

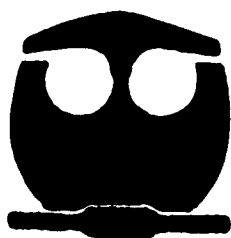
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

118
Res
MEXICO

**ANALISIS DE LAS SECCIONES DE SINTESIS Y
REFRIGERACION DE UNA PLANTA DE AMONIACO.**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERA QUIMICA
P R E S E N T A :
GRISEL RAMIREZ MANZANARES



MEXICO, D.F.

1995

FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

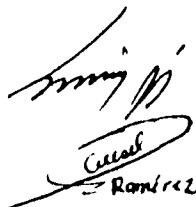
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición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

JURADO ASIGNADO

PRESIDENTE: PROF. ENRIQUE BAZÚA RUEDA
VOCAL: PROF. MANUEL VÁZQUEZ ISLAS
SECRETARIO: PROF. REYNALDO SANDOVAL GONZÁLEZ
1^{ER} SUPLENTE: PROF. SERGIO TREJO MARTÍNEZ
2^{DO} SUPLENTE: PROF. CELESTINO MONTIEL MALDONADO

Lugar donde se desarrolló el tema: Laboratorio de Simulación de Procesos, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, UNAM.

Asesor del tema: DR. ENRIQUE BAZÚA RUEDA



Sustentante: GRISEL RAMÍREZ MANZANARES



DEDICATORIA

A MIS PADRES, POR SU APOYO Y SU CARIÑO. ESTE PEQUEÑO LOGRO ES SUYO.

A MIS HERMANOS Y HERMANAS, CON QUIENES HE CONTADO SIEMPRE, Y EN ESPECIAL AL ING. OMAR RAMÍREZ, CUYA COLABORACIÓN EN ESTE TRABAJO HA SIDO MUY VALIOSA.

AL SR. DR. ENRIQUE BAZÚA RUEDA, A QUIEN DEBO ADEMÁS AGRADECER SU CONFIANZA Y DEDICACIÓN A LO LARGO DEL DESARROLLO DE ESTE TRABAJO, ASÍ COMO SU AMISTAD Y SUS CONSEJOS. ¡GRACIAS MIL!

AGRADECIMIENTOS

Al Ing. Celestino Montiel Maldonado, por su valiosa colaboración y disposición, que hicieron posible la realización de gran parte de esta tesis.

A la Profesora Mercedes Llano, en quien he encontrado una gran amiga.

A Cristi y a Maria Elena, que me ha brindado siempre su ayuda.

A mis amigos y compañeros, que me han alentado para seguir adelante, y con quienes he compartido tantos momentos. ¡Va por todos ustedes!

De forma especial quiero agradecer a Fernando Barragán y a Alejandro Guzmán, quienes permitieron el uso de su programa EQFASES2, con el cual se realizaron cálculos de equilibrio contenidos en esta tesis.

ÍNDICE

	página
CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO II ANTECEDENTES	5
1) <i>Sobre la obtención de amoníaco y sus usos</i>	6
2) <i>Situación actual de la producción de amoníaco en México</i>	7
3) <i>Descripción del proceso de obtención de amoníaco empleado en la planta bajo estudio (Proceso Kellogg)</i>	9
4) <i>Descripción detallada de los Circuitos de Síntesis y Compresión de amoníaco</i>	13
5) <i>Simulador empleado para obtener los datos de las corrientes de la planta y los equipos de proceso</i>	19
CAPÍTULO III SIMULACIÓN DEL PROCESO Y SUS RESULTADOS	23
1) <i>Condiciones específicas de la simulación de las secciones de la planta</i>	
1.1) <i>Ecuaciones, modelos y parámetros empleados para representar el comportamiento de la planta</i>	24
1.2) <i>Comparación de los datos de diseño vs. los resultados obtenidos con ayuda del simulador de procesos</i>	31
2) <i>Trabajo perdido</i>	34
2.1) <i>Breve introducción sobre el concepto de trabajo perdido y sus fundamentos</i>	34
2.2) <i>Ejemplo de cálculo de trabajo perdido para algunos de los sistemas que constituyen las secciones</i>	37
2.3) <i>Identificación de las zonas que presentan la mayor cantidad de trabajo perdido y análisis de las causas</i>	44
CAPÍTULO IV CASOS DE ESTUDIO	48
<i>Introducción a los Casos de Estudio de las variables de operación de las secciones de la planta</i>	49
<i>Caso A. Análisis del compresor de gas de síntesis</i>	50
<i>Caso B. Análisis de la presión en el Circuito de Síntesis</i>	54
<i>Caso C. Análisis de la composición de metano en el Circuito de Síntesis</i>	57
<i>Caso D. Análisis de la conversión del Reactor</i>	59
<i>Caso E. Análisis de la purga del Circuito de Síntesis</i>	61
<i>Caso F. Análisis de la alimentación de amoníaco líquido al Circuito de Refrigeración</i>	63
<i>Caso G. Análisis de la cantidad de amoníaco líquido presente en el Circuito de Refrigeración</i>	67
<i>Caso H. Análisis de las temperaturas de condensación de amoníaco en el Circuito de Síntesis</i>	72

ÍNDICE (continuación)

	página
<i>Caso I. Análisis de las presiones de equilibrio del Circuito de Refrigeración de amoníaco</i>	78
<i>Caso J. Análisis del efecto combinado de las temperaturas de condensación de amoníaco en el Circuito de Síntesis y las presiones de equilibrio en el Circuito de Refrigeración.</i>	81
<i>Caso K. Análisis de la alimentación de la "carga fresca" directamente al Convertidor de síntesis de amoníaco</i>	89
<i>Caso L. Análisis de la introducción de una turbina para recuperar trabajo, en la expansión de los gases purgados</i>	92
CAPÍTULO V DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS DE LOS CASOS DE ESTUDIO	94
CAPÍTULO VI CONCLUSIONES	100
BIBLIOGRAFÍA	103
ANEXO	106

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN

I INTRODUCCIÓN

Los altos costos de energéticos (como el carbón, petróleo, gas natural), así como su escasez en los tiempos actuales, han conducido a desarrollar tecnologías que hagan un uso *eficiente* de estos recursos. Las tecnologías que emplean la energía de manera racional han surgido a través del análisis de los procesos, lo que ha permitido detectar la(s) parte(s) del proceso donde no se aprovechan los recursos adecuadamente, y con esto establecer cambios en los esquemas de proceso.

El estudio detallado de los procesos puede llevarse a cabo en las plantas ya instaladas, así como en plantas piloto, donde se reproduzcan las condiciones de operación y sea posible manipularlas de manera conveniente para poder llevar a cabo el análisis.

Un método alternativo es el empleo de *Simuladores de Procesos*, los cuales pueden ser instalados en computadoras personales, lo que permite un fácil acceso a ellos.

Los Simuladores de Procesos son herramientas que permiten modelar la mayoría de los principales equipos empleados en los procesos, y además, son capaces de representar operaciones de equilibrio líquido-vapor y reacciones químicas, a través de ecuaciones de estado. Es por esto que los Simuladores pueden ser empleados en el desarrollo de un proceso, en su diseño, así como para representar la operación de una planta instalada.

El empleo de Simuladores de Proceso constituye una herramienta útil con que cuenta el ingeniero de proceso, para poder llevar a cabo estudios del proceso con un costo menor, ya que tanto el análisis en planta, como la investigación en una planta piloto constituyen una fuerte inversión.

En el presente trabajo de tesis, se realizó un análisis termodinámico de un par de Secciones de la Planta de Amoníaco Anhidro de 1500 Toneladas/día, ubicada en Cosoleacaque, Veracruz. Esta Planta cuenta con cuatro secciones principales, las cuales son:

- a) la *Sección de Producción de Gas de Síntesis* (que es una mezcla de hidrógeno y nitrógeno, principalmente),
- b) la *Sección de Purificación del Gas de Síntesis*,
- c) la *Sección de Síntesis de Amoníaco*, y
- d) la *Sección de Compresión y Refrigeración de Amoníaco*.

Las Secciones analizadas en este trabajo son, la dos últimas.

El incentivo para analizar esta Planta es el hecho de que en la producción de amoníaco se emplea como materia prima el Gas Natural, que es un combustible; por lo que es conveniente desarrollar rutas del proceso que conlleven a emplear la energía de manera más apropiada.

Para el análisis fue necesario conocer el comportamiento de la planta a régimen permanente, por lo que se hizo uso del Simulador de Procesos ASPEN PLUS 8.5-4 ⁽¹⁾, al cual se proporcionó la información contenida en el Diagrama de Flujo de Proceso. El resultado de la simulación fue la representación completa del desempeño de las Secciones de la planta: composición, flujo y propiedades de todas las corrientes intermedias y los productos, así como las condiciones de operación de los equipos de proceso.

Posteriormente, se verificó que los resultados obtenidos fueran congruentes con las especificaciones de diseño y los balances de materia de la planta. El Capítulo II del presente trabajo muestra la forma en que se llevó a cabo la simulación, y la comparación de los datos de diseño contra los resultados de la simulación

Una vez obtenido el comportamiento de las Secciones bajo estudio, se procedió a detectar las zonas de la planta que no emplean la energía de manera eficiente. La detección se hizo a

⁽¹⁾ El uso del Simulador de Procesos ASPEN PLUS es bajo licencia otorgada a la Facultad de Química de la UNAM, por Aspen Technology Inc.

través del cálculo del "Trabajo Perdido" en los equipos del sistema. En el Capítulo III se desglosan los cálculos para algunos de los equipos de proceso y se muestra el resultado global de las Secciones de la planta.

Con este conocimiento se plantearon *Casos de Estudio* (Capítulo IV), que permitieran la variación de las condiciones de operación de los equipos de proceso, así como los flujos y composiciones de las corrientes, con el fin de conocer la respuesta de las Secciones analizadas, y poder disminuir el consumo total de energía del proceso.

En el Capítulo V, se discuten los resultados de los Casos de Estudio, y se proponen cambios en las condiciones de operación y la estructura del proceso; cambios que permiten disminuir la cantidad de energía requerida.

El *objetivo* que se persigue con el desarrollo de este trabajo es:

Tener un entendimiento amplio del esquema de proceso de las Secciones de Síntesis y Refrigeración de Amoníaco, a través de su representación en un Simulador de Procesos.

El conocimiento del proceso llevará a una comprensión más completa de por qué el proceso fue diseñado de esa manera, y se corroborará si sus condiciones de operación son las mejores, en aspectos energéticos (concepto de trabajo perdido), o requieren de ajustes para reducir los consumos de energía.

La variación de las condiciones de operación se hará mediante Casos de Estudio, lo que permita encontrar las "mejores condiciones de operación", es decir las condiciones que no produzcan grandes cantidades de trabajo perdido.

Asimismo, será posible a través de los Casos de Estudio, proponer algunos cambios que permitan disminuir el consumo de energía del proceso.

CAPÍTULO II

ANTECEDENTES

II ANTECEDENTES

1) SOBRE LA OBTENCIÓN DE AMONIACO Y SUS USOS

En 1901, Le Chatelier en Francia demostró la posibilidad de sintetizar amoniaco a partir de una mezcla de hidrógeno y nitrógeno bajo presión. El desarrollo industrial de la síntesis tuvo lugar en Alemania, donde en 1909 Fritz Haber, auxiliándose de estudios realizados por Nerst, le Rossignol, entre otros, llevó a cabo un progreso considerable al realizar la síntesis de amoniaco con un catalizador. Los científicos de Badische Anilin and Soda Fabrik (BASF): Bosch y Mittash adoptaron el proceso desarrollado por Haber, y en septiembre de 1913 se puso en operación la primera planta comercial en Alemania, con una capacidad de 7000 toneladas métricas al año.

Más adelante, Claude en Francia, Casale y Fauser en Italia y Mont Cenis en los Estados Unidos concibieron otras versiones para el proceso de síntesis de amoniaco diferentes del proceso original de Haber. La fuente de nitrógeno era el aire, y el hidrógeno era producido por electrólisis de agua o por gasificación de materiales con alto contenido de carbono como coque, carbón, lignita y madera.

A partir de los años 60's se han construido plantas productoras de amoniaco de gran capacidad, lo cual ha sido posible debido a la introducción de compresores centrífugos para el aire, el gas de síntesis y la refrigeración de amoniaco; junto con la introducción de grandes hornos reformadores que emplean sistemas bien integrados de recuperación de calor. Además de la producción de vapor de alta presión, con la energía desprendida de la reacción de síntesis de amoniaco, así como vapor generado durante el proceso de producción de gas de síntesis, el cual es empleado en turbinas de vapor que accionan a los compresores.

Una vez como producto, el amoniaco líquido presurizado, es manejado en tanques o cilindros de acero de alta resistencia y se encuentra disponible de manera comercial. Además

son de gran empleo las disoluciones acuosas de amoníaco de 22-28 Bé⁽²⁾ en la industria química.

El amoníaco es materia prima fundamental en una amplia gama de productos, entre los que se cuentan :

- la producción de ácido nítrico
- la preparación de fertilizantes, en forma de sales de amonio.

Grandes cantidades de amoníaco se emplean en la síntesis de aminas, amidas, hidrazinas, cianuros, etc., así como detergentes; también en las tecnologías de refrigeración y metalurgia.

El amoníaco también podría ser utilizado como combustible de alto poder calorífico, obtenido de su oxidación, empleando un catalizador adecuado que conduzca a la formación de nitrógeno y agua.

2) SITUACIÓN ACTUAL DE LA PRODUCCIÓN DE AMONIACO EN MÉXICO

En México, el amoníaco es producido principalmente por Petróleos Mexicanos en tres diferentes zonas ubicadas en Complejos Petroquímicos: Cosoleacaque, en el estado de Veracruz, Cd. Camargo, en el estado de Chihuahua, y Salamanca, en Guanajuato. En la Tabla 2.1 se muestra la elaboración de este petroquímico secundario, para los últimos años, por parte de Pemex.

TABLA 2.1 ELABORACIÓN DE AMONIACO EN MILES DE TONELADAS

	1992	1993	1994
Cosoleacaque	2301	1753	2132
Cd. Camargo	150	137	150
Salamanca	227	247	186
TOTAL =	2678	3137	2468

⁽²⁾ Bé= grados Baumé, que son unidades arbitrarias de la escala de areómetros, empleados para determinar densidades de líquidos y concentraciones de disoluciones.

Los petroquímicos secundarios (de acuerdo a la clasificación publicada en el Diario Oficial de la Federación el 17 de agosto de 1992) entre los que figuran: acetileno, amoníaco, benceno, metanol, tolueno, entre otros; requieren permiso para su elaboración por parte de la SEMIP (Secretaría de Energía, Minas e Industria Paraestatal), previa opinión de la Comisión Petroquímica Mexicana.

Otras industrias que elaboran el amoníaco en México son Quemia, S.A., Amo Mex Mexicana, S.A., Fertilizantes de Sonora, S.A., entre otros.

La exportación de amoníaco anhidro se realiza principalmente a países como Estados Unidos, Corea del Norte, Cuba, Guatemala e Italia. Sin embargo, a pesar que la producción de amoníaco permite su exportación, existe la importación de este producto tal y como puede verse en la Tabla 2.2

FECHA	EXPORTACIONES	IMPORTACIONES
ENE_DIC 1992	775,716	1,360
ENE_DIC 1993	372,317	4,814
ENE_DIC 1994	512,991	64,581
ENE_MAY 1995	134,427	41
ENE_DIC 1995**(estimación)	322,625	98

* Fuente de la información: Bancomext

** NOTA : La estimación se realizó por simple proporcionalidad y no la sustenta ningún estudio económico. Sólo se presenta con fines comparativos y se apoyó en el conocimiento de que la situación actual de país permanecerá como hasta ahora en lo que resta de 1995.

Los principales países de donde se importa amoníaco son: Estados Unidos, Canadá, Japón, Alemania y Holanda; lo que indica que existe un déficit del producto; este déficit puede deberse a dos razones principales: 1) la capacidad instalada en México para la elaboración de amoníaco no resulta suficiente, y 2) las plantas no operan con el factor de servicio (días de operación al año) con el que fueron diseñadas. Un factor de servicio bajo en una planta es causado por una mala operación; por ejemplo, el paro de operaciones por regeneración de catalizadores inactivos o envenenados.

La tendencia de las exportaciones es de no crecimiento. Por otra parte las importaciones tienden a aumentar, con excepción del presente año, como consecuencia de la fuerte crisis (en que las importaciones en general han disminuido).

Con el fin de reducir las importaciones de amoníaco, debe lograrse que las plantas operen a la máxima capacidad, y además hagan un mejor empleo de los recursos energéticos para disminuir costos de operación.

La reducción de importaciones constituye un incentivo más para analizar a detalle los procesos instalados, lo que permita detectar zonas donde no se aprovecha de manera adecuada la energía, o donde no se está teniendo un buen control de las variables durante la operación, lo que provoca paros en la producción.

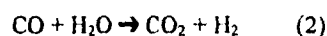
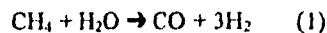
3) DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE AMONÍACO EMPLEADO EN LA PLANTA BAJO ESTUDIO (*PROCESO KELLOGG*)

El esquema de proceso seleccionado pertenece a un diseño de la tecnología de The Kellogg Company.

Este proceso fue introducido a mediados de los años sesenta e incorporó un gran número de innovaciones en su esquema, para obtener una alta eficiencia: como el empleo de compresores centrífugos para los trabajos de compresión más grandes, con lo que se pueden obtener velocidades de producción más altas para plantas de un sólo tren de procesamiento. Las condiciones de operación y las características particulares del proceso Kellogg se describirán a continuación de manera breve.

La alimentación de gas natural se desulfuriza empleando un proceso catalítico, y se mezcla con vapor sobrecalentado de 590 psia de presión para obtener una relación de 3.5 mol de vapor de agua por átomo de carbono. Los reactivos mezclados se precalientan a cerca de

900°F, entrando en estas condiciones al *reformador primario*, el cual consiste en un gran número de tubos que contienen catalizador de níquel soportado. Las reacciones principales que se llevan a cabo en el reformador primario son:



La primera reacción es endotérmica y la segunda es exotérmica; la energía requerida para la reacción endotérmica se proporciona por la combustión de gas natural, en la zona de radiación. Las condiciones de salida del reformador son 1500°F y 485 psia. La reformación a altas presiones es ahora una práctica estándar para las plantas modernas de amoníaco, pues tiene la ventaja de reducir los requerimientos de compresión en la etapa de síntesis.

El gas reformado fluye hacia el *reformador secundario*, (que es un reactor adiabático que también tiene catalizador de níquel soportado), donde se mezcla con aire comprimido y precalentado. En este reactor continúan las reacciones de reformación (1) y (2) y además se consume el oxígeno por las reacciones de combustión de CH_4 e H_2 . Estas reacciones de combustión elevan la temperatura del efluente del reformador secundario hasta 1840°F, y los gases contienen fundamentalmente H_2 , N_2 , Ar, CH_4 , CO y CO_2 . El contenido de metano en el gas es de 0.3 % en base seca. El gas es enfriado generando vapor de alta presión antes de llevar a cabo la *conversión del monóxido de carbono*, empleando catálisis de alta y baja temperatura, mediante la reacción (2). Esta conversión reduce el contenido de monóxido de carbono al 0.3 % (base seca). La remoción del dióxido de carbono a un nivel residual del 0.1 % se lleva a cabo poniendo en contacto al gas con un líquido solvente, empleando un proceso de *absorción-desorción* que permite regenerar al solvente.

La etapa final de la purificación del gas de síntesis es la *metanación* del dióxido y monóxido de carbono residual con un catalizador de níquel soportado a una temperatura de 690°F. En este reactor se invierte el sentido de la reacción de reformación (1), y tiene por objeto eliminar totalmente el CO y el CO_2 . El gas de síntesis resultante a una presión de 382 psia, es enfriado y tiene una composición cercana a:

H₂ = 74.2 %mol

N₂ = 24.7 %mol

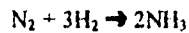
CH₄ = 0.8 %mol

Ar = 0.3 %mol

La relación de H₂:N₂ cercana a tres, se logra ajustando el flujo de aire en el reformador secundario. Esta corriente es la entrada al Circuito de Síntesis que se estudiará en el presente trabajo de tesis.

El gas se comprime a la presión de síntesis en un compresor centrífugo de multietapas accionado por un turbina de vapor de alta presión. A la salida de la tercera etapa de compresión, el gas de síntesis fresco se mezcla con el gas recirculado (gas efluente del *Convertidor de amoníaco* que ya ha sido enfriado).

La mezcla de gases se enfría a -10°F (utilizando amoníaco como refrigerante) para condensar el amoníaco producido; este amoníaco es removido en un separador. La corriente de gas, que contiene aproximadamente un 2 % de amoníaco, es comprimida nuevamente para compensar la caída de presión durante el enfriamiento, y precalentada a 285°F por medio del intercambio de calor con el gas que ya reaccionó; y entonces entra al *Convertidor de Amoníaco*. En el convertidor se lleva a cabo la síntesis directa del amoníaco mediante la reacción:



El Convertidor está conformado por tres camas catalíticas de flujo axial, y un intercambiador colocado arriba de la cama catalítica superior, con la finalidad de que los gases de salida cedan su energía a la alimentación al Convertidor (Ver Figura 2.1). Se emplea gas de apagado, esto es, gas frío de recirculación el cual no ha sido calentado por la reacción exotérmica, para controlar la temperatura de las diferentes camas del Convertidor de amoníaco. El gas que deja la cama final contiene alrededor de 13 % de amoníaco. El catalizador de síntesis es un catalizador comercial de hierro soportado.

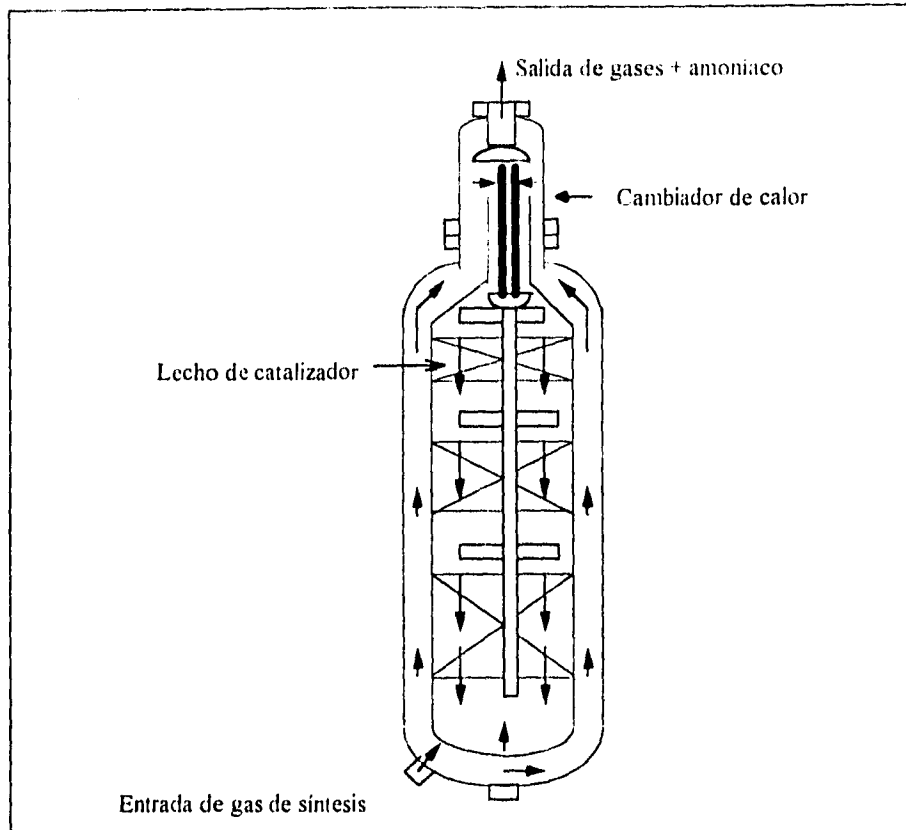


FIGURA No. 2.1 CONVERTIDOR DE SÍNTESIS

El gas effluente del Convertidor es enfriado simultáneamente con recuperación de calor con agua de alimentación a calderas y con intercambio de calor con la corriente de entrada. Una corriente de purga es tomada en éste punto, para controlar el nivel de inertes (metano y argón) en el circuito, y los gases que permanecen regresan a la etapa de compresión de recirculación. El gas purgado, después de recuperar el amoníaco, es utilizado como combustible.

La característica principal del proceso Kellogg es el sistema de integración de recuperación de calor para utilizar el calor desechado por varias corrientes de proceso y por el gas de

combustión del reformador primario, el cual produce vapor sobrecalentado de 1500 psia de presión. El vapor se expande en una turbina, la cual acciona el compresor de gas de síntesis. La corriente de vapor efluente de las turbinas a 590 psia es empleada como vapor de proceso (alimentación al reformador primario) y para accionar otros motores. El vapor efluente de algunas de las turbinas pequeñas a 70 psia es usado en cargas menores de calentamiento.

4) DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LOS CIRCUITOS DE SÍNTESIS Y COMPRESIÓN DE AMONIACO

El análisis realizado a la planta de amoniaco se circunscribe a dos secciones :

- 1) La sección donde ocurre la reacción de obtención de amoniaco que se conoce como *Sección de Síntesis o Circuito de Síntesis*.
- 2) La *Sección de Compresión y Refrigeración* de amoniaco, donde el amoniaco producido se mantiene a temperaturas más bajas que la de los alrededores.

A partir de la simulación del proceso se obtuvo información más detallada acerca de las corrientes de proceso y los equipos. El Diagrama de Flujo simplificado de éstas secciones se muestra en la Figura 2.2.

La mezcla de gas de síntesis (de composición aproximada 24% N₂, 74% H₂ y el restante de inertes tales como CH₄, Ar y H₂O) proveniente del *Metanador*, se enfría para condensar agua a 100°F y 382 psia. A éstas condiciones entra al *Compresor de Gas de Síntesis 103-J* de dos barriles, que lo comprime en tres etapas más una etapa de recirculación. Este compresor cuenta con interenfriadores en cada etapa de compresión. Para la descarga de la primera etapa, el enfriamiento se hace primero en un intercambiador cuya corriente fría proviene del domo de la torre *Absorbadora de CO₂* de la Sección de Purificación de Gas de Síntesis. En este punto se extrae una pequeña corriente de recirculación de hidrógeno (ya que la corriente lo contiene en un alto porcentaje), el cual se alimenta junto con el gas natural a

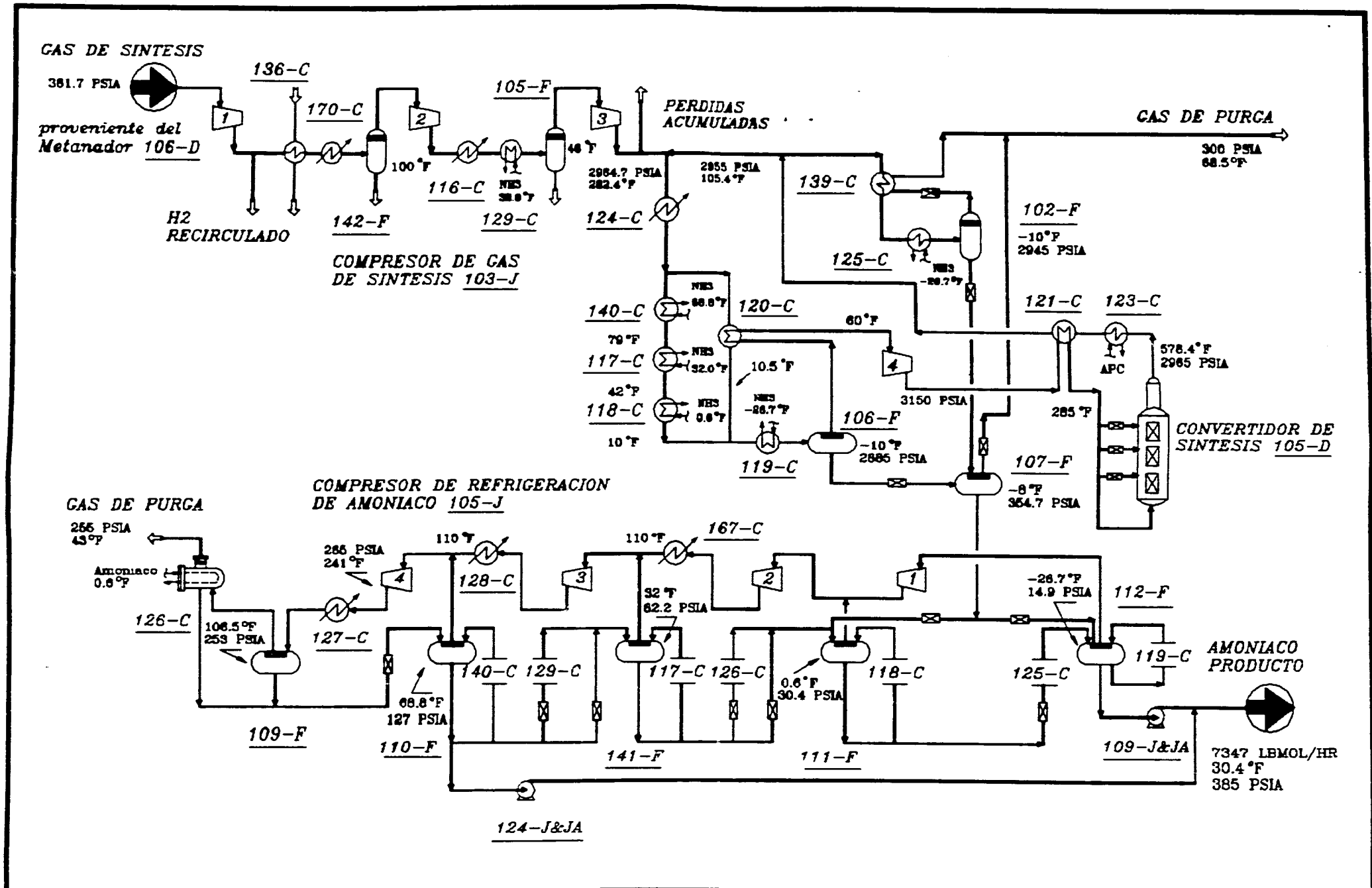


Figura 2.2

UNAM
 FACULTAD DE QUIMICA

PLANTA DE AMONIACO
 1500 TON/DIA
 Cosoleacaque, Ver
 Mexico

DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO
 SECCIONES DE SINTESIS Y REFRIGERACION DE AMONIACO

DIBUJO:
 GRISEL RAMIREZ MANZANARES

SIN ESCALA

SEPT. 1995
 DIBUJO 001

un horno precalentador de carga previo al *Reformador primario*, para ayudar en la desulfuración del gas natural.

Un segundo enfriamiento de la corriente de gas de síntesis se lleva a cabo con agua de enfriamiento en el cambiador *170-C*. El agua que condensa debido a la compresión del gas de síntesis y a su subsecuente enfriamiento, se elimina por medio del tanque separador de fases *142-F*.

En la segunda etapa de compresión el gas se comprime hasta 1105 psia. La corriente se enfría con el cambiador *116-C* y posteriormente con el intercambiador *129-C*, donde el fluido frío es amoníaco a 32°F proveniente del Circuito de Compresión de amoníaco. Nuevamente hay agua condensada por lo que se elimina a través del tanque *105-F*. En este punto se ha eliminado el agua casi por completo, quedando sólo un 1.34% en mol.

La presión de succión en la 3ª etapa es de 1095 psia y la presión de descarga de 2965 psia, a una temperatura de 282°F. El gas de síntesis comprimido, a estas condiciones, está listo para entrar al Circuito de Síntesis de amoníaco de alta presión.

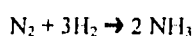
A ésta corriente de gas de síntesis se le llama "carga fresca", la cual se mezcla con la corriente de gas de síntesis recirculado que contiene el 13% de amoníaco. Para separar el amoníaco de la corriente de gas es necesario enfriarlo para que condense.

La mezcla de las corrientes de carga fresca y gas recirculado se enfrían a través de una serie de cambiadores, que comienza con el enfriador con agua *124-C*. De ahí la corriente se divide en dos nuevas corrientes, una de ellas pasa a través de los enfriadores con amoníaco *140-C*, *117-C* y *118-C*, donde la corriente se enfría a 79, 42 y 10°F, respectivamente. La otra corriente, entra al cambiador *120-C* e intercambia calor con el vapor de -10°F proveniente del tanque *106-F*.

Las corrientes de proceso que han sido enfriadas se unen nuevamente, y pasan a través del cambiador *119-C* que enfría con amoníaco a -28°F . El amoníaco que ha condensado se separa en el tanque *106-F*. La fase vapor lleva esencialmente la mezcla de gas de síntesis (H_2 , N_2), y entra a la etapa de compresión del gas de recirculación para compensar las pérdidas de presión en el circuito de cambiadores y así alcanzar las condiciones a los cuales se lleva a cabo la reacción de obtención de amoníaco. El líquido efluente del tanque *106-F* es prácticamente amoníaco (99.38%) el cual se expande reduciendo su presión hasta 355 psia, con lo cual se logra una mejor separación de los gases aún presentes.

La separación de fases ocurre en el tanque *107-F*, donde el vapor efluente, constituido por H_2 y N_2 , inertes y algo de amoníaco, se dirige hacia la purga del circuito. La corriente líquida de amoníaco, que contiene el agua que entró con la carga fresca de gas de síntesis, es enviada al Circuito de Compresión y Refrigeración de amoníaco.

El gas de síntesis comprimido en la etapa de recirculación a 3150 psia y 89°F se precalienta en el intercambiador *121-C*, para alcanzar una temperatura de 285°F . En estas condiciones se alimenta al *Convertidor de Síntesis 105-D* donde ocurre la reacción de formación de amoníaco



El Convertidor de amoníaco tiene tres lechos empacados con catalizador de Fe. La corriente de gas de síntesis asciende por la parte anular, aumentando su temperatura debido al intercambio de calor con el efluente, y desciende pasando por lechos de catalizador donde ocurre la reacción. Una vez que ha reaccionado se enfría intercambiando calor con los reactivos de entrada. Al salir, la composición de amoníaco es de 13% y la temperatura de 578°F . Esta alta temperatura es aprovechada para precalentar el agua para calderas en el cambiador *123-C*, donde la corriente de proceso disminuye su temperatura hasta 307°F . Con el intercambio de calor en el intercambiador *121-C* se precalienta la corriente que va a entrar al Convertidor.

La corriente de proceso a 105°F constituye el gas de recirculación, el cual se divide en el gas que se mezcla con la "carga fresca" para entrar nuevamente al circuito, y una pequeña parte que va a la purga para eliminar los gases inertes, y así disminuir la presión parcial de éstos que causan que la conversión de amoníaco disminuya.

El gas de la purga se enfría en el intercambiador 139-C hasta 71°F y en el enfriador 125-C (con amoníaco como refrigerante), para alcanzar una temperatura de -10°F; lo cual permite condensar algo de amoníaco de la corriente de gases. En el tanque separador 102-F se recupera el amoníaco líquido que posteriormente se expande a 355 psia y se envía al tanque 107-F, de donde se alimenta amoníaco al Circuito de Refrigeración y Compresión.

El vapor effluente del tanque 102-F se expande a 850 psia y se calienta a 75°F para enviarlo a la purga. El gas de purga se utiliza como combustible, por su contenido de H₂ al 60% y CH₄ al 14%. Este gas se obtiene de los vapores effluentes de los tanques separadores 102-F y 107-F, así como de una pequeña purga proveniente del Circuito de Refrigeración y Compresión, donde se eliminan los inertes incondensables que arrastra el amoníaco.

La corriente de entrada al Circuito de Refrigeración y Compresión, es el amoníaco líquido proveniente del tanque 107-F. Esta corriente se divide en dos corrientes que alimentan a los tanques 111-F y 112-F, una vez que se ha expandido el amoníaco a 30 y 15 psia respectivamente.

El Circuito de Refrigeración tiene cuatro niveles de presión. El Compresor 105-J es también de dos barriles y cuenta con dos interenfriadores con agua, los cambiadores 167-C y 128-C, que tiene la finalidad de enfriar el vapor para disminuir su volumen.

El tanque 112-F separa las fases a -27°F, cuyo vapor saturado constituye el fluido frío del cambiador 119-C. El líquido effluente es bombeado y enviado a producto (su composición es de 99.97% amoníaco). La corriente de vapor va hacia la primera etapa de compresión de amoníaco donde alcanza una presión de 30 psia. El effluente de ésta primera etapa de

compresión se mezcla con el vapor proveniente del tanque *111-F* y entran a la segunda etapa de compresión. El amoníaco contenido en el tanque *111-F*, a 30 psia y 0°F, constituye el fluido frío del cambiador *118-C*.

El flujo de salida de la segunda etapa de compresión a 67 psia es enfriado a 110°F con el cambiador de agua de enfriamiento *167-C*. Una vez enfriado se mezcla con el vapor proveniente del tanque *141-F* y entran a la tercera etapa de compresión, donde alcanzan una presión de 132 psia.

La salida de esta tercera etapa de compresión está a 210°F, por lo que se enfría con ayuda del cambiador *128-C* hasta 110°F y se mezcla con el vapor proveniente del tanque separador *110-F*, cuyas condiciones de equilibrio son 69°F y 127 psia. Finalmente entran a la cuarta y última etapa de compresión de amoníaco. Las condiciones de salida de esta etapa de compresión son 265 psia y 241°F.

El amoníaco que se ha comprimido tiene un porcentaje de inertes. Es por esto que se enfría la corriente de salida del compresor con agua en el cambiador *127-C*, y se separan las fases en el tanque *109-F* donde las condiciones de equilibrio son 106.5°F y 253 psia. Al vapor que sale de este tanque, adicionalmente se le enfría a 46°F al pasar por el cambiador *126-C* que emplea un refrigerante de amoníaco (a 0.6°F) para condensar el amoníaco que pudiera haber sido arrastrado con los gases incondensables, y recuperar el más posible. Es en este punto donde se eliminan los inertes con una purga que se une a la purga del Circuito de Síntesis.

Los circuitos son purgados con el fin de que la concentración de inertes que se acumulan no aumenten en forma tal que: 1) se reduzca la conversión de amoníaco en el Circuito de Síntesis y 2) aumente excesivamente la presión en los dos Circuitos.

El líquido saturado del tanque *109-F* y del cambiador *126-C*, que contienen el amoníaco condensado, se mezclan y posteriormente se reduce la presión a 127 psia para poder separar

fases en el tanque 110-F. La fase vapor se envía a la cuarta etapa de compresión y el líquido se divide en dos porciones :

- 1) la mayor parte (cerca del 60%) es enviado al Circuito de Compresión constituido por los tanques separadores, los enfriadores con amoníaco y las cuatro etapas de compresión;
- 2) el restante es bombeado y enviado como producto a almacenamiento.

5) SIMULADOR EMPLEADO PARA OBTENER LOS DATOS DE LAS CORRIENTES DE LA PLANTA Y LOS EQUIPOS DE PROCESO.

Existen un gran número de programas para simular diagramas de flujo de proceso mediante la aproximación secuencial modular. En éste trabajo se utilizó el simulador ASPEN PLUS versión 8.5.4, bajo licencia otorgada a la Facultad de Química de la UNAM, por la Compañía Aspen Technology Inc.

En general, los programas de simulación son capaces de representar la mayoría de los equipos utilizados en los procesos, y tienen rutinas que generan las propiedades físicas sustancias químicas, ya sea a partir de tablas de datos o mediante fórmulas para realizar los cálculos. Los datos que almacenan en las tablas incluyen: peso molecular, punto normal de fusión y de ebullición, densidad de líquido, constantes críticas, capacidad calorífica, calor latente, solubilidad y fórmulas de cálculo de las constantes de las presión de vapor.

El sistema de estimación de propiedades termodinámicas consiste en una base de datos de propiedades y una biblioteca de rutinas de cálculo, para evaluar entalpías, calores de reacción, puntos de rocío y de burbuja, así como para efectuar los cálculos de flash isotérmico y adiabático. La estrategia secuencial modular empleada por estos programas es bastante flexible y puede acomodar módulos de complejidad considerable, como la estimación de propiedades que incluyen mezclas de vapor-líquido no ideales, métodos de

estimación de coeficientes K, y métodos semiempíricos para el cálculo de las propiedades de mezclas complejas de derivados de petróleo.

Sobre el paquete ASPEN (Advanced System for Process Engineering)

ASPEN puede representar corrientes de varias fases y de sustancias complejas, tales como carbón, las cuales no son representadas por componentes convencionales o pseudo componentes. El programa está comprimido en cerca de 1500 líneas de código FORTRAN, datos de propiedades físicas y bancos de datos de costos.

En la Figura 2.3 se muestra el flujo de información que se lleva a cabo en el programa ejecutable de ASPEN. Un programa traductor lee la entrada de datos del usuario y genera un programa principal en FORTRAN. Los programas ejecutables establecen las estructuras de datos y generan la secuencia de cálculo de los módulos de equipo. El módulo así creado hace que el programa de simulación sea acorde al problema que se está simulando. La Tabla 2.3 constituye un listado de los módulos de operaciones unitarias disponibles en la versión 8.5.4 de ASPEN PLUS.

Por su naturaleza secuencial modular, la estructura de ASPEN permite ejecutar un número grande y variable de módulos, también pueden ser insertadas nuevas líneas de FORTRAN, y se requiere una mínima cantidad de memoria para simular. El lenguaje de entrada de ASPEN está orientado a usuarios de ingeniería de procesos, familiarizados con cálculos de ingeniería química, pero sin un conocimiento extenso de programación de computadoras.

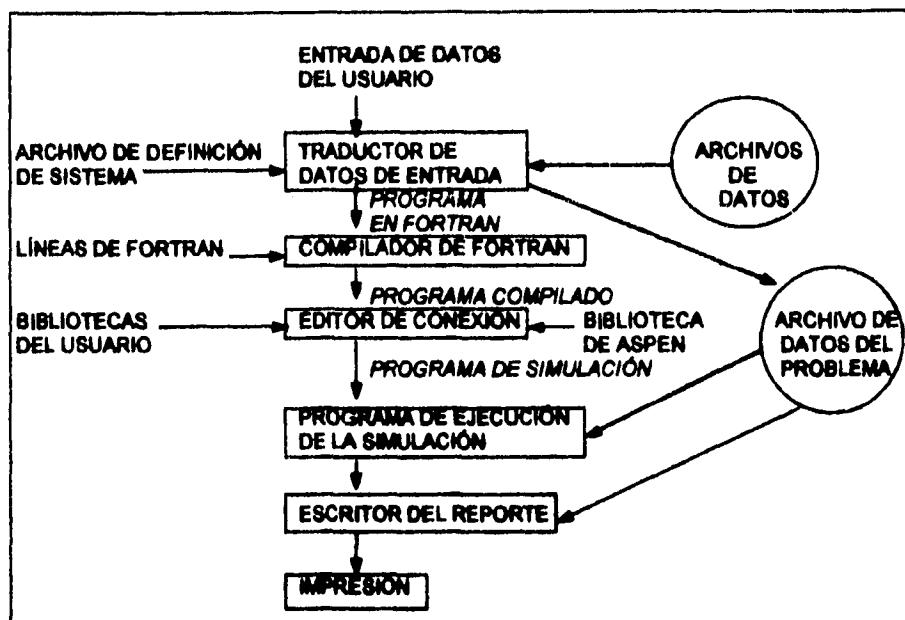


FIGURA 2.3 FLUJO DE INFORMACIÓN EN ASPEN⁽¹⁾

TABLA 2.3. MODELOS DE OPERACIONES UNITARIAS EN ASPEN PLUS.

NOMBRE	DESCRIPCIÓN DEL MODELO
Mixer	mezclador de corrientes
Fsplit	divisor de corrientes
Sep	separador de componentes
Sep2	separador de dos salidas
Heater	calentador/enfriador
Flash2	tanque separador de dos fases
Flash3	tanque separador de tres fases
Heatx	intercambiador de calor de dos corrientes
Mheatx	intercambiador de calor multicorrientes
Dstrw	destilación disco por método corto
Dial	destilación "rating" corto
Scfrac	destilación método corto para columnas complejas
Radfrac	destilación rigurosa
Multifrac	destilación rigurosa para columnas complejas
Extract	extractor riguroso líquido-líquido
Absbr	absorbador/desorbedor riguroso
Rstoc	reactor estequiométrico
Ryield	reactor con rendimiento

⁽¹⁾ Fuente de información: Hussain, *Asghar Chemical Process Simulation*. Wiley Eastern Limited, 1986

<i>NOMBRE</i>	<i>DESCRIPCIÓN DEL MODELO</i>
Requil	reactor al equilibrio
Rgibbs	reactor al equilibrio, minimización de la energía de Gibbs
Rcstr	reactor de tanque con agitación continua
Rplug	reactor de flujo pistón
Rbatch	reactor por lotes
Bomba	bomba/turbina hidráulica
Compr	compresor/turbina
Mcomp	compresor/turbina de multietapas
Dupl	duplicador de corrientes
Mult	multiplicador de corrientes

CAPÍTULO III

SIMULACIÓN DEL PROCESO

Y SUS RESULTADOS

III SIMULACIÓN DEL PROCESO Y SUS RESULTADOS

1) CONDICIONES ESPECÍFICAS DE LA SIMULACIÓN DE LAS SECCIONES DE LA PLANTA

A continuación se describirán las características principales del archivo denominado INPUT (entrada de datos), a partir del cual se obtuvo la simulación de las Secciones de la Planta de Amoníaco bajo estudio.

1.1) ECUACIONES, MODELOS Y PARÁMETROS EMPLEADOS PARA REPRESENTAR EL COMPORTAMIENTO DE LA PLANTA

- Los componentes presentes en la mezcla de gas de síntesis son: Nitrógeno (N_2), Argón (Ar), Hidrógeno (H_2), Metano (CH_4), Agua (H_2O) y Amoníaco (NH_3). Esta mezcla de gases se alimenta al *compresor de gas de síntesis* tal como se ha descrito anteriormente. Todos estos compuestos se encuentran dentro del banco de datos del Simulador ASPEN PLUS.
- Con el fin de representar mejor la separación del amoníaco condensado de los gases de síntesis, se han especificado como componentes de Henry al N_2 , H_2 , y CH_4 debido a que son gases que se encuentran a temperatura supercrítica.
- Los modelos de operaciones unitarias empleados en la simulación para representar los equipos de proceso se encuentran en la Tabla 3.1. El número de operaciones unitarias involucradas en las Secciones de Síntesis y Compresión es de 70.

TABLA 3.1 OPERACIONES UNITARIAS EMPLEADAS EN LA SIMULACIÓN

MODELO	EQUIPO DE PROCESO QUE REPRESENTA	ESPECIFICACIONES PROPORCIONADAS *
COMPR	1) Compresor centrífugo	Tipo= isentrópico, P_{salida}
	2) Turbina	Tipo= politrópico, P_{salida}
FLASH2	Tanque separador de dos fases	1) $T_{equilibrio}$, $P_{equilibrio}$ 2) $P_{equilibrio}$, V/F 3) $P_{equilibrio}$, Q
FSPLIT	Divisor de corrientes	fracción de flujo que circula por las n-1 corrientes de salida.
HEATER	1) Válvula de expansión adiabática	$Q=0$, P_{salida} o ΔP
	2) Cambiador de calor	T_{salida} , P_{salida} o ΔP
MHEATX	Cambiador de calor de corrientes de proceso	T_{salida} caliente (o T_{salida} fría), $\Delta P_{caliente}$, $\Delta P_{fría}$
MIXER	Mezclador de corrientes	$\Delta P=0$, fases que maneja
PUMP	Bomba	P_{salida}
RSTOIC	Reactor estequiométrico adiabático	$Q=0$, P_{salida} , estequiometría de la reacción, conversión referida a algún reactivo

* En conjunto con las corrientes de entrada y salida de cada modelo

NOTA : T=temperatura, P=presión, $\Delta P= T_{salida} - T_{entrada}$, Q=carga térmica.

- Ecuación de estado para cálculo de propiedades termodinámicas

Las ecuaciones cúbicas constituyen expresiones capaces de representar el comportamiento de mezclas que contengan fases tanto líquida como vapor. Para la presente simulación se empleó la opción SYSOP3 = REDLICH-KWONG-SOAVE, que es precisamente una ecuación de estado cúbica. Esta ecuación resulta una expresión adecuada para muchos fines de ingeniería en la representación de datos PVT.

$$P = \frac{RT}{(V-b_m)} - \frac{a_m}{V(V+b_m)}$$

donde

P=presión

T=temperatura

V=volumen

R=constante universal de los gases

a_m y b_m son constantes que se determinan para la mezcla

- Parámetros de interacción binaria K_{ij} , para la ecuación de estado.

Para una mezcla de gases reales, la constante a_m de la ecuación de estado se calcula de la siguiente manera

$$a_m = \sum_i \sum_j X_i \cdot X_j \cdot (a_i \cdot a_j)^{1/2} (1 - K_{ij})$$

siendo K_{ij} el *parámetro de interacción binaria* que cumple con las siguientes condiciones :
 $K_{ii}=0$ y $K_{ij} = K_{ji}$.

Los parámetros K_{ij} tiene valores determinados experimentalmente y reportados en H. Knapp "Vapor-liquid equilibria for mixtures of low boiling substances" *Chemistry Data Series*, Vol. VI, DECHEMA 1982.

ASPEN PLUS proporciona la opción de empleo de parámetros K_{ij} , los cuales tiene almacenados en un banco de datos y que fueron tomados de la referencia antes citada y de API Technical Data Book Petroleum Refining 4th Edition, 1983. Por otra parte también permite la introducción de estos parámetros por el usuario.

Si no se emplean parámetros de interacción binaria (es decir $K_{ij}=0$) en la separación de amoníaco de los gases, la simulación de la planta presenta grandes problemas de convergencia, y reporta resultados donde una gran cantidad de gases inertes son arrastrados por el amoníaco líquido.

El empleo de los parámetros K_{ij} contenidos en el banco de datos del simulador proporciona resultados donde existen gases disueltos (principalmente Ar y CH₄) en el amoníaco líquido que sale como producto.

Debido a que los valores de K_{ij} reportados en la literatura no proporcionan un buen ajuste en la separación del amoníaco y los gases de síntesis, se consideraron a los flujos de diseño

de la planta como datos experimentales y a partir de ellos se ajustaron los valores de los parámetros de interacción binaria para todos los gases con respecto al amoníaco, de modo que la separación de fases fuera la reportada en el diseño. Los valores ajustados se muestran en Tabla 3.2

TABLA 3.2 VALORES DE K_{ij} AJUSTADOS

PARÁMETRO	VALOR
$K_{\text{NH}_3\text{-AR}} = K_{\text{AR-NH}_3}$	0.2955
$K_{\text{NH}_3\text{-CH}_4} = K_{\text{CH}_4\text{-NH}_3}$	0.3250
$K_{\text{NH}_3\text{-H}_2} = K_{\text{H}_2\text{-NH}_3}$	-0.0470
$K_{\text{NH}_3\text{-N}_2} = K_{\text{N}_2\text{-NH}_3}$	0.2520

Con el fin de corroborar que el empleo de éstos parámetros proporciona mayor exactitud en los cálculos de equilibrio líquido-vapor, se realizó el cálculo de dos tanques separadores (102-F y 107-F) para los casos en que

- 1) se emplean los parámetros K_{ij} ajustados, y
- 2) no se emplean parámetros.

En la Tabla 3.3 se encuentran los resultados de los cálculos antes mencionados y se les compara con los datos de diseño.

De donde puede verse que para los casos en que no se emplean los *parámetros de interacción binaria ajustados*, existe una mayor composición de gases inertes en la fase líquida. Por lo anterior se concluye que en términos generales se obtienen resultados más apegados al diseño con el empleo de parámetros binarios.

TABLA 3.3 RESULTADOS DEL EMPLEO DE PARÁMETROS BINARIOS						
COMPUESTO	FRACCIONES DE LÍQUIDO Y VAPOR DEL TANQUE 107-F					
	DISEÑO		CON K_{ij}		SIN K_{ij}	
	X	Y	X	Y	X	Y
N ₂	0.000155	0.166545	0.000098	0.149584	0.000333	0.133759
Ar	0.000090	0.082469	0.000120	0.052253	0.000297	0.024539
H ₂	0.000339	0.442334	0.000423	0.592948	0.000573	0.712741
CH ₄	0.000424	0.208984	0.000233	0.143266	0.000837	0.039130
H ₂ O	0.000000	0.000000	0.000302	0.000000	0.000301	0.000001
NH ₃	0.998990	0.099668	0.998824	0.061949	0.997659	0.089830

COMPUESTO	FRACCIONES DE LÍQUIDO Y VAPOR DEL TANQUE 102-F					
	DISEÑO		CON K_{ij}		SIN K_{ij}	
	X	Y	X	Y	X	Y
N ₂	0.001252	0.201903	0.000863	0.202324	0.003035	0.202039
Ar	0.000626	0.039813	0.000548	0.038976	0.002794	0.038680
H ₂	0.003755	0.609799	0.003491	0.602327	0.003416	0.602337
CH ₄	0.002503	0.131208	0.001178	0.137218	0.014717	0.135439
H ₂ O	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000001	0.000000
NH ₃	0.991865	0.017277	0.993920	0.019155	0.976037	0.021505

NOTA: X se refiere a la composición de líquido, Y a la composición de vapor; ambas en fracción mol.

- Datos proporcionados a las corrientes de proceso

A todos los tipos de corrientes que se enlistan a continuación, se les proporciona como datos: el flujo molar de cada componente de la mezcla y su condición termodinámica, es decir, una combinación de dos de las siguientes variables Temperatura, Presión, V/F o fases saturadas.

Corrientes de entrada al proceso: (corrientes de materia)	1) entrada al compresor de gas de síntesis 2) corriente fría entrante al cambiador 136-C(proveniente del domo de la Absorbadora de CO ₂)
Corrientes de corte : (corrientes con un estimado inicial)	1) Ciclo 1: 3 corrientes 2) Ciclo 2: 1 corriente 3) Ciclo 3: 1 corriente

El proceso contiene tres ciclos (Ver Figura 3.1):

- CICLO 1: El Circuito de Síntesis de amoníaco
- CICLO 2: El circuito de gas de purga
- CICLO 3: El Circuito de Refrigeración de amoníaco

- Definición de corrientes que transfieren calor (Heat stream)

Estas "corrientes de calor" transfieren la carga térmica desde los cambiadores del Circuito de Síntesis hasta el Circuito de Refrigeración, es decir, permiten la transferencia de cargas térmicas de una unidad de proceso a otra. Este tipo de estrategia se empleó para conectar a los dos Circuitos por medio de los cambiadores, tal y como se encuentra en el diseño (y en las plantas instaladas) y no complicar el Diagrama de Flujo de manera innecesaria (ver Figura 2.2).

- Método de convergencia empleado

Los diagramas de flujo que presentan ciclos de recirculación deben ser resueltos de manera iterativa, por lo que resultan necesarias las corrientes de corte con un estimado inicial, los métodos de convergencia y algunas veces una secuencia de cálculo.

El Simulador ASPEN emplea los siguientes métodos para converger corrientes de corte

NOMBRE DEL MÉTODO	DESCRIPCIÓN
Wegstein	"bounded wegstein"
Directo	substitución directa
Broyden	Broyden cuasi-Newton

Se hizo uso del método de convergencia Broyden para todos los ciclos del proceso, el cual tuvo convergencia en menor número de iteraciones y siempre fue estable. La tolerancia empleada fue de 0.0001 y el método convergió con respecto a las variables Presión y Entalpia.

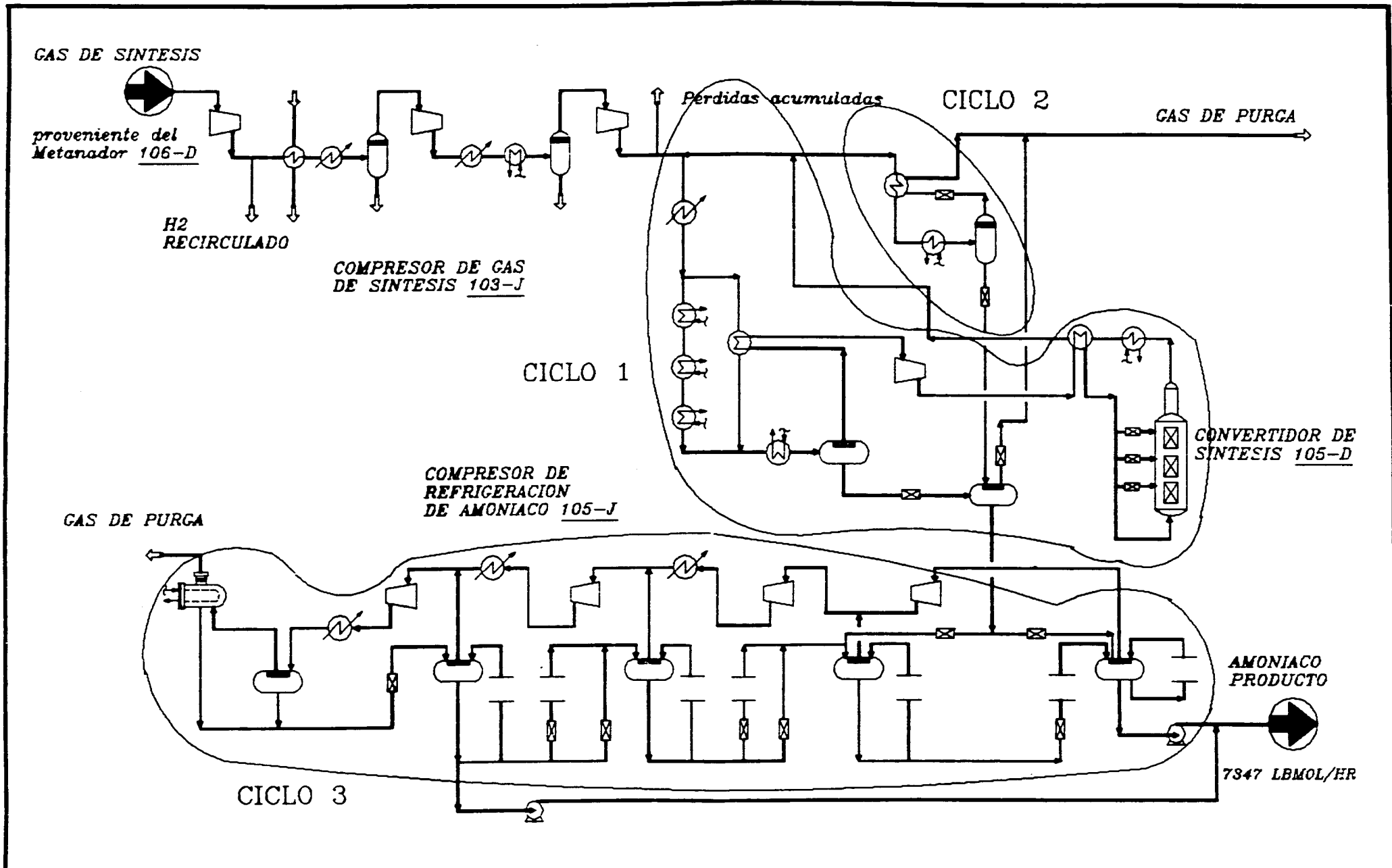


FIGURA No. 3.1 CICLOS PRESENTES EN LOS CIRCUITOS DE SINTESIS Y REFRIGERACION

DIAGRAMA DE FLUJO DE LAS SECCIONES DE SINTESIS Y REFRIGERACION DE AMONIACO

Una corriente de corte converge cuando

$$-Tolerancia \leq \frac{X_{calculada} - X_{estimada}}{X_{estimada}} \leq Tolerancia$$

para todas las variables de la corriente (flujos molares de los componentes, presión, entalpía).

1.2) COMPARACIÓN DE LOS DATOS DE DISEÑO VS. LOS RESULTADOS OBTENIDOS CON AYUDA DEL SIMULADOR DE PROCESOS.

La simulación realizada de los Circuitos de Síntesis y Refrigeración de amoníaco produjeron resultados que presentan gran similitud con los datos de diseño. (Ver Tablas 3.4, 3.5, 3.6 y 3.7)

TABLA 3.4 CORRIENTES DEL PROCESO

		DISEÑO			RESULTADO DE LA SIMULACIÓN			
Componente		FLUJO (mol/hr)	TEMP. (°F)	PRES. (psia)	FLUJO (mol/hr)	TEMP. (°F)	PRES. (psia)	% de desviación del flujo molar
Carga fresca de gas de síntesis	N ₂	3939.8	298	2964.7	3939.5	282.4	2964.7	-0.0076
	Ar	50.5			50.5			0.0000
	H ₂	11819.5			11818.0			-0.0127
	CH ₄	174.2			174.3			0.0574
	H ₂ O	0.0			2.1			**
	NH ₃	0.0			0.0			0.0000
TOTAL =		15984.0			15985.0			0.0063
Recirculación del circuito de síntesis	N ₂	11431.5	107	-----	11599.0	105.4	2955.0	1.4652
	Ar	2256.1			2237.3			-0.8333
	H ₂	34524.8			34542.0			0.0498
	CH ₄	7443.7			7874.7			5.7901
	H ₂ O	0.0			0.0			0.0000
	NH ₃	8462.3			8579.8			1.3885
TOTAL =		64118.4			64832.0			1.1129
Carga fresca + recirculación	N ₂	15371.3	137	-----	15538.0	134.6	2955.0	1.0845
	Ar	2306.6			2287.8			-0.8151
	H ₂	46344.3			46360.0			0.0339
	CH ₄	7617.9			8149.0			6.9717
	H ₂ O	0.0			2.1			**
	NH ₃	8462.3			8579.8			1.3885
TOTAL =		80102.4			80817.0			0.8921

Una corriente de corte converge cuando

$$-Tolerancia \leq \frac{X_{calculada} - X_{estimada}}{X_{estimada}} \leq Tolerancia$$

para todas las variables de la corriente (flujos molares de los componentes, presión, entalpía).

1.2) COMPARACIÓN DE LOS DATOS DE DISEÑO VS. LOS RESULTADOS OBTENIDOS CON AYUDA DEL SIMULADOR DE PROCESOS.

La simulación realizada de los Circuitos de Síntesis y Refrigeración de amoníaco produjeron resultados que presentan gran similitud con los datos de diseño. (Ver Tablas 3.4, 3.5, 3.6 y 3.7)

TABLA 3.4 CORRIENTES DEL PROCESO

Componente		DISEÑO			RESULTADO DE LA SIMULACIÓN			% de desviación del flujo molar
		FLUJO (mol/hr)	TEMP. (°F)	PRES. (psia)	FLUJO (mol/hr)	TEMP. (°F)	PRES. (psia)	
Carga fresca de gas de síntesis	N ₂	3939.8	298	2964.7	3939.5	282.4	2964.7	-0.0076
	Ar	50.5			50.5			0.0000
	H ₂	11819.5			11818.0			-0.0127
	CH ₄	174.2			174.3			0.0574
	H ₂ O	0.0			2.1			**
	NH ₃	0.0			0.0			0.0000
TOTAL =		15984.0			15985.0			0.0063
Recirculación del circuito de síntesis	N ₂	11431.5	107	-----	11599.0	105.4	2955.0	1.4652
	Ar	2256.1			2237.3			-0.8333
	H ₂	34524.8			34542.0			0.0498
	CH ₄	7443.7			7874.7			5.7901
	H ₂ O	0.0			0.0			0.0000
	NH ₃	8462.3			8579.8			1.3885
TOTAL =		64118.4			64832.0			1.1129
Carga fresca + recirculación	N ₂	15371.3	137	-----	15538.0	134.6	2955.0	1.0845
	Ar	2306.6			2287.8			-0.8151
	H ₂	46344.3			46360.0			0.0339
	CH ₄	7617.9			8149.0			6.9717
	H ₂ O	0.0			2.1			**
	NH ₃	8462.3			8579.8			1.3885
TOTAL =		80102.4			80817.0			0.8921

TABLA 3.4 (continuación)

		DISEÑO			RESULTADO DE LA SIMULACIÓN			
Componente		FLUJO (mol/hr)	TEMP. (°F)	PRES. (psia)	FLUJO (mol/hr)	TEMP. (°F)	PRES. (psia)	% de desviación del flujo molar
Alimentación al Convertidor de amoníaco	N ₂	15359.3	285	-----	15532.0	285	3144.7	1.1244
	Ar	2303.9			2284.6			-0.8377
	H ₂	46313.1			46336.0			0.0494
	CH ₄	7601.3			8041.5			5.7911
	H ₂ O	0.0			0.0			0.0000
	NH ₃	1270.1			1386.5			9.1646
TOTAL =		72847.7			73581.0			1.0066
Efluente del Convertidor de amoníaco	N ₂	11673.6	583	-----	11844.0	578.4	2965.0	1.4597
	Ar	2303.9			2284.6			-0.8377
	H ₂	35256.0			35273.0			0.0482
	CH ₄	7601.3			8041.5			5.7911
	H ₂ O	0.0			0.0			0.0000
	NH ₃	8641.5			8761.6			1.3898
TOTAL =		65476.3			66205.0			1.1129
Amoníaco líquido hacia circuito de refrigeración	N ₂	1.1	-8	354.7	0.8	-8	354.7	-27.2727
	Ar	0.3			1.0			233.3333
	H ₂	2.2			3.4			54.5455
	CH ₄	3.1			1.8			-41.9355
	H ₂ O	0.0			2.1			**
	NH ₃	7344.2			7348.7			0.0613
TOTAL =		7350.9			7357.9			0.0952
Purga total de gases a combustible	N ₂	254.1	-----	-----	252.2	68.5	300	-0.7477
	Ar	50.5			50.5			0.0000
	H ₂	762.4			757.4			-0.6558
	CH ₄	174.2			173.6			-0.3444
	H ₂ O	0.0			0.0			0.0000
	NH ₃	31.5			29.9			-5.0794
Total =		1272.7			1263.6			-0.7202
Amoníaco total producido	N ₂	0.0	28	384.7	0.0	30.4	384.7	0.0000
	Ar	0.0			0.0			0.0000
	H ₂	0.0			0.0			0.0000
	CH ₄	0.0			0.0			0.0000
	H ₂ O	0.0			2.1			**
	NH ₃	7339.9			7345.2			0.0722
TOTAL =		7339.9			7347.3			0.1008

* El porcentaje de desviación se calculó de la forma siguiente :

$$\frac{(\text{Flujo simulación} - \text{Flujo de diseño}) \times 100}{\text{Flujo de diseño}}$$

** La división entre cero es infinito, por lo que no se calculó ésta desviación.
 ----- No se tiene ese dato de diseño.

Las desviaciones más grandes pertenecen a los flujos pequeños de gases inertes, por lo que no representan errores considerables de la simulación, sino que son errores debidos a la convergencia de los Circuitos.

TABLA 3.5 POTENCIA DE COMPRESORES Y CONDICIONES INTERETAPAS

	a) COMPRESOR DE GAS DE SÍNTESIS		b) COMPRESOR DE AMONIACO	
	DISEÑO	SIMULACION	DISEÑO	SIMULACION
Potencia total (HP)=	30 100.0	29 392.7	13 285.5	13 154.52
Temperatura de las interetapas				
T1 (°F)	231.0	230.8	---	84.8
T2 (°F)	231.0	230.3	180.0	181.2
T3 (°F)	298.0	282.4	210.0	210.4
T4 (°F)	89.0	89.1	244.0	240.9

TABLA 3.6 CARGAS TÉRMICAS DE INTERCAMBIADORES
(BTU/HR) X 10⁶

CAMBIADOR *	DISEÑO	SIMULACION
136-C	5.3	5.4
170-C	9.9	9.8
116-C	15.2	15.0
129-C	6.6	6.4
124-C	18.3	19.6
140-C	19.7	15.4
117-C	31.2	34.2
118-C	22.4	24.1
119-C	19.6	20.7
120-C	40.9	40.8
121-C	109.7	111.4
123-C	152.0	149.1
139-C	0.85	0.90
125-C	1.69	1.71
167-C	3.2	3.1
128-C	9.7	9.0
127-C	121.5	118.5
126-C	1.4	1.2
CARGA	810.0	797.0
TOTAL=		

* Los cambiadores han sido listados en el orden en que aparecen en el Diagrama de Flujo de la Figura 2.2.

TABLA 3.7 CONDICIONES DE EQUILIBRIO DE LOS TANQUES DEL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN

TANQUE SEPARADOR	DISEÑO		SIMULACIÓN	
	temp (°F)	presión (psia)	temp (°F)	presión (psia)
109 - F	108.0	252.7	106.5	252.7
110 - F	69.0	126.5	68.8	127.0
141 - F	32	62.2	32.0	62.2
111 - F	0.0	30.4	0.6	30.4
112 - F	-28.0	14.9	-26.7	14.9

2) TRABAJO PERDIDO

El análisis desde el punto de vista termodinámico del proceso de producción de amoníaco, emplea ecuaciones que se derivan de la primera y segunda leyes de la termodinámica con el fin de poder calcular el *trabajo perdido*.

En los siguientes párrafos se describe brevemente el concepto de trabajo perdido y las ecuaciones que se emplean para su cálculo. No se hará la deducción de estas ecuaciones.⁽⁴⁾

2.1) BREVE INTRODUCCIÓN SOBRE EL CONCEPTO DE TRABAJO PERDIDO Y SUS FUNDAMENTOS

La energía que no puede ser utilizada para producir trabajo debido a las irreversibilidades en el esquema del proceso es llamada *trabajo perdido*. Se le define por la diferencia entre el trabajo real y el trabajo equivalente mínimo que requiere el proceso.

$${}^{\circ}W_{\text{perdido}} = {}^{\circ}W_{\text{real}} - {}^{\circ}W_{\text{e min.}} \quad (1)$$

⁽⁴⁾ La deducción de estas ecuaciones aparece en Smith, J. M. y Van Ness, H. C. *Introduction to chemical engineering thermodynamics* 1987, donde se emplea una nomenclatura de variables similar a la que aquí se presenta.

El trabajo equivalente mínimo (o energía mecánica equivalente) requiere para su cálculo únicamente las propiedades de las corrientes de entrada y salida del proceso.

$${}^{\circ}We_{\min} = \sum (h_{sal} - T_0 \cdot s_{sal}) \cdot M_{sal} - \sum (h_{ent} - T_0 \cdot s_{ent}) \cdot M_{ent} \quad (2)$$

El trabajo real puede calcularse como

$$We_{real} = {}^{\circ}W + {}^{\circ}Q (1 - T_0/T) \quad (3)$$

La Primera y Segunda Leyes de la Termodinámica quedan establecidas de la manera siguiente:

$${}^{\circ}W + {}^{\circ}Q = \sum (h_{sal}) \cdot M_{sal} - \sum (h_{ent}) \cdot M_{ent} \quad (\text{Primera Ley, régimen permanente})$$

$${}^{\circ}Q/T + ({}^{\circ}S_{gen})_{total} = \sum (s_{sal}) \cdot M_{sal} - \sum (s_{ent}) \cdot M_{ent} \quad (\text{Segunda Ley, régimen permanente})$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en la ecuación (3), obtenemos:

$${}^{\circ}We_{real} = \sum (h_{sal} - T_0 \cdot s_{sal}) \cdot M_{sal} - \sum (h_{ent} - T_0 \cdot s_{ent}) \cdot M_{ent} + T_0 \cdot ({}^{\circ}S_{gen})_{total} \quad (4)$$

lo que nos indica que el proceso real consume más energía.

La introducción de las expresiones (2) y (4) en la ecuación (1), permite obtener una ecuación para el cálculo del trabajo perdido en el proceso.

$${}^{\circ}W_{perdido} = T_0 \cdot ({}^{\circ}S_{gen})_{total} \quad (5)$$

A partir de la Segunda Ley de la Termodinámica, se establece que

$$({}^{\circ}S_{gen})_{total} \geq 0 \quad \text{y por lo tanto} \quad {}^{\circ}W_{perdido} \geq 0 \quad (6)$$

Las variables empleadas en las ecuaciones anteriores son :

${}^{\circ}We_{real}$ = flujo de trabajo real o trabajo equivalente real (BTU/hr)

${}^{\circ}We_{\min}$ = flujo de trabajo equivalente mínimo (BTU/hr)

${}^{\circ}W_{perdido}$ = flujo de trabajo perdido debido a irreversibilidades (BTU/hr)

$^{\circ}Q$ = flujo de calor (BTU/hr)
 $^{\circ}W$ = flujo de trabajo efectuado (BTU/hr)
 $(^{\circ}S_{gen})_{total}$ = flujo de generación total de entropía (BTU/hr $^{\circ}R$)
 M = flujo de materia (mol/hr)
 h = entalpía molar (BTU/mol)
 s = entropía molar (BTU/mol $^{\circ}R$)
 T_o = temperatura de referencia ($^{\circ}R$)
 T = temperatura externa al sistema ($^{\circ}R$)
 $^{\circ}$ significa flujo (a excepción de la temperatura $^{\circ}R$)
 Σ significa " la suma sobre las corrientes"

Cuando un proceso es completamente reversible (es decir, cuando los cambios de estado ocurren en gradientes infinitesimales y no existe fricción), se cumple la igualdad en las ecuaciones (6) y el trabajo perdido es cero. En procesos irreversibles, la desigualdad se cumple, y el trabajo perdido, es decir, la energía que no es posible convertir en trabajo, es positiva. Por lo tanto, cuanto más grande sea la irreversibilidad de un proceso, más grande será la rapidez de producción de entropía y más grande será la cantidad de energía que no puede ser convertida en trabajo.

El diseño final de un proceso depende grandemente de las cuestiones económicas, por lo que el costo de la energía se convierte en un factor importante. El análisis termodinámico de un proceso específico muestra la localización de las ineficiencias más grandes, y permite conocer los pasos del proceso que deben ser modificados o reemplazados para obtener alguna ventaja.

La entropía será generada cuando cualquier potencial de energía disminuya sin haberse producido algún trabajo o sin que alguna otra energía potencial haya sufrido un incremento equivalente.

Ejemplos de esto lo constituye la expansión libre adiabática (efecto Joule-Thompson) de una sustancia compresible: la entropía del gas siempre se incrementa cuando se expande en ausencia de un fuerza que oponga resistencia. El resultado neto de éste proceso que es

ciertamente irreversible, es el de reducir un potencial del sistema (su presión) para producir energía mecánica sin haber producido el trabajo que teóricamente se podía extraer.

De manera general, cuando un cambio irreversible dentro de un sistema conduce a la disminución de una energía potencial (tal como presión, temperatura, potencial eléctrico, etc.), sin transferir la mayor cantidad posible de energía a los alrededores, en la forma de trabajo, el resultado es trabajo perdido y generación de entropía.

La fricción es otro ejemplo de un proceso irreversible y disipatorio, donde el trabajo perdido se degrada en energía térmica.

2.2) EJEMPLO DE CÁLCULO DE TRABAJO PERDIDO PARA ALGUNOS DE LOS SISTEMAS QUE CONSTITUYEN LAS SECCIONES DE LA PLANTA BAJO ESTUDIO.

Los equipos de proceso de los Circuitos de Síntesis y Refrigeración fueron englobados en *sistemas* de 1, 2 ó 3 equipos, a los cuales les fueron realizados los cálculos que permitieran determinar la generación de entropía y el trabajo perdido (Ver Figura 3.2)

Los resultados que arrojó la simulación con respecto a las corrientes de proceso y condiciones de operación de los equipos fueron empleados para éstos cálculos. Los datos necesarios son :

- flujos (lbmol/hr) de entrada y salida de cada *sistema* (el cual debe tener fronteras bien definidas);
- temperatura (°F) de las corrientes que transfieren calor;
- entalpía (BTU/lbmol) de todas las corrientes de entrada y salida del sistema;
- entropía (BTU/lbmol °R) de todas las corrientes de entrada y salida del sistema,
- carga (BTU/hr) de los cambiadores y potencia de los compresores (HP), si es que los hay.

El algoritmo empleado para los cálculos se resume a continuación :

1) $\Delta H = (\Sigma M \cdot h)_{\text{salida}} - (\Sigma M \cdot h)_{\text{entrada}}$ definido como el cambio de entalpía

$\Delta S = (\Sigma M \cdot s)_{\text{salida}} - (\Sigma M \cdot s)_{\text{entrada}}$ definido como el cambio de entropía

2) Corroborar que

$$\Delta H = {}^\circ Q \text{ ó } \Delta H = {}^\circ W \text{ según el caso}$$

Si no existe la igualdad, considerar $({}^\circ Q + {}^\circ W)$ es el valor de ΔH .

3) *Trabajo equivalente mínimo*

$${}^\circ W_{e \text{ min}} = \Delta H - T_0 \Delta S$$

T_0 es una temperatura de referencia. En este caso se ha escogido como tal a la temperatura del agua de enfriamiento $= 90^\circ \text{F} = 549.67^\circ \text{R}$

4) *Trabajo real*

$${}^\circ W_{e \text{ real}} = {}^\circ W + {}^\circ Q (1 - T_0/T)$$

T es una temperatura promedio de la corriente que transfiere calor (corriente caliente, y por lo tanto ${}^\circ Q > 0$ porque entra al sistema; o corriente fría y por lo tanto ${}^\circ Q < 0$ porque sale del sistema).

La temperatura promedio se puede calcular de dos maneras dependiendo de los datos de que se disponga.

a) Temperatura media logarítmica

$$T_{\text{ml}} = \frac{T_{\text{salida}} - T_{\text{entrada}}}{\ln(T_{\text{salida}}/T_{\text{entrada}})} \quad (7)$$

b) Temperatura promedio (comportamiento real)

$$T_{prom} = \frac{(M \cdot h)_{salida} - (M \cdot h)_{entrada}}{(M \cdot s)_{salida} - (M \cdot s)_{entrada}} \quad (8)$$

La primera aproximación surge de considerar $C_p = \text{cte}$ (C_p es la capacidad calorífica de la mezcla a presión constante), entonces

$$\Delta H = M \cdot C_p \cdot (T_{salida} - T_{entrada}) \quad \Delta S = M \cdot C_p \cdot \ln T_{salida} / T_{entrada}$$

si $\Delta S = Q/T = \Delta H/T$, entonces

$$T = Q/\Delta S = \Delta H/\Delta S = \frac{M \cdot C_p \cdot (T_{salida} - T_{entrada})}{M \cdot C_p \cdot \ln (T_{salida} / T_{entrada})}$$

y por lo tanto

$$T_{nl} = \frac{T_{salida} - T_{entrada}}{\ln T_{salida} / T_{entrada}}$$

Si el C_p no es constante, la temperatura promedio se calcula con la ecuación (8)

5) *Generación de entropía*

$$({}^\circ S_{gen})_{total} = \Delta S - {}^\circ Q/T$$

6) *Trabajo perdido*

$${}^\circ W_{perdido} = T_0 \cdot ({}^\circ S_{gen})_{total}$$

7) Corroborar el valor del trabajo real

$${}^\circ W_{real} = {}^\circ W_{min} + {}^\circ W_{perdido}$$

A manera de ejemplo se desglosan los cálculos para algunos de los *sistemas* que conforman los Circuitos de Síntesis y Compresión. Estos sistemas se encuentran señalados en la Figura 3.2

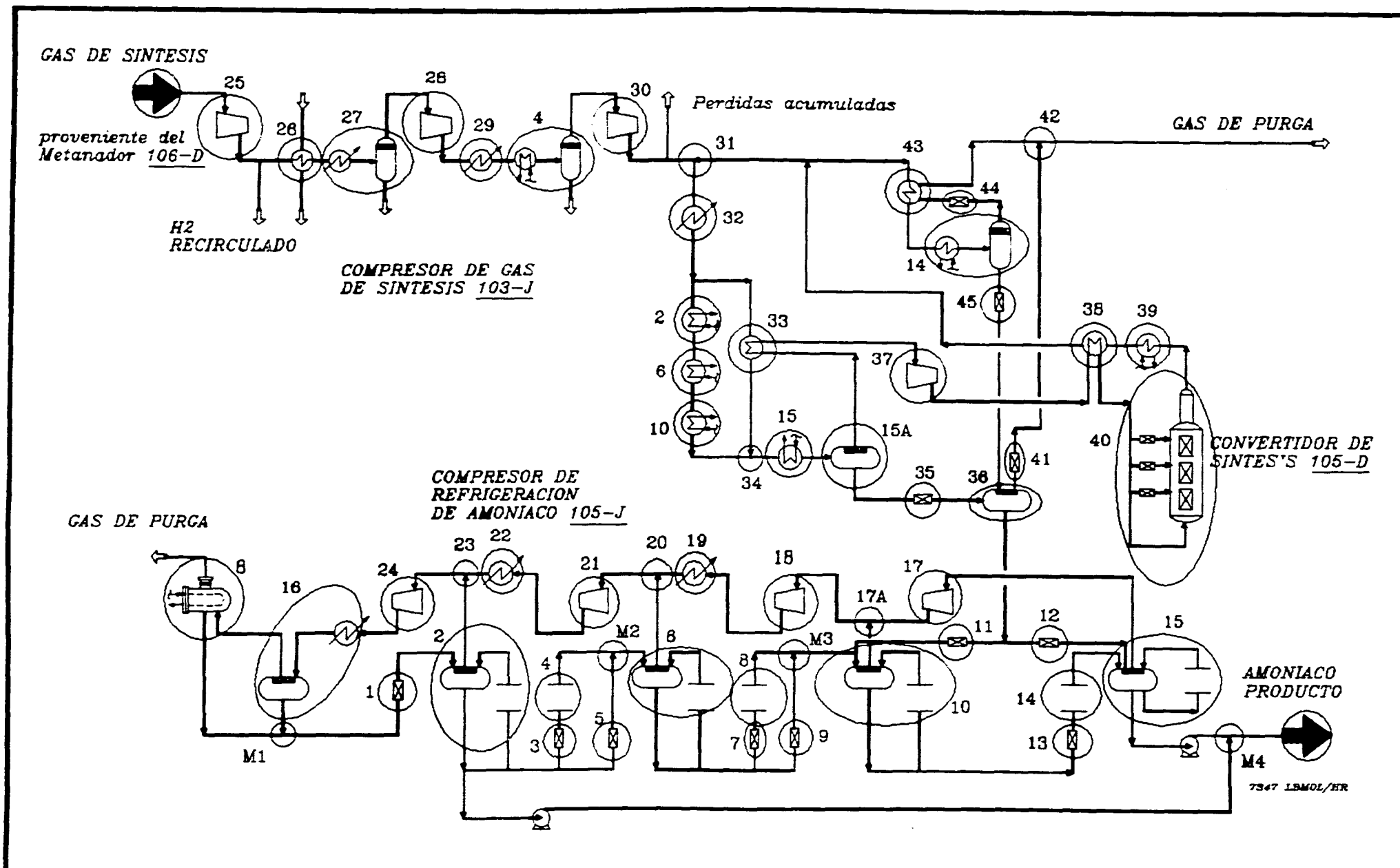
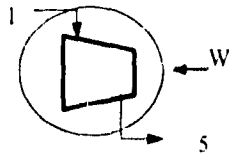


FIGURA No. 3.2 SISTEMAS PARA EL CALCULO DE TRABAJO PERDIDO

DIAGRAMA DE FLUJO DE LAS SECCIONES DE SINTESIS Y REFRIGERACION DE AMONIACO

Sistema 25



	Corriente 1	Corriente 5
Flujo (lbmol/hr)	16336.0	16336.0
Entalpía (BTU/lbmol)	-459.52	464.58
Entropía (Btu/lbmol °R)	-5.17	-4.78
Temperatura (° F)	100	230.8

${}^{\circ}Q = 0 \text{ BTU/hr}$

${}^{\circ}W = 5933.02 \text{ HP} = 15'096'467.24 \text{ BTU/hr}$

Paso 1, diferencia de entalpía y entropía

$\Delta H = 15'095'997.9504 \text{ BTU/hr}$

$\Delta S = 6'289.36 \text{ BTU/hr }^{\circ}\text{R}$

Paso 2

Considerar que $\Delta H = {}^{\circ}W$

Paso 3, trabajo equivalente mínimo

${}^{\circ}W_{e \text{ min}} = 11'639'394.72 \text{ BTU/hr}$

Paso 4, trabajo real

${}^{\circ}W_{e \text{ real}} = 15'096'467.24 \text{ BTU/hr}$

Paso 5, generación de entropía

$({}^{\circ}S_{\text{gen}})_{\text{total}} = 6'289.36 \text{ BTU/hr }^{\circ}\text{R}$

Paso 6, trabajo perdido

${}^{\circ}W_{\text{perdido}} = 3'457'072.51 \text{ BTU/hr}$

Paso 7, corroborar paso 3

${}^{\circ}W_{e \text{ real}} = 15'096'467.24 \text{ BTU/hr}$

Sistema 22



	Corriente 52	Corriente 53	Corriente agua de enfriamiento entrada	Corriente agua de enfriamiento salida
Flujo (lbmol/hr)	9600.49	9600.49	---	---
Entalpia (BTU/lbmol)	-18635.00	-19567.00	---	---
Entropia (Btu/lbmol °R)	-26.23	-27.66	---	---
Temperatura (° F)	210.4	110.0	90	110

$${}^{\circ}Q = -8.9494E6 \text{ BTU/hr}$$

$${}^{\circ}W = 0 \text{ BTU/hr}$$

Paso 1, diferencia de entalpia y entropia

$$\Delta H = -8'947'654.00 \text{ BTU/hr}$$

$$\Delta S = -13'763.26 \text{ BTU/hr }^{\circ}R$$

Paso 2

$$\text{Considerar que } \Delta H = {}^{\circ}Q$$

Paso 3, trabajo equivalente mínimo

$${}^{\circ}W_{e \text{ min}} = -1'384'149.81 \text{ BTU/hr}$$

Paso 4, trabajo real

$${}^{\circ}W_{e \text{ real}} = -158'968.84 \text{ BTU/hr}$$

$$T_{ml} = 559.61 \text{ }^{\circ}R$$

Paso 5, generaci3n de entropia

$$({}^{\circ}S_{gen}) \text{ total} = 2'228.94 \text{ BTU/hr }^{\circ}R$$

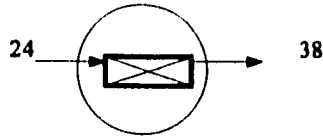
Paso 6, trabajo perdido

$${}^{\circ}W_{\text{perdido}} = 1'225'180.97 \text{ BTU/hr}$$

Paso 7, corroborar paso 3

$${}^{\circ}W_{e \text{ real}} = -158'968.84 \text{ BTU/hr}$$

Sistema 35



	Corriente 24	Corriente 38
Flujo (lbmol/hr)	7237.94	7237.94
Entalpia (BTU/lbmol)	-30262.00	-30262.00
Entropia (Btu/lbmol °R)	-48.64	-48.09
Temperatura (° F)	-10	-1.6

$^{\circ}Q = 0 \text{ BTU/hr}$
 $^{\circ}W = 0 \text{ BTU/hr}$

Paso 1, diferencia de entalpia y entropia

$\Delta H = -907'391.31 \text{ BTU/hr}$
 $\Delta S = -2'005.15 \text{ BTU/hr } ^{\circ}\text{R}$

Paso 2

Considerar que $\Delta H = ^{\circ}W$

Paso 3, trabajo equivalente mínimo

$^{\circ}W_{e \text{ min}} = 1'102'173.21 \text{ BTU/hr}$

Paso 4, trabajo real

$^{\circ}W_{e \text{ real}} = 0.0 \text{ BTU/hr}$

Paso 5, generación de entropía

$(^{\circ}S_{\text{gen}})_{\text{total}} = -2'005.15 \text{ BTU/hr } ^{\circ}\text{R}$

Paso 6, trabajo perdido

$^{\circ}W_{\text{perdido}} = -1'102'173.21 \text{ BTU/hr}$

Paso 7, corroborar paso 3

$^{\circ}W_{e \text{ real}} = 0.0 \text{ BTU/hr}$

2.3) IDENTIFICACIÓN DE LAS ZONAS QUE PRESENTAN LA MAYOR CANTIDAD DE TRABAJO PERDIDO Y ANÁLISIS DE LAS CAUSAS.

En la Tabla 3.8 se encuentran los resultados de generación de entropía y trabajo perdido. También se encuentra listado el porcentaje con que contribuye cada sistema al trabajo perdido total de las Secciones de Síntesis y Compresión de amoníaco de la planta. Adicionalmente se tabulan los valores de $^{\circ}Q$ y $^{\circ}W$ así como el resultado de los cálculos de ΔH , ΔS , $^{\circ}W_{e \text{ min}}$, y $^{\circ}W_{e \text{ real}}$.

Los sistemas cuyo trabajo perdido es grande presentan alguno de los siguientes tipos de irreversibilidades :

- a) Manejo de gran volumen
- b) Cambiadores con gran ΔT
- c) Mezcla de corrientes a distinta temperatura, presión y composición
- d) Expansión súbita
- e) Compresión de gases con baja eficiencia
- f) Reacción química

La mayor contribución al trabajo perdido está dada por el Convertidor de Síntesis (sistema 40 de la Figura 3.2), cuya reacción química exotérmica provoca una gran diferencia de temperaturas de las corrientes influente y efluente. Adicionalmente, existen caídas de presión entre las camas catalíticas del reactor. Sin embargo, la contribución más importante se debe a la reacción química misma, la cual está alejada del equilibrio.

Siguen en orden de importancia los compresores de gas de síntesis y de amoníaco con respecto a su contribución al trabajo perdido total. Las principales causas de irreversibilidad son su baja eficiencia y el hecho de que manejan grandes volúmenes de gas. El tener interenfriamientos entre las etapas de compresión permite condensar y eliminar agua (en el caso del compresor de gas de síntesis), y reducir el volumen manejado (al disminuir la

temperatura de los gases); por lo tanto la potencia requerida para comprimirlo disminuye, tal como se puede apreciar en los gráficos de Presión vs. Entalpía para cada compresor (Ver Casos de Estudio A y H del Capítulo IV)

Los cambiadores que emplean agua de enfriamiento (o agua para calderas) para retirar calor cuentan con un ΔT (o aproximación de temperaturas) grande. Los cambiadores con refrigerante de amoníaco también presentan aproximaciones de temperatura grandes, con lo que la transferencia de calor produce gran irreversibilidad.

La mezcla de corrientes a diferentes condiciones, tales como: la "carga fresca" de gas de síntesis más la recirculación, y los gases de purga también presentan una cantidad de trabajo perdido considerable. Finalmente las expansiones súbitas sin recuperación de trabajo (en una turbina, por ejemplo) generan gran entropía.

Debe hacerse notar que existe un sistema, el 36, que engloba al tanque separador 107-F, donde se reporta una generación de entropía y trabajo perdido negativos. Esto no es posible tal como se establece en la introducción del concepto de trabajo perdido. La razón de éstos resultados se deben a errores de convergencia que presenta el simulador, y que se hacen más perceptibles en éste equipo en particular.

A pesar de que los resultados de la simulación presentan valores muy cercanos a los de diseño de la planta, los errores de convergencia se pueden apreciar en los valores de ΔH , $^{\circ}Q$ y $^{\circ}W$ de la Tabla 3.8. Para que se cumpla el balance de energía (1ª Ley de la Termodinámica), a régimen permanente

$$^{\circ}Q + ^{\circ}W + \Sigma(h_{\text{entrada}} \cdot M_{\text{entrada}}) = \Sigma(h_{\text{salida}} \cdot M_{\text{salida}})$$

de donde obtenemos $\Delta H_{\text{total}} = ^{\circ}Q + ^{\circ}W$

De la Tabla 3.8. puede verse que $(^{\circ}Q + ^{\circ}W)$ no siempre dan como resultado exactamente ΔH . Es aquí donde puede verse el error de convergencia que presenta el simulador.

TABLA 3.8 CÁLCULO DE TRABAJO PERDIDO

SISTEMA	$\Delta H(\text{BTU/hr})$ $\cdot 10^{-3}$	$\Delta S(\text{BTU/hr})$ $\cdot 10^{-3}$	$Q(\text{BTU/hr})$ $\cdot 10^{-6}$	$W(\text{BTU/hr})$ $\cdot 10^{-6}$	We min (BTU/hr) $\cdot 10^{-6}$	We real (BTU/hr) $\cdot 10^{-6}$
1	0	0.971	0	0	-0.534	
2	-7.784	1.257	0	0	-0.691	
3	0	0.045	0	0	-0.025	
4	0.026	1.168	0	0	-0.642	
5	0	0.315	0	0	-0.173	
6	0.156	4.061	0	0	-2.232	
7	0	0.005	0	0	-0.003	
8	-0.029	0.437	0	0	-0.240	
9	0	0.030	0	0	-0.017	
10	-1.074	2.989	0	0	-1.643	
11	0	0.152	0	0	-0.083	
12	0	0.554	0	0	-0.305	
13	0	0.003	0	0	-0.002	
14	0.210	0.484	0	0	-0.266	
15	-2.005	3.103	0	0	-1.706	
15A	105.456	2.826	0	0	-1.553	
16	-118.852E3	-204.636	-118.510	0	-6.027	-1.58
17	2.183E3	1.154	0	2.182	1.547	2.18
17A	-0.592	0.150	0	0	-0.083	
18	5.812E3	2.614	0	5.813	4.376	5.81
19	-3.135E3	-4.451	-3.138	0	-0.692	-0.05
20	-5.042	0.237	0	0	-0.130	
21	11.146E3	4.781	0	11.114	8.486	11.11
22	-8.947E3	-13.763	-8.949	0	-1.384	-0.15
23	-5.094	0.057	0	0	-0.031	
24	14.334E3	5.863	0	14.332	11.109	14.33
M1	14.566	0.041	0	0	-0.022	
M2	-1.613	0	0	0	0	
M3	0.109	0	0	0	0	
M4	-3.323	0.694	0	0	-0.382	
25	15.096E3	6.289	0	15.096	11.639	15.09

TABLA 3.8 CÁLCULO DE TRABAJO PERDIDO

U/hr) -3	Q (BTU/hr) *10 ⁻⁶	W (BTU/hr) *10 ⁻⁶	We min (BTU/hr) *10 ⁻⁶	We real (BTU/hr)*10 ⁻⁶	S gen (BTU/hr°R)*10 ⁻³	Wp (BTU/hr) *10 ⁻⁶	% Wp total
0.971	0	0	-0.534	0	0.971	0.534	0.4325
1.257	0	0	-0.691	0	1.257	0.691	0.5597
0.045	0	0	-0.025	0	0.045	0.025	0.0202
1.168	0	0	-0.642	0	1.168	0.642	0.5200
0.315	0	0	-0.173	0	0.315	0.173	0.1401
4.061	0	0	-2.232	0	4.061	2.232	1.8079
0.005	0	0	-0.003	0	0.005	0.003	0.0024
0.437	0	0	-0.240	0	0.437	0.240	0.1944
0.030	0	0	-0.017	0	0.030	0.017	0.0138
2.989	0	0	-1.643	0	2.989	1.643	1.3308
0.152	0	0	-0.083	0	0.152	0.083	0.0672
0.554	0	0	-0.305	0	0.554	0.305	0.2470
0.003	0	0	-0.002	0	0.003	0.002	0.0016
0.484	0	0	-0.266	0	0.484	0.266	0.2155
3.103	0	0	-1.706	0	3.103	1.706	1.3818
2.826	0	0	-1.553	0	2.826	1.553	1.2579
04.636	-118.510	0	-6.027	-1.588	8.076	4.439	3.5956
1.154	0	2.182	1.547	2.182	1.154	0.634	0.5135
0.150	0	0	-0.083	0	0.150	0.083	0.0672
2.614	0	5.813	4.376	5.813	2.614	1.437	1.1640
-4.451	-3.138	0	-0.692	-0.056	1.157	0.636	0.5152
0.237	0	0	-0.130	0	0.237	0.130	0.1053
4.781	0	11.114	8.486	11.114	4.781	2.628	2.1287
13.763	-8.949	0	-1.384	-0.159	2.229	1.225	0.9922
0.057	0	0	-0.031	0	0.057	0.031	0.0251
5.863	0	14.332	11.109	14.332	5.862	3.222	2.6098
0.041	0	0	-0.022	0	0.041	0.022	0.0178
0	0	0	0	0	0	0	0.0000
0	0	0	0	0	0	0	0.0000
0.694	0	0	-0.382	0	0.694	0.382	0.3094
6.289	0	15.096	11.639	15.096	6.289	3.457	2.8001

TABLA 3.8 CÁLCULO DE TRABAJO PERDIDO *continuación*

SISTEMA	ΔH (BTU/hr) *10 ⁻³	ΔS (BTU/hr) *10 ⁻³	Q (BTU/hr) *10 ⁻⁶	W (BTU/hr) *10 ⁻⁶	We min (BTU/hr) *10 ⁻⁶	We real (BTU/hr)*10 ⁻⁶	(E
26	-1.872	0.979	0	0	-0.538	0	
27	-9.804E3	-16.113	-9.804	0	-0.947	-0.258	
28	14.941E3	6.230	0	14.941	11.517	14.941	
29	-15.049E3	-24.045	-15.049	0	-1.832	-0.396	
30	28.077E3	11.106	0	28.078	21.973	28.078	
31	-0.990	11.171	0	0	-6.140	0	
32	-19.655E3	-33.636	-19.656	0	-1.167	-0.517	
33	16.188	5.991	0	0	-3.293	0	
34	0.419	0.201	0	0	-0.111	0	
35	0	3.939	0	0	-2.165	0	
36	-907.391	-2.005	0	0	1.102	0	
37	16.672E3	16.018	0	16.672	7.867	16.672	
38	1.496	5.433	0	0	-2.986	0	
39	-149.086E3	-166.161	-149.090	0	-57.756	-52.030	
40	1.467	92.336	0	0	-50.755	0	
41	-0.002	0.013	0	0	-0.007	0	
42	-0.001	2.539	0	0	-1.396	0	
43	0.012	0.236	0	0	-0.130	0	
44	0.0	3.119	0	0	-1.715	0	
45	0	0.088	0	0	-0.049	0	

TABLA 3.8 CÁLCULO DE TRABAJO PERDIDO *continuación*

Q (BTU/hr) *10 ⁻⁶	W (BTU/hr) *10 ⁻⁶	We min (BTU/hr) *10 ⁻⁶	We real (BTU/hr)*10 ⁻⁶	S gen (BTU/hr°R)*10 ⁻³	Wp (BTU/hr) *10 ⁻⁶	% Wp total
0	0	-0.538	0	0.979	0.538	0.4358
-9.804	0	-0.947	-0.258	1.254	0.689	0.5581
0	14.941	11.517	14.941	6.230	3.424	2.7734
-15.049	0	-1.832	-0.396	2.611	1.436	1.1631
0	28.078	21.973	28.078	11.106	6.105	4.9450
0	0	-6.140	0	11.171	6.140	4.9734
-19.656	0	-1.167	-0.517	1.182	0.649	0.5257
0	0	-3.293	0	5.991	3.293	2.6673
0	0	-0.111	0	0.201	0.111	0.0899
0	0	-2.165	0	3.939	2.165	1.7536
0	0	1.102	0	-2.005	-1.102	-0.8926
0	16.672	7.867	16.672	16.018	8.805	7.1320
0	0	-2.986	0	5.433	2.986	2.4186
-149.090	0	-57.756	-52.030	10.417	5.726	4.638
0	0	-50.755	0	92.336	50.755	41.1111
0	0	-0.007	0	0.013	0.007	0.0057
0	0	-1.396	0	2.539	1.396	1.1307
0	0	-0.130	0	0.236	0.130	0.1053
0	0	-1.715	0	3.119	1.715	1.3891
0	0	-0.049	0	0.088	0.049	0.0397
				TOTAL =	123.4580	100.0000

CAPÍTULO IV

CASOS DE ESTUDIO

IV CASOS DE ESTUDIO

INTRODUCCIÓN A LAS CASOS DE ESTUDIO PARA LAS VARIABLES DE OPERACIÓN DE LAS SECCIONES DE LA PLANTA.

A partir de los resultados obtenidos en el cálculo del trabajo perdido y su análisis se propone realizar CASOS DE ESTUDIO, es decir, variar las condiciones de operación (temperaturas, presiones, flujos y composiciones) dentro de un rango establecido, de las diversas zonas que conforman los Circuitos de Síntesis y Refrigeración de la planta de Amoníaco con el fin de conocer el efecto que tienen éstas variaciones en el consumo de potencia de los compresores y en la cantidad de trabajo perdido que se genera.

Los casos que se estudiarán son:

1. Caso A. *Análisis del compresor de gas de síntesis*
2. Caso B. *Análisis de la presión en el Circuito de Síntesis*
3. Caso C. *Análisis de la composición de metano en el Circuito de Síntesis*
4. Caso D. *Análisis de la conversión del Reactor*
5. Caso E. *Análisis de la purga del Circuito de Síntesis*
6. Caso F. *Análisis de la alimentación de amoníaco líquido al Circuito de Refrigeración*
7. Caso G. *Análisis de la cantidad de amoníaco líquido presente en el Circuito de Refrigeración*
8. Caso H. *Análisis de las temperaturas de condensación de amoníaco en el Circuito de Síntesis*
9. Caso I. *Análisis de las presiones de equilibrio del Circuito de Refrigeración de amoníaco*
10. Caso J. *Análisis del efecto combinado de las temperaturas de condensación de amoníaco en el Circuito de Síntesis y las presiones de equilibrio en el Circuito de Refrigeración.*
11. Caso K. *Análisis de la alimentación de la "carga fresca" directamente al Convertidor de síntesis de amoníaco*
12. Caso L. *Análisis de la introducción de una turbina para recuperar trabajo, en la expansión de los gases purgados.*

CASO A. ANÁLISIS DEL COMPRESOR DE GAS DE SÍNTESIS

El caso de estudio para el compresor de gas de síntesis consiste en la variación de las relaciones de compresión de cada una de las tres etapas (se excluye la última etapa de compresión de gas recirculado).

El compresor cuenta con enfriamiento entre las etapas, lo que ayuda a disminuir el volumen manejado y por ende, la potencia del compresor. En la etapa 1 el enfriamiento se obtiene del intercambio de calor primeramente con una corriente de proceso y después con agua de enfriamiento. En la segunda etapa se logra un enfriamiento mayor empleando agua de enfriamiento y posteriormente amoníaco a 32°F proveniente del Circuito de Refrigeración.

Una heurística de diseño, nos indica que para minimizar el trabajo en los compresores multietapas, deben emplearse relaciones de compresión ($P_{\text{salida}} / P_{\text{entrada}}$) iguales para cada una de las etapas, cuando los interenfriadores operan a la misma temperatura de salida del gas, y éste no se aleja mucho del comportamiento de gas ideal. Sin embargo, tal como se puede ver en el CASO A.2 de la Tabla 4.1, relaciones de compresión desiguales disminuyen la potencia requerida. Esto es debido principalmente al interenfriamiento a la salida de la segunda etapa a una temperatura menor que las otras etapas, lo que permite que la relación de compresión empleada en la última etapa sea mayor.

En el CASO A.2 el trabajo de compresión disminuye un 0.37 % con respecto a la compresión con relaciones iguales (CASO A.1), además las cargas térmicas de los interenfriadores también disminuyen, lo que se traduce en un menor requerimiento tanto de agua de enfriamiento como de refrigerante.

El interenfriamiento además permite condensar y remover el agua presente en la corriente de proceso. Previo a la succión de la 3ª etapa de compresión, el enfriamiento de la corriente hasta 46°F (con refrigerante de amoníaco) permite condensar el 89.9% del agua

presente, mientras que el enfriamiento con agua (hasta 100°F) a la salida de la primera etapa de compresión sólo permite remover el 46.5% del agua de la corriente.

La Figura 4.2 ilustra a través de un diagrama Presión-Entalpia las rutas que sigue la compresión en el CASO A.2. Los puntos señalados del 1 al 10, coinciden con las corrientes señaladas en la Figura 4.1 para referencia

TABLA 4.1 (CASO A) ANALISIS DEL COMPRESOR DE GAS DE SÍNTESIS

	CASO A.1	CASO A.2 (DISEÑO)	CASO A.3
Presión de salida ETAPA 1 (P1, psia)	756	657	611
Presión de salida ETAPA 2 (P2, psia)	1497	1105	977
Presión de salida ETAPA 3 (P3, psia)	2965	2965	2965
<i>RELACIONES DE COMPRESIÓN :</i>			
P1/P0*	1.9804	1.7212	1.6000
P2/P1	1.9804	1.6819	1.6000
P3/P2	1.9804	2.6830	3.0340
<i>TEMPERATURA DE SALIDA DE CADA ETAPA DE COMPRESIÓN (°F)</i>			
ETAPA 1	268.1	230.8	211.9
ETAPA 2	273.6	230.3	217.6
ETAPA 3	201.7	282.4	314.9
<i>TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP)</i>			
ETAPA 1	7633.7	5933.0	5076.0
ETAPA 2	7894.7	5872.1	5282.4
ETAPA 3	7375.4	11 035.1	12 568.8
HP TOTAL =	22 903.8	22 840.3	22 927.2
<i>CARGAS TÉRMICAS DE LOS INTERENFRIADORES (BTU/HR)x10⁻⁶</i>			
136-C	5.4	5.4	5.4
170-C	14.1	9.8	7.6
116-C	20.1	15.0	13.6
129-C	6.6	6.4	6.5
Comentarios:	RELACIONES DE COMPRESIÓN IGUALES	RELACIONES DE COMPRESIÓN DISTINTAS	RELACIONES DE COMPRESIÓN DISTINTAS

*Po es la presión de entrada al compresor=382 psia

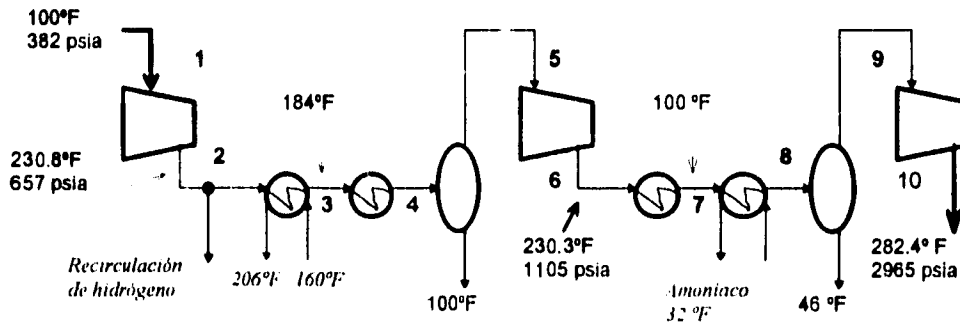
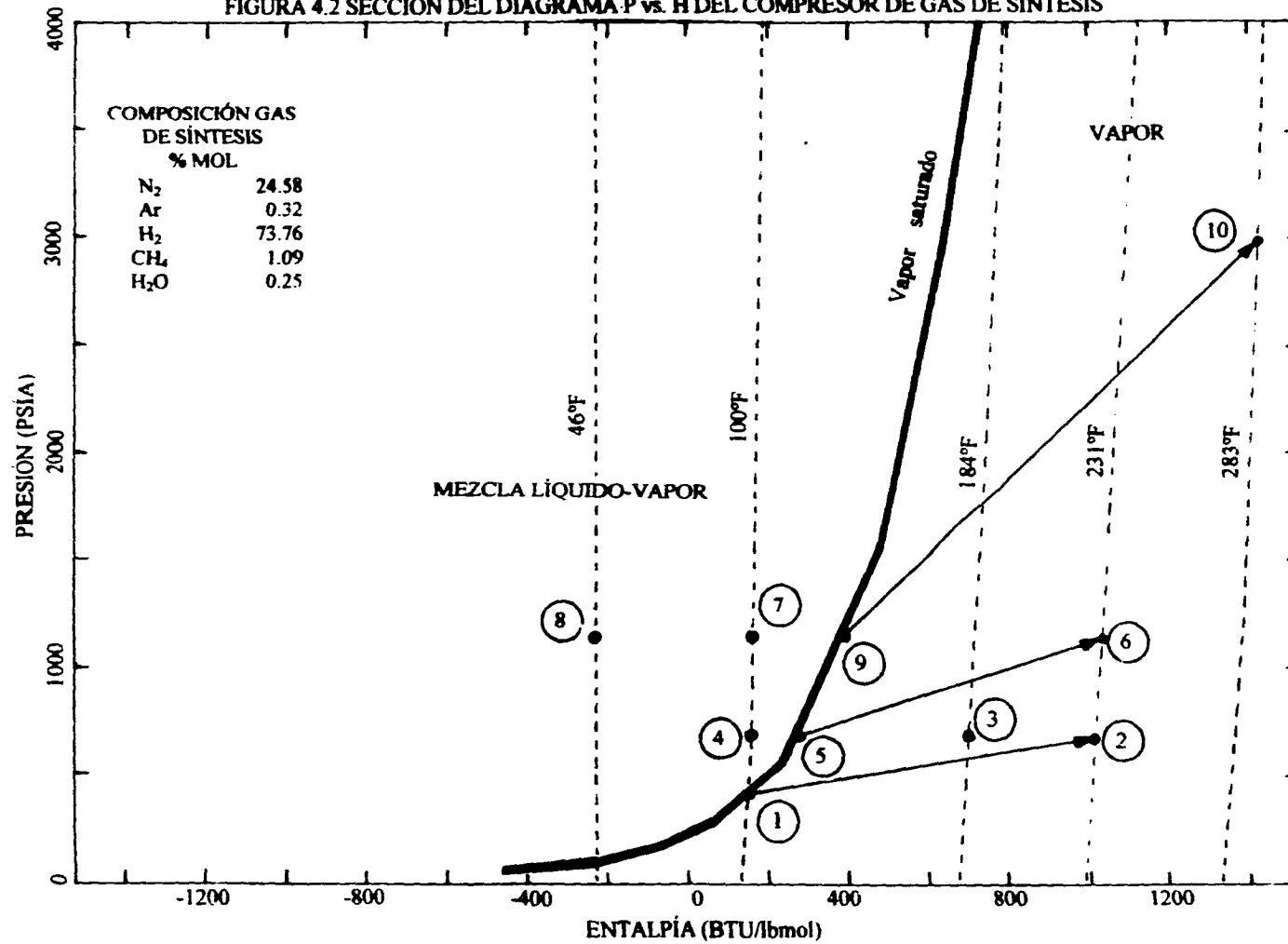


FIGURA 4.1 ESQUEMA DEL COMPRESOR DE GAS DE SÍNTESIS (CASO A)

FIGURA 4.2 SECCIÓN DEL DIAGRAMA P vs. H DEL COMPRESOR DE GAS DE SÍNTESIS



CASO B. ANÁLISIS DE LA PRESIÓN EN EL CIRCUITO DE SÍNTESIS

Este caso de estudio consistió en la variación de la presión a lo largo del Circuito de Síntesis, para conocer su efecto en la operación de los Circuitos. A partir de los resultados obtenidos, que se encuentran en la Tabla 4.3, se llegó a las siguientes conclusiones :

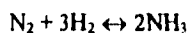
- A presiones altas, se requiere menor servicio de enfriamiento, debido a que el amoníaco producido condensa a temperatura ambiente (70 - 80°F)

TABLA 4.2 CONDENSACIÓN DE AMONÍACO A DIFERENTES PRESIONES

VARIACIÓN EN LA PRESIÓN	FRACCIÓN DE LÍQUIDO CONDENSADO EN LOS CAMBIADORES				
	140-C	117-C	118-C	120-C	119-C
- 30 PSIA	0.0075	0.0563	0.0802	0.0796	0.0800
+ 30 PSIA	0.0151	0.0593	0.0811	0.0812	0.0898
+ 100 PSIA	0.0214	0.0617	0.0818	0.0826	0.0898

- El aumentar la presión del circuito de síntesis se traduce en un mayor trabajo de compresión de la tercera etapa, sin embargo la potencia de la etapa de recirculación disminuye, así como la potencia del compresor de refrigeración.

Las presiones altas favorecen la reacción de síntesis de amoníaco, ya que ésta conlleva una reducción del volumen. De la expresión de equilibrio para la reacción tenemos



$$K_p = \frac{X_{\text{NH}_3}^2 \cdot P^2}{(X_{\text{N}_2} \cdot P) (X_{\text{H}_2}^3 \cdot P^3)}$$

que resolviendo para X_{NH_3}

$$X_{\text{NH}_3} = X_{\text{N}_2}^{1/2} \cdot X_{\text{H}_2}^{3/2} \cdot K_p^{1/2} \cdot P$$

Lo que indica que a presiones mayores la fracción de amoníaco producido crece. Adicionalmente en plantas de gran capacidad, las presiones altas permiten reducir el tamaño del equipo del Circuito, especialmente del *Convertidor*.

Debido a que no se realizó una simulación rigurosa del *Convertidor* de síntesis de amoníaco, no es posible ver el efecto que en la producción de amoníaco causa un aumento o disminución de presión dentro del circuito.

En la Tabla 4.3. se presenta el *caso base*⁽⁵⁾ (es decir, la simulación que se realizó con los condiciones de diseño tanto para corrientes de proceso como para los equipos), en conjunto con los casos de estudio con fines comparativos.

De hacerse notar que para éste caso de variación de presión, únicamente la 3ª y 4ª etapas de compresión de gas de síntesis presentan variación en la potencia consumida (HP), por lo que se encuentran en la Tabla 4.3, (la primera y segunda etapas permanecen sin cambio.).

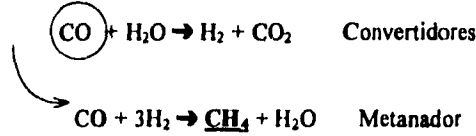
⁽⁵⁾ Los resultados del *caso base* se tabularán siempre para cada Caso de Estudio.

TABLA 4.3. (CASO B) ESTUDIO DE LA PRESIÓN EN EL CIRCUITO DE SÍNTESIS
(presiones en psia)

	CASO BASE	CASO B.1 (+10 PSIA)	CASO B.2 (+ 30 PSIA)	CASO B.3 (+ 100 PSIA)	CASO B.4 (- 10 PSIA)	CASO B.5 (-30 PSIA)	CASO B.6 (-100 PSIA)
Presión de entrada al compresor	382	392	412	482	372	352	282
Presión de salida del compresor	2965	3042	3198	3741	2887	2732	2188
<i>Pres. 1ª Etapa</i>	<i>657</i>	<i>674</i>	<i>708</i>	<i>829</i>	<i>640</i>	<i>605</i>	<i>485</i>
<i>Pres. 2ª Etapa</i>	<i>1105</i>	<i>1134</i>	<i>1192</i>	<i>1395</i>	<i>1076</i>	<i>1018</i>	<i>815</i>
<i>Pres. 3ª Etapa</i>	<i>2965</i>	<i>3042</i>	<i>3197</i>	<i>3741</i>	<i>2887</i>	<i>2732</i>	<i>2188</i>
<i>Pres. 4ª Etapa</i>	<i>3150</i>	<i>3227</i>	<i>3383</i>	<i>3926</i>	<i>3072</i>	<i>2916</i>	<i>2373</i>
<i>Pres. flash 106-F</i>	<i>2885</i>	<i>2962</i>	<i>3118</i>	<i>3661</i>	<i>2807</i>	<i>2652</i>	<i>2108</i>
<i>Pres. Reactor</i>	<i>2965</i>	<i>3042</i>	<i>3198</i>	<i>3741</i>	<i>2887</i>	<i>2732</i>	<i>2188</i>
<i>Pres. flash 102-F</i>	<i>2945</i>	<i>3022</i>	<i>3178</i>	<i>3721</i>	<i>2867</i>	<i>2711</i>	<i>2168</i>
<i>CARGA TÉRMICA CAMBIADORES DEL CIRCUITO DE SÍNTESIS (BTU/hr) X 10⁻⁶</i>							
124-C	19.66	19.32	18.73	17.01	20.01	20.78	24.44
140-C	15.44	15.87	16.68	18.80	14.97	13.92	10.94
117-C	34.24	33.92	33.32	31.66	34.58	35.33	36.71
118-C	24.08	23.93	23.65	22.89	24.24	24.59	26.26
119-C	20.73	20.57	20.25	19.28	20.90	21.25	22.73
<i>TRABAJO COMPRESIÓN DE AMONIACO (HP)</i>							
1ª Etapa	857.5	851.5	840.1	804.6	863.6	876.2	938.5
2ª Etapa	2284.7	2270.0	2241.9	2158.7	2300.2	2333.4	2506.8
3ª Etapa	4379.8	4349.1	4291.0	4124.7	4412.4	4483.3	4753.3
4ª Etapa	5632.5	5620.5	5597.1	5521.2	5644.7	5670.2	5810.6
<i>TRABAJO COMPRESIÓN DE GAS DE SÍNTESIS (HP)</i>							
3ª Etapa	11035.1	11054.7	11094.3	11237.6	11015.8	10977.8	10853.4
4ª Etapa	6552.4	6406.0	6134.2	5367.2	6707.1	7046.2	8617.6
TRABAJO DE COMPRESIÓN TOTAL =	30742.0	30551.8	30198.6	29214.2	30943.8	31387.2	33480.3

CASO C. ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN DE METANO EN EL CIRCUITO DE SÍNTESIS

Un mal funcionamiento de los *Convertidores de CO* de alta y baja temperatura puede provocar una alta concentración de metano en el circuito de síntesis



Los efectos detectados en la variación del metano presente en el gas de síntesis se encuentran listados en la Tabla 4.5

El análisis presenta dos casos el primero suponiendo que no entra nada de metano al circuito (CASO C.1). En este caso, siendo menor el volumen de gases manejados, se reducen los requerimientos de potencia de los compresores de los dos Circuitos. Sin embargo se disuelve una cantidad mayor de gases inertes en el amoníaco

En ausencia de metano, se favorece la condensación de amoníaco

TABLA 4.4 CONDENSACIÓN DE AMONÍACO CON RESPECTO A LA CANTIDAD DE METANO PRESENTE EN EL CIRCUITO

% METANO PRESENTE	FRACCIÓN DE LÍQUIDO CONDENSADO EN LOS CAMBIADORES				
	140-C	117-C	118-C	120-C	119-C
0.0	0.0268	0.0703	0.0916	0.0848	0.1000
1.0	0.0159	0.0579	0.0806	0.0804	0.0897
2.0	0.0011	0.0490	0.0728	0.0770	0.0823

Para el segundo caso (CASO C.2), manteniendo el flujo de los demás gases constante, se alimenta metano al 2% en fracción mol. lo que provoca que circule un mayor flujo de gases a lo largo del Circuito de Síntesis, incluyendo un mayor flujo de amoníaco. Lo anterior tiene por consecuencia mayores requerimientos de potencia

Los gases inertes (CH_4 y Ar) tienden a acumularse dentro del circuito de síntesis aumentando el número de moles provenientes de la 'carga fresca' hasta 43 veces. Se les elimina en ciertas cantidades a través de purgas.

La presencia de inertes disminuye la conversión de equilibrio y por lo tanto la producción de amoníaco. Esta reducción es proporcional a la presión parcial del amoníaco.

Además el metano tiende a disolverse en el amoníaco líquido, lo que provoca que éste último lo arrastre hacia el circuito de refrigeración.

TABLA 4.5 (CASO C) ESTUDIO DE LA COMPOSICIÓN DE CH_4 EN LA ENTRADA AL CIRCUITO DE SÍNTESIS

CONCEPTO	CASO BASE 1% mol de CH_4	CASO C.1 0% mol CH_4	CASO C.2 2% mol CH_4
N_2 (lbmol/hr)	3939.5	3939.5	3939.5
Ar (lbmol/hr)	50.5	50.5	50.5
H_2 (lbmol/hr)	11818.5	11818.5	11818.5
CH_4 (lbmol/hr)	177.7	0	330.0
H_2O (lbmol/hr)	2.15	2.11	2.18
<i>Total =</i>	15984.9	15810.6	16133.9
<i>FRACCIÓN MOL</i>			
N_2	0.246450	0.249168	0.244168
AR	0.003160	0.003195	0.003131
H_2	0.739352	0.747504	0.732505
CH_4	0.010900	0.000000	0.020061
H_2O	0.000134	0.000133	0.000135
Generación de NH_3 (mol/hr)	7375.1	7372.5	7375.3
Producción de Amoníaco (mol/hr)	7345.2	7349.5	7343.0
<i>CARGAS TÉRMICAS (BTU/hr) X 10⁶</i>			
124-C	19.66	19.48	19.67
140-C	15.44	18.57	13.01
117-C	34.24	29.74	38.05
118-C	24.08	20.84	26.94
119-C	20.73	21.97	19.63
<i>Carga total =</i>	114.14	110.60	117.30
<i>TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP) DEL COMPRESOR DE AMONÍACO</i>			
1ª Etapa	857.45	909.08	818.22
2ª Etapa	2284.74	2220.70	2361.76
3ª Etapa	4379.85	4078.73	4675.11
4ª Etapa	5632.47	5453.21	5842.99
<i>Total</i>	13154.52	12661.72	13698.07

TABLA 4.5 (continuación)

CONCEPTO	CASO BASE 1% mol de CH ₄	CASO C.1 0% mol CH ₄	CASO C.2 2% mol CH ₄
<i>TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP) DEL COMPRESOR DE GAS DE SÍNTESIS</i>			
1ª Etapa	5933.02	5869.90	5987.10
2ª Etapa	5872.14	5810.87	5924.61
3ª Etapa	11035.13	10923.47	11130.66
4ª Etapa	6552.39	5880.58	7121.27
Total =	29392.68	28484.82	30163.64

CASO D. ANÁLISIS DE LA CONVERSIÓN DEL REACTOR

En el Caso base se empleó un conversión de hidrógeno a amoníaco de 0.238747, calculada de la siguiente manera

$$X = \frac{N_{\text{iniciales de H}_2} - N_{\text{finales de H}_2}}{N_{\text{iniciales de H}_2}}$$

donde N son las lbmol/hr de hidrógeno, y X es la conversión fraccional. Esta conversión de la simulación base es consistente con los balances de materia del diseño de la planta.

Los casos de estudio consisten en aumentar el valor de la conversión y ver los efectos que esto conlleva. Los resultados se resumen en la Tabla 4.6 y las conclusiones son las siguientes

Al aumentar la conversión

- Se tiene un menor flujo de gases por el Circuito, por lo que los servicios de enfriamiento se reducen.
- También se ven reducidas las potencias de los compresores de amoníaco y de la etapa de recirculación de gas de síntesis, por el menor volumen manejado.

- Debido a la menor cantidad de gas efuente del reactor la temperatura de salida aumenta como consecuencia de la exotermia.
- Adicionalmente las purgas disminuyen y con ello la cantidad de amoniaco que arrastran los gases inertes.

	PURGA DEL CIRCUITO DE SINTESIS		PURGA DEL CIRCUITO DE REFRIGERACION	
	GASES DE PURGA (lbmol/hr)	% MOL DE AMONIACO	GASES DE PURGA (lbmol/hr)	% MOL DE AMONIACO
CASO D.1	1198.12	2.12	10.52	31.90
CASO D.2	1090.01	2.17	10.38	29.38
CASO D.3	998.87	2.22	10.26	27.01

- Se tiene una mayor cantidad de amoniaco producido, lo que favorece su condensación en la mezcla de gases.

AMONIACO CONDENSADO COMO RESULTADO DEL AUMENTO DE LA CONVERSION DEL REACTOR

FRACCION DE LIQUIDO CONDENSