y etano.

Los productos de domo de la segunda torre, se mezclan con la corriente 23, la cual es la corriente 21 después de pasar por dos equipos de intercambio de calor, formando así la corriente 24, encargada del enfriamiento del primer intercambiador de calor.

3.4 Simulación de la planta desmetanizadora

El modelo termodinámico que se usará, tomando en cuenta el diagrama de decisiones de la figura 2.5 del capítulo 2, será Peng-Robinson.

La simulación puede realizarse con el diagrama de flujo completo desde el principio, antes de correr la simulación. También es posible ejecutarla cada que se incluya un módulo, siendo esta última forma la más conveniente en el proceso analizando, debido a la unión de líneas y retorno de líneas a equipos anteriores.

El progreso en el simulador se analizará con tres bloques, enfatizando los parámetros operacionales de los equipos presentes en cada uno.

3.5 Primer bloque de simulación

En principio, después de seleccionar el sistema de unidades, los componentes existentes en el proceso y el modelo termodinámico, se introduce la línea número uno con las condiciones dadas en la tabla 3.1. El primer bloque termina hasta la primera ramificación de la corriente de entrada, en el separador flash, finalizando con las corrientes 9 y 11.

Entre la corriente 1 y 2, hay un proceso de expansión que se simula con el módulo “Expander”, en el cual se indicará la presión de salida ya conocida (tabla 3.2), y una eficiencia adiabática de 70%.

El siguiente paso consta de la colocación del tren de intercambiadores de calor, este consta de 6 módulos “Simple HX” y termina con la corriente de salida número 8. Realizando la diferencia de presión entre la salida y entrada de cada intercambiador, se incluirá el valor esa pérdida por fricción en el apartado “Hot Side” de la configuración del módulo, en la opción “Pressure Drop”. Así mismo, la especificación térmica de la corriente de salida, se introduce en “Hot Product Temperature” de cada módulo.

El último equipo del primer bloque de simulación, es un separador flash, cuyo objetivo es la separación de fases, por ende, el modo de operación de este equipo será isentrópico, con una caída de presión despreciable, cercana a cero.

La representación del primer bloque de simulación en Pro/II se muestra a continuación:

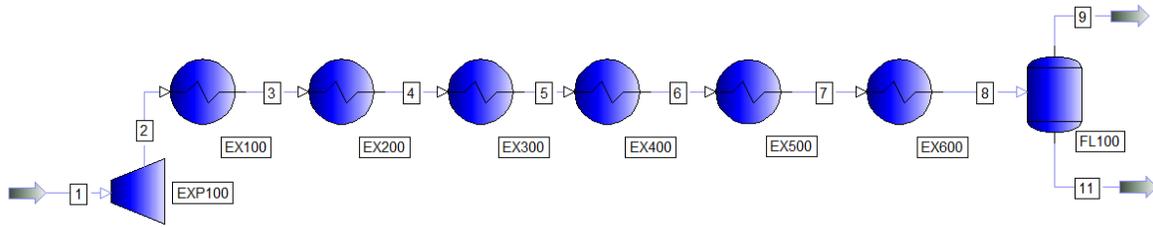


Figura 3.1 Primer bloque de simulación.

3.6 Segundo bloque de simulación

El segundo bloque de la simulación inicia con el primer separador flash, la corriente 9 de vapor saturado es sometida a una expansión, la cual se determinó con una eficiencia adiabática del 70%, proceso que induce una condensación parcial de la mezcla. La corriente 10 entra a la primera torre de destilación encargada de remover el metano.

Por otro lado, la línea 11 de líquido saturado que sale del primer separador flash, circula a través de una válvula con el propósito de generar una caída de presión considerable, evaporando parcialmente la mezcla de la línea.

La línea número 12, bifásica, es separada por el equipo F-200, otro módulo flash, creando una línea de vapor saturado que se utilizará en el siguiente bloque de simulación. La corriente número 14 (líquido saturado del segundo separador flash), será la encargada de suministrar la condición térmica para la operación del equipo EX-600, el último módulo del tren de intercambiadores de calor. La salida del lado frío del último intercambiador de calor, ingresa a la primera torre de destilación.

Para las dos líneas de alimentación de la torre será necesario conocer el plato óptimo de entrada. Con el módulo Shortcut (método corto), se simularán ambas torres de destilación de este bloque, especificando una fracción molar en el domo de 0.995 metano y 0.003 de en el fondo de la primera torre, con una caída de presión total de la columna de 5 lb/in², esto con base en las especificaciones consideradas para el diseño de la planta original, y el objetivo de las dos torres de destilación; desmetanizar y desetanizar

Los fondos de la primera torre, con una concentración mínima de metano, son bombeados a la segunda torre de destilación, con especificación de 0.995 fracción molar de etano en el domo y 0.003 en el fondo y caída de presión de 5 lb/in².

La línea del domo de la segunda torre es reutilizada para recuperación de calor (frío) en equipos anteriores, en virtud de su baja temperatura. El fondo, después de remover la mayor cantidad de metano y etano, es el producto final, gas LP.

Posteriormente, se hará la simulación del método riguroso, sin embargo, hay una consideración adicional en la primera torre de destilación; si en el módulo Shortcut, existen múltiples alimentaciones, el simulador une todas ellas en una sola línea de entrada, por lo cual no calcula el plato óptimo de alimentación de cada corriente individual, además de que sólo proporciona el valor de platos necesarios a reflujo total.

En consecuencia, se debe simular un módulo Shortcut para cada alimentación, con sus condiciones particulares. La especificación del reflujo deber ser la misma, sin embargo, la cantidad de platos necesarios usando un valor igual de reflujo en cada torre, puede o no ser el mismo. Es importante saber el plato óptimo de alimentación, el cual se usará en el método riguroso, que, en subsiguiente, se valorará con el módulo "Optimizer".

El segundo bloque de la simulación en el entorno de Pro/II se representa a continuación:

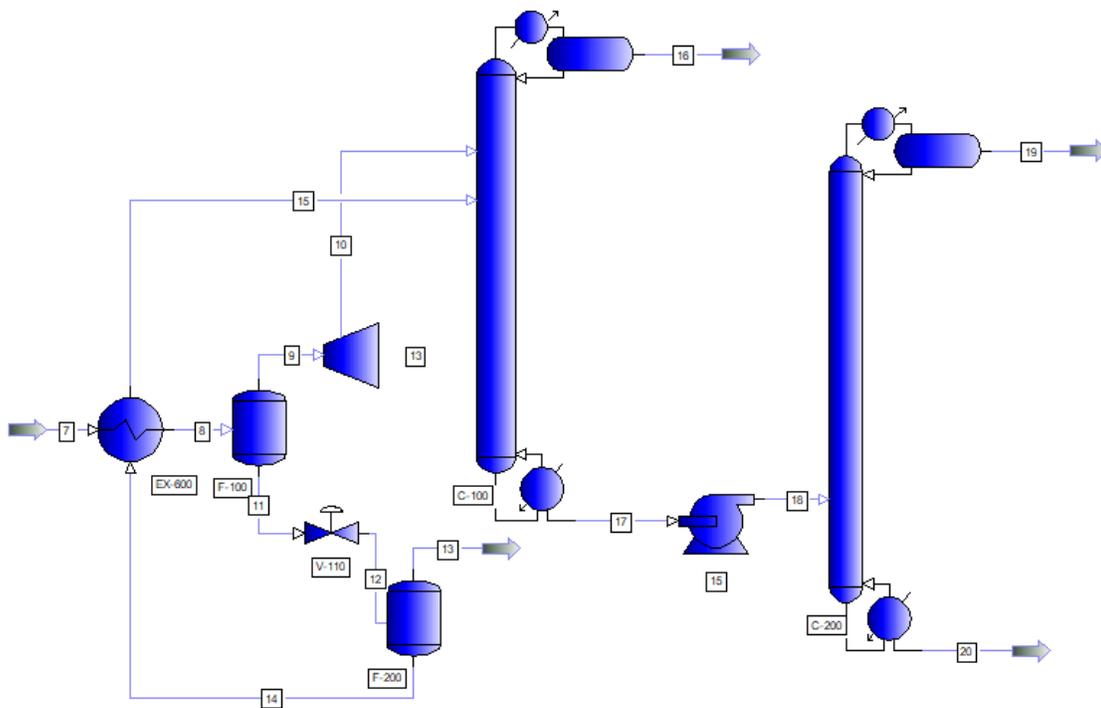


Figura 3.2 Segundo bloque de simulación.

Hasta este punto de la simulación, es posible completar los datos de la Tabla 3.1:

Corriente	T [K]	p [Bar]	Fase
1	340	75.2	Gas
2	325.1	58.6	Gas
3	290	57.9	Gas
4	261.7	57.4	Vapor + Líquido
5	250	56.8	Vapor + Líquido
6	236.1	56.3	Vapor + Líquido
7	221.1	55.7	Vapor + Líquido
8	211.1	55.2	Vapor + Líquido
9	211.1	55.2	Vapor
10	185.2	28.6	Vapor + Líquido
11	211.1	55.2	Líquido
12	190.6	29.7	Vapor + Líquido
13	190.6	29.7	Vapor
14	190.6	29.7	Líquido
15	218.8	29.1	Vapor + Líquido

Tabla 3.3 Llenado de la tabla de condiciones conocidas

3.6.1 Primera torre de destilación

Con dos líneas de alimentación en la torre desmetanizadora, se tendrán que simular dos módulos shortcut, para conocer el plato óptimo de alimentación y la cantidad de platos necesarios. Ambas torres se especificarán con fracción molar de metano 0.995 en el domo y 0.003 en el fondo con un $R/R_{min}=1.3$ con una caída de presión de 5 lb/in².

Conocidos los platos necesarios de cada torre y el plato óptimo de alimentación, se elegirá una configuración para posteriormente realizar el método riguroso.

El primer módulo Shortcut con la línea 10 de alimentación, proporcionó los siguientes resultados:

STREAM + PHASE	MOLES KG-MOL/HR	WEIGHT KG/HR	LIQUID VOL M3/HR	NORM VAPOR(1) M3/HR	SECTION	NUM TRAYS
16 V	4280.47	68970.82	229.79	95942.51	1	5.14
17 L	185.54	6258.82	15.92	4158.70		

TOTALS 4466.01 75229.63 245.71 100101.21 5.14

SPECIFICATIONS

PARAMETER TYPE	COMP. NUM	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE
STRM 16	1	MOL FRACTION	9.950E-01	9.950E-01
STRM 17	1	MOL	4.000E-03	4.000E-03

SUMMARY OF UNDERWOOD CALCULATIONS

MINIMUM REFLUX RATIO 0.22115
 FEED CONDITION Q 0.13163
 FENSKE MINIMUM TRAYS 5.13513
 OPERATING REFLUX RATIO 1.30 * R-MINIMUM

TOTAL TRAYS	FEED TRAY	R/R-MIN	M/M-MIN	REFLUX RATIO	DUTY, M*KJ/HR	
					CONDENSER	REBOILER
17	1.81	1.150	3.225	0.254	-6.150E+00	7.674E+00
15	1.68	1.225	2.889	0.271	-6.550E+00	8.074E+00
14	1.57	1.300	2.641	0.287	-6.949E+00	8.473E+00
13	1.55	1.375	2.569	0.304	-7.348E+00	8.872E+00
13	1.52	1.450	2.503	0.321	-7.747E+00	9.271E+00

El módulo Shortcut con la corriente 15 como alimentación, dio los siguientes resultados:

STREAM + PHASE		MOLES	WEIGHT	LIQUID VOL	NORM VAPOR (1)	NUM TRAYS
		KG-MOL/HR	KG/HR	M3/HR	M3/HR	
16	V	1866.36	30072.58	100.19	41832.63	4.80
17	L	944.15	38139.86	84.04	21162.13	
TOTALS		2810.51	68212.44	184.23	62994.76	4.80

SPECIFICATIONS

PARAMETER TYPE	COMP. NUM	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE
STRM 16	1	MOL FRACTION	9.950E-01	9.950E-01
STRM 17	1	MOL FRACTION	4.000E-03	3.999E-03

SUMMARY OF UNDERWOOD CALCULATIONS

MINIMUM REFLUX RATIO	0.43113
FEED CONDITION Q	0.44161
FENSKE MINIMUM TRAYS	4.80462
OPERATING REFLUX RATIO	1.30 * R-MINIMUM

TOTAL TRAYS	FEED TRAY	R/R-MIN	M/M-MIN	REFLUX RATIO	DUTY, M*KJ/HR	
					CONDENSER	REBOILER
14	5.58	1.150	2.814	0.496	-4.992E+00	1.150E+01
12	5.17	1.225	2.588	0.528	-5.316E+00	1.183E+01
12	4.98	1.300	2.479	0.560	-5.640E+00	1.215E+01
11	4.80	1.375	2.382	0.593	-5.964E+00	1.247E+01
11	4.65	1.450	2.296	0.625	-6.287E+00	1.280E+01

En la primera torre, con un R/Rmin= 1.3 son necesarias catorce etapas y el plato óptimo de alimentación es el 1.57, eligiendo así para el método riguroso la segunda etapa. Con una misma relación de reflujo, la otra torre necesita doce etapas, resultando la alimentación óptima en el plato 4.97, tomando la quinta etapa.

Con los datos anteriores, se crea una torre de platos con el módulo Distillation; el dato más alto obtenido con el método corto de cada línea de alimentación por separado es introducido (catorce etapas), especificando las composiciones de metano en el destilado y en el fondo, con una caída de presión en la torre de 5 psi y un condensador parcial.

Al tener la torre de destilación con el módulo del método riguroso, se debe comprobar que las líneas de alimentación entran en la etapa óptima, pues el número de platos de cada torre con alimentación individual, fueron distintos. La manera de realizar esto, es utilizando el objeto "Optimizer"; especificando en él una propiedad a minimizar, la cual será el calor suministrado por el reboiler de la torre, y una variable relacionada con el cambio de dicha propiedad, que será la etapa de entrada de cada alimentación.

Al realizar lo anterior con la corriente número 10, el optimizador calcula que la etapa de alimentación óptima, para minimizar el calor del reboiler, es la tercera:

```
** BEST OBJECTIVE FUNCTION = 1.88102E+01 AT CYCLE NUMBER 2
```

```
VARY  ----- VARIABLE -----
INDEX  INITIAL VALUE  OPTIMUM VALUE
-----
      1   3.62610E+00   3.45536E+00
```

De la misma manera, para la línea 15, el optimizador calcula la etapa número 5.96 como la óptima, siendo la sexta etapa la más cercana a este número.

```
Optimizer 'OP1'
```

```
** BEST OBJECTIVE FUNCTION = 1.77354E+01 AT CYCLE NUMBER 1
```

```
VARY  ----- VARIABLE -----
INDEX  INITIAL VALUE  OPTIMUM VALUE
-----
      1   5.96771E+00   5.96771E+00
```

Al comparar el calor necesario en el reboiler antes y después de cambiar los platos de alimentación, se tiene lo siguiente:

	C [M KJ/hr] Línea-10 plato 2 Línea-15 plato 5	C [M KJ/hr] Línea-10 plato 3 Línea-15 plato 6	Porcentaje de disminución
Condensador	-9.3965	-8.8303	6.02
Reboiler	18.165	17.6023	3.09

Tabla 3.4 Requerimientos térmicos de la primera torre de destilación al variar el plato de alimentación de la línea 15

Eligiendo el plato óptimo de alimentación para ambas líneas, la demanda energética de la torre disminuye un porcentaje, tal como muestra la tabla 3.4.

3.6.2 Segunda torre de destilación

El método corto de la segunda torre de destilación, con un reflujo de 1.3 veces mayor al mínimo, especificando fracción mol de 0.99 de etano en el domo y 0.005 en el fondo y 5 psi de caída de presión, resulta con 30 etapas y el plato 14.08 como el óptimo para la alimentación.

STREAM + PHASE	MOLES KG-MOL/HR	WEIGHT KG/HR	LIQUID VOL M3/HR	NORM VAPOR(1)		NUM TRAYS
				M3/HR	SECTION	
19 L	629.87	18933.37	53.25	14921.96	1	14.97
20 L	499.37	25454.31	46.68	11830.41		
TOTALS	1129.25	44387.68	99.93	26752.37		14.97

SPECIFICATIONS

PARAMETER TYPE	COMP. NUM	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE
STRM 19	2	MOL FRACTION	9.900E-01	9.900E-01
STRM 20	2	MOL FRACTION	5.000E-03	5.002E-03

SUMMARY OF UNDERWOOD CALCULATIONS

MINIMUM REFLUX RATIO	1.81302
FEED CONDITION Q	1.02388
FENSKE MINIMUM TRAYS	14.96685
OPERATING REFLUX RATIO	1.30 * R-MINIMUM

TOTAL TRAYS	FEED TRAY	R/R-MIN	M/M-MIN	REFLUX RATIO	DUTY, M*KJ/HR	
					CONDENSER	REBOILER
34	16.14	1.150	2.281	2.085	-1.380E+01	1.760E+01
32	15.00	1.225	2.115	2.221	-1.441E+01	1.821E+01
30	14.08	1.300	1.982	2.357	-1.502E+01	1.882E+01
28	13.33	1.375	1.872	2.493	-1.562E+01	1.943E+01
27	12.71	1.450	1.781	2.629	-1.623E+01	2.003E+01

El modelado la torre de platos con el método riguroso, será especificando caída de presión en la torre de 5 psi y fracciones mol de los productos iguales al método corto, resultando lo siguiente:

	C M KJ/hr
Condensador	-10.6759
Reboiler	18.8058

Tabla 3.5 Requerimientos térmicos de la segunda torre de destilación.

3.7 Tercer bloque de simulación

El último bloque de la simulación principalmente se centra en la recuperación de calor, mediante el aprovechamiento de las condiciones térmicas de ciertas líneas para el enfriamiento en algunos equipos, además del dimensionamiento de las tuberías según el criterio de caída de presión recomendada para líneas de gas.

El producto destilado de la primera columna, se mezcla con el vapor que sale del segundo separador flash, la corriente resultante entra al quinto intercambiador de calor del tren, para posteriormente entrar al cuarto, y esta corriente se mezcla con el producto destilado de la segunda columna para entrar al primer intercambiador de calor. Para todas las corrientes, se considera una caída de presión de 5 psi entre la entrada y salida de cada intercambiador de calor.

3.7.1 Dimensionamiento de tuberías

Las tuberías se dimensionarán con el criterio de caída de presión recomendada y usando la rugosidad absoluta del acero al carbono de 0.04572mm. En tuberías de transporte de gas, se aconseja tener una caída de presión máxima de 0.5 lb/in² por cada cien pies de tubería ($\Delta P_{100} = 0.5$ psi) [9]. Se tomará ese valor con un rango de 10% inferior y superior.

Es necesario considerar si en la tubería fluye una mezcla bifásica o monofásica. Además, se supondrán todas las líneas como horizontales, pues en líneas verticales debe especificarse la altura y si es ascendente o descendente. En líneas de líquido se usará el modelo Beggs-Brill-Moody, para gas Dukler-Eaton-Flanigan y para sistemas bifásicos Olimens.

Considerando la misma caída de presión recomendada en cada línea, al revisar los resultados de cada módulo “pipe”, se obtendrán los diámetros internos que cumplen con dicha especificación:

El diagrama de flujo del proceso completo en el entorno de Pro/II, se muestra a continuación:

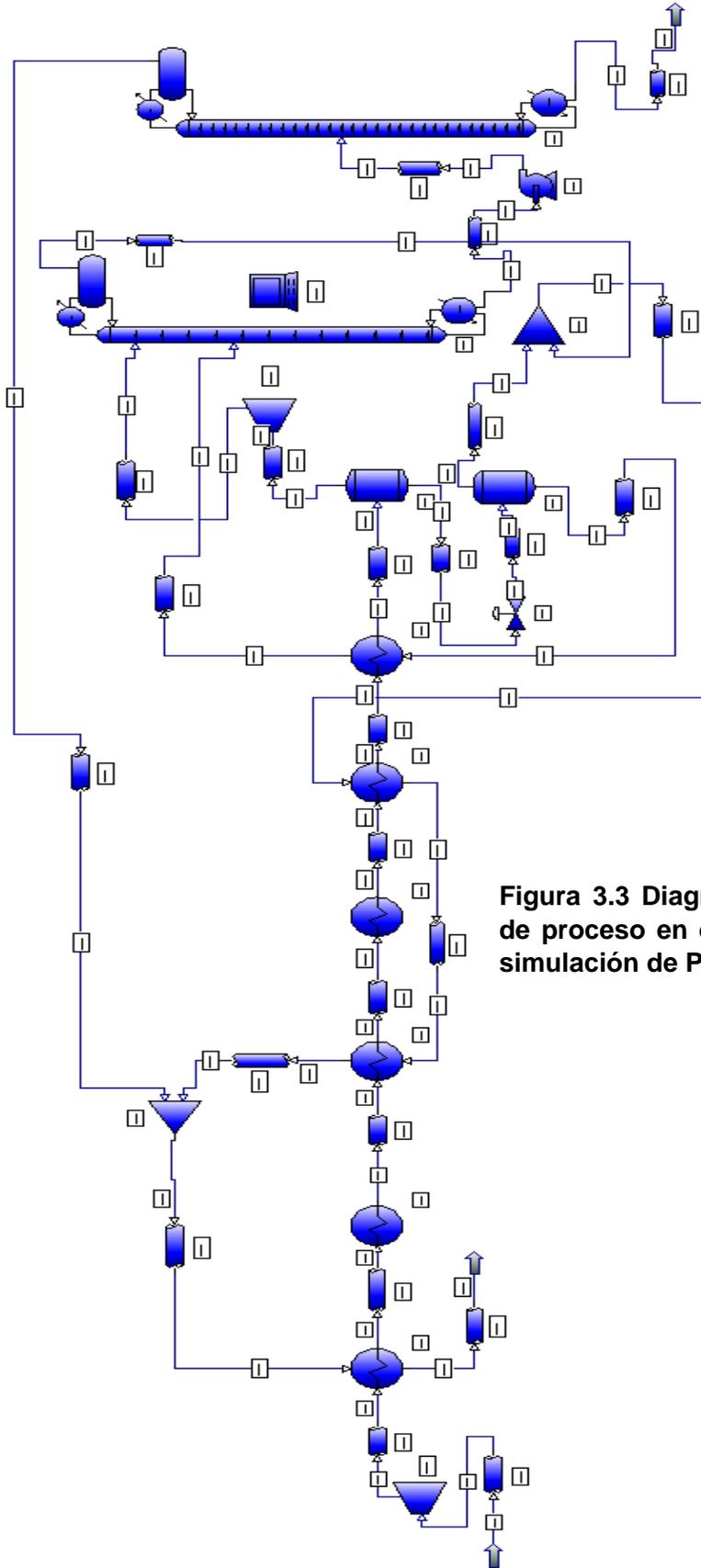


Figura 3.3 Diagrama de flujo de proceso en el entorno de simulación de Pro/II.

CAPITULO 4

RESULTADOS Y ANÁLISIS

En el último capítulo se presentan los resultados y análisis de la simulación, extrayendo las especificaciones operacionales de líneas y equipos.

Generando el reporte completo de la simulación, se extraen los resultados detallados de las corrientes y equipos:

Línea	T [K]	p [Bar]	m kg-mol/hr	Fracción mol de vapor	Fracción mol C ₁	Fracción mol C ₂	Fracción mol C ₃	Fracción mol nC ₄	Fracción mol nC ₅
1	340	75.2	8810	1	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
2	325.1	58.6	8810	1	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
3	290	57.8	8810	1	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
4	261.7	57.3	8810	0.9754	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
5	250	56.7	8810	0.9426	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
6	236.1	56.2	8810	0.8864	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
7	221.1	55.7	8810	0.7644	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
8	211.1	55.1	8810	0.5073	0.8649	0.078	0.0341	0.0179	0.0051
9	211.1	55.1	4471.3	1	0.9537	0.0373	0.0073	0.0015	0.00018
10	185.2	28.6	4471.3	0.8725	0.9537	0.0373	0.0073	0.0015	0.00018
11	211.1	55.1	4338.6	0	0.7734	0.1199	0.0617	0.0348	0.0101
12	190.6	29.7	4338.6	0.3525	0.7734	0.1199	0.0617	0.0348	0.0101
13	190.6	29.6	1530.9	1	0.9781	0.0200	0.0018	0.0002	9.13E-6
14	190.6	29.6	2807.6	0	0.6618	0.1744	0.0945	0.0537	0.0157
15	218.8	29.1	2807.6	0.5606	0.6618	0.1744	0.0945	0.0537	0.0157
16	176.9	28	6149.7	1	0.995	0.0050	4.64E-5	3.2E-07	1.89E-9
17	315.9	32.1	1129.3	0	0.003	0.5544	0.2634	0.1394	0.0398
18	316.1	33.1	1129.3	0	0.003	0.5544	0.2634	0.1394	0.0398
19	285.4	32	629.9	1	0.0054	0.99	0.0046	6.7E-8	9.1E-13
20	378.8	32.3	499.3	0	6.8E-11	0.005	0.5898	0.3152	0.0899
21	179.2	27.9	7680.6	0.9986	0.9916	0.0079	0.00038	3.1E-5	1.8E-6
22	214.6	27.9	7680.6	1	0.9916	0.0079	0.00038	3.1E-5	1.8E-6
23	239.2	27.8	7680.6	1	0.9916	0.0079	0.00038	3.1E-5	1.8E-6
24	241.9	27.8	8310.6	1	0.9169	0.0824	0.00071	2.9E-5	1.68E-6
25	286.3	27.8	8310.6	1	0.9169	0.0824	0.00071	2.9E-5	1.68E-6

Tabla 4.1 Especificaciones de todas las corrientes del proceso.

El producto final, la corriente 20, debe tener una muy pequeña parte de metano y etano, que se destilaron en la primera y segunda torre, respectivamente; el compuesto más ligero está presente como trazas, mientras que el etano tiene presencia con 0.5% en mol. Las especificaciones adicionales se presentan adelante:

Producto final - Gas LP					
	C ₁	C ₂	C ₃	nC ₄	nC ₅
Kg-mol/hr	3.39E-08	2.496	294.512	157.453	44.916
Porcentaje molar	6.74E-09	0.5	58.975	31.529	8.994

Tabla 4.2 Porcentaje de hidrocarburos en la corriente final de gas LP

4.2 Diámetros internos para todas las tuberías.

El dimensionamiento de todas las líneas se resume en la tabla:

Línea	Fase	Diámetro interno (mm)	ΔP_{100} [lb/in ²]
1	Vapor	303.22	0.467
2	Vapor	303.22	0.522
3	Vapor	295.30	0.507
4	Líquido + Vapor	311.15	0.522
5	Líquido + Vapor	311.15	0.478
6	Líquido + Vapor	300.02	0.512
7	Líquido + Vapor	284.17	0.518
8	Líquido + Vapor	266.70	0.469
9	Vapor	173.05	0.493
10	Líquido + Vapor	242.87	0.511
11	Líquido	173.05	0.513
12	Líquido + Vapor	222.25	0.504
13	Vapor	146.32	0.533
14	Líquido	146.32	0.534
15	Líquido + Vapor	215.90	0.524
16	Vapor	247.65	0.500
17	Líquido	131.74	0.542
18	Líquido	131.74	0.538
19	Vapor	122.25	0.501
20	Líquido	109.55	0.471
21	Vapor	288.89	0.557
22	Vapor	295.30	0.505
23	Vapor	303.22	0.531
24	Vapor	317.50	0.517
25	Vapor	333.34	0.524

Tabla 4.3 Diámetros internos de líneas con restricción $\Delta P_{100} = 0.5$ psi

Al ser mayor la cantidad de líquido que fluye en la tubería, el diámetro interno aumenta en consecuencia a la caída de presión por fricción de la fase líquida presente. Además, a lo largo de la tubería hay una vaporización aparente, que disminuye conforme decrece la caída de presión.

4.3 Intercambiadores de calor

Cuatro de los seis módulos tienen ambas corrientes de intercambio de calor, el fluido caliente y el fluido frío, por esa condición, al llegar al estado estacionario, únicamente dos equipos necesitarán de un servicio de enfriamiento. El calor transferido en cada intercambiador se muestra en la tabla anexa:

Número de intercambiador de calor	Equipo	C [M KJ/hr]
1	Ex-100	15.133
2	Ex-200	15.105
3	Ex-300	7.803
4	Ex-400	10.177
5	Ex-500	13.460
6	Ex-600	13.751

Tabla 4.4 Requerimiento energético de los equipos del tren de intercambio de calor

En el arranque del proceso, se requerirá un servicio de enfriamiento para todos los intercambiadores de calor. Alcanzando un primer estado estacionario, el servicio de enfriamiento en los intercambiadores 1,3,5 y 6 se suspende, utilizando en su lugar las corrientes resultantes del proceso con baja temperatura, que se interconectan a dichos equipos.

4.4 Torres de destilación

La primera torre de destilación tiene las siguientes características:

Columna de destilación C-100	
Etapas	14
Plato de alimentación (línea 15)	2
Plato de alimentación (línea 10)	6
C_r [M*KJ/hr]	17.6023
C_c [M*KJ/hr]	-8.8303
R [L/L]	0.2432

Tabla 4.5 Especificaciones de torre desmetanizadora

Con respecto a la segunda torre de destilación, la primera columna, tiene una cantidad de etapas bastante inferior, esto se debe a que ambas corrientes de alimentación entran a la primera torre parcialmente vaporizadas, y además a la naturaleza de la mezcla; los componentes clave ligero y pesado tienen una mayor volatilidad relativa que en la segunda torre de destilación.

Esto puede comprobarse visualmente con el diagrama XY para los componentes clave de la primera y segunda torre:

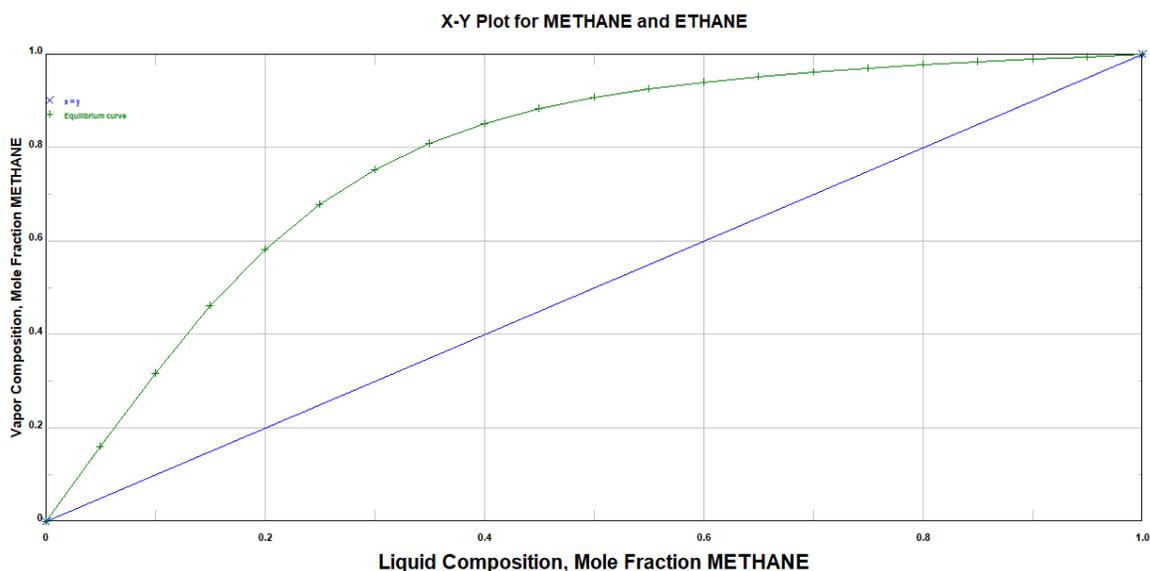


Figura 4.1 Diagrama de equilibrio Metano-Etano (primera torre)

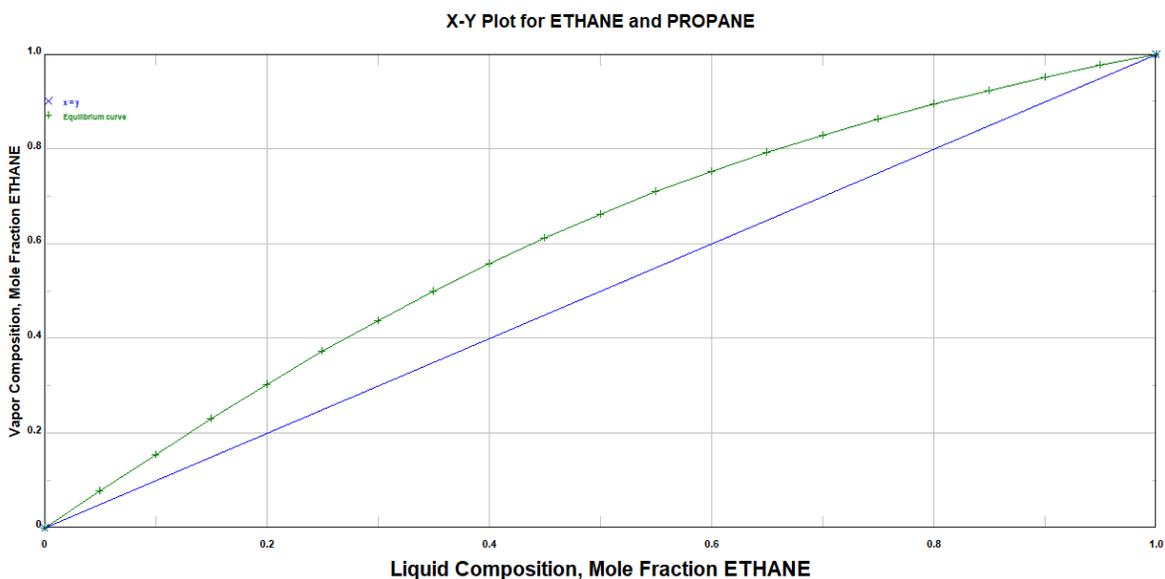


Figura 4.2 Diagrama de equilibrio Etano-Propano (segunda torre)

De los diagramas anteriores, a mayor distancia entre la línea de 45° y la línea de equilibrio, será más grande la diferencia entre las composiciones de vapor y de líquido del componente analizado en la mezcla, en consecuencia, la separación se realiza con mayor facilidad. Así pues, es evidente que la separación metano-etano es menos complicada que etano-propano, por ello resultan menos etapas en la primera torre.

La segunda torre de destilación tiene las siguientes especificaciones:

Columna de destilación C-200	
Etapas	30
Plato de alimentación	14
C_r [M*KJ/hr]	18.8058
C_c [M*KJ/hr]	-10.6759
R [L/L]	2.3

El perfil de temperaturas a lo largo de los platos de ambas torres, se tiene a continuación:

Torre C-100	
Etapas	T [K]
1 (condensador)	176.9
2	180.9
3	183.3
4	188.9
5	198.9
6	213.4
7	221.0
8	237.5
9	260.1
10	278.6
11	289.5
12	296.1
13	302.8
14 (rehervidor)	315.9

Tabla 4.6 Especificaciones de torre desmetanizadora

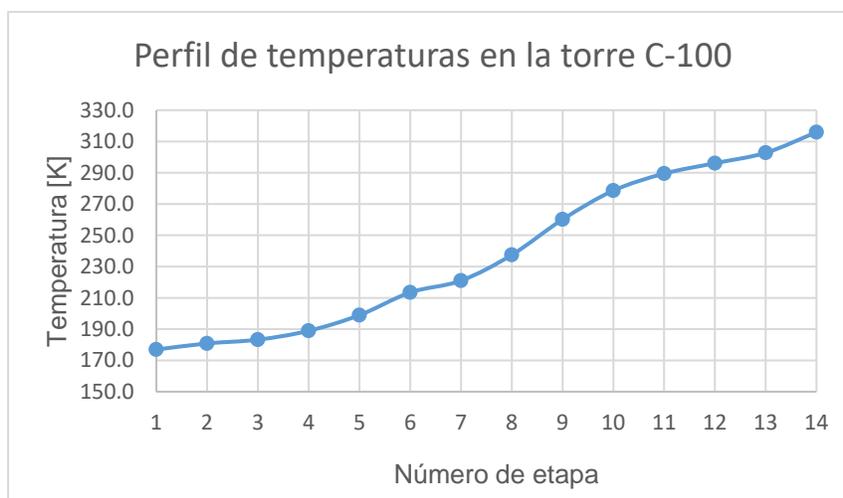


Figura 4.3 Perfil de temperatura a lo largo de las etapas de la primera torre de destilación

Con el perfil de temperaturas, se puede determinar la condición térmica necesaria del fluido de enfriamiento para el condensador y el de calentamiento para el rehervidor. En el condensador de la primera torre, la mezcla debe alcanzar la temperatura de -96.25°C y en su rehervidor de 41.85°C . En la segunda torre en el condensador se necesita una temperatura de 11.85°C y en el rehervidor de 104.85°C .

Torre C-200			
Etapa	T [K]	Etapa	T [K]
1 (condensador)	285.4	16	325.0
2	286.0	17	330.2
3	286.7	18	335.9
4	287.7	19	341.4
5	289.1	20	346.3
6	291.0	21	350.4
7	293.4	22	353.8
8	296.3	23	356.4
9	299.3	24	358.6
10	302.4	25	360.5
11	305.3	26	362.4
12	308.3	27	364.6
13	311.8	28	367.6
14	316.8	29	372.0
15	320.4	30 (rehervidor)	378.8

Tabla 4.7 Perfil de temperatura en platos de la primera torre de destilación

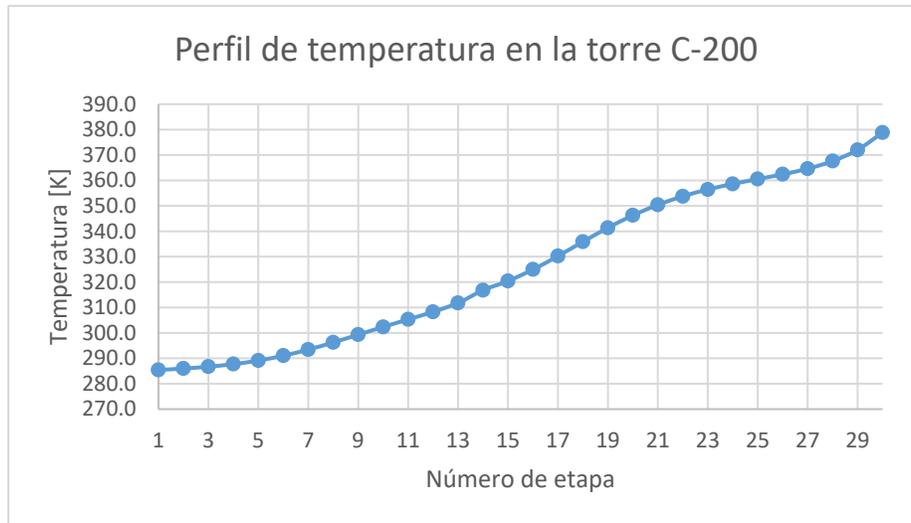


Figura 4.4 Perfil de temperatura a lo largo de las etapas de la segunda torre de destilación

4.5 Bomba

La bomba tiene un particular efecto en el proceso, determina en gran medida la operación de la segunda torre de destilación; mientras mayor sea la presión en la línea de descarga de la bomba, mayor número de etapas tendrá la torre y mayores serán sus requerimientos energéticos del condensador y rehervidor.

Por el contrario, si la línea de alimentación se vaporizara parcialmente, el número de etapas y el calor transferido en el rehervidor se reducirían, manteniendo constante el parámetro Reflujo/Reflujo-mínimo. Sin embargo, en este escenario, el calor removido en el condensador, aumentaría.

Con lo anterior, es necesario hacer una evaluación económica al considerar la operación de la bomba, comparar el precio de la torre con las etapas necesarias, el calor en el rehervidor y condensador, contra los costos teniendo una alimentación vaporizada parcialmente, reduciendo así el coste estructural de la torre y la operación del rehervidor, pero aumentando el del condensador, al necesitar un mayor flujo del fluido frío.

Equipo P-110	
Porcentaje de eficiencia	70
Aumento de presión [Bar]	1
Potencia [Hp]	5.92
Cabeza [m]	25.7

Tabla 4.8 Especificaciones de la bomba P-110 para alimentación de segunda torre de destilación.

CONCLUSIONES GENERALES

Las ventajas de trabajar en Pro/II son numerosas, al simular la planta criogénica, se pueden incluir bastantes especificaciones en los módulos, que acercan más los equipos y proceso global a su comportamiento real.

Por otro lado, las desventajas también están presentes; el diseño de los intercambiadores de calor no puede realizarse mediante el programa, únicamente se simula el intercambio térmico o también un intercambiador con especificaciones definidas.

En la caída de presión de las tuberías, no es práctico encontrar el diámetro interno óptimo para que se cumpla alguna restricción de presión, ya que éste se debe introducir manualmente o conforme a la biblioteca incluida de diámetros estándar; el programa calcula la caída de presión dada la longitud, elevación y rugosidad de la línea, o con la opción de cálculo de diámetro, especificando una caída de presión máxima; sin embargo, el simulador calcula el diámetro para el cual se cumple la condición, pero normalmente no es el diámetro más pequeño con el que se podría, elevando así el costo de instalación al usar una tubería más grande de lo necesario.

Con dicha limitación existente en el apartado de las tuberías, sería conveniente la utilización de otro simulador más especializado en los cálculos; o alternativamente, saber la correlación aplicable en cada segmento de tubería para formular un algoritmo especializado, teniendo presentes los diámetros disponibles.

Como se vio en la simulación de la destilación de isómeros en el capítulo 2, para el tipo de sistemas no polares a altas presiones, los modelos más utilizados, SRK y PR, no difieren en gran porcentaje sus resultados, por lo que utilizar uno u otro es correcto. Pero, el comportamiento que pudiera tener un sistema polar multicomponente, a presiones altas y temperaturas bajas, podría generar desviaciones importantes entre cada modelo termodinámico que aplique en él, pues este tipo de mezclas son las más difíciles de simular.

Pro/II es una herramienta muy eficaz en la simulación de una gran variedad de procesos en estado estacionario, para su correcto uso es conveniente considerar algunas reglas heurísticas y recomendaciones para la clase de proceso que se simule. Por ejemplo, para una torre desetanizadora con un intervalo de presión operacional entre 375 y 450 psig (26.8 a 32 bar), el número de etapas se recomienda de 25 a 35 [10], que coincide con el número de etapas calculadas.

Así mismo, se deben respetar parámetros como caídas de presión recomendadas en equipos, y hacer consideraciones adicionales, como en el caso específico del proceso, las tuberías operan a temperaturas criogénicas, para lo cual se necesita un óptimo aislamiento y un material resistente al trabajo en frío.

REFERENCIAS

- [1] V. Martínez, P. Alonso, (2000). Simulación de procesos. En Simulación de procesos en ingeniería química (33-34). México: Plaza y Valdés Editores.
- [2] Gas Processors Suppliers Association, (2004). Engineering data book. (1-4). Tulsa, Oklahoma.
- [3] Alba Mendoza, W, Córdova Santibáñez D, (2007). Aprovechamiento del gas natural amargo proveniente de pozos marítimos (Licenciatura). IPN, México D.F. Recuperado de:
<https://tesis.ipn.mx/jspui/bitstream/123456789/8063/2/ALBA%20MENDOZA.pdf>
- [4] V. Martínez, P. Alonso, (2000). Opciones termodinámicas. En Simulación de procesos en ingeniería química (81). México: Plaza y Valdés Editores.
- [5] Eric C. Carlson. (octubre 1996). Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. Chemical engineering progress, succeeding at simulation, 36-38. 7 agosto 2020, de <https://pdfs.semanticscholar.org/2fd4/2d66fb3a658a01d7bcd4c4c025a72c6f5e88.pdf> Base de datos.
- [6] Pro/II User guide
- [7] J.M. Smith H. C. Van Ness. (1997). Introducción a la termodinámica en ingeniería química. México, D.F.: McGRAW-HILL.
- [8] E. Basúa. Notas del Curso, Equilibrio Físico. Facultad de Química, UNAM, 1999.
- [9] PDVSA. (1994). Cálculo hidráulico de tuberías. 03-julio-2020, Sitio web: https://www.academia.edu/7283051/VOLUMEN_13_III_C%C3%81LCULO_HIDR%C3%81ULICO_DE_TUBERIAS_Emisi%C3%B3n_Original_MANUAL_DE_INGENIERIA_DE_DISE%C3%91O
- [10] Gas Processors Suppliers Association, (2004). Engineering data book. (19-15). Tulsa, Oklahoma.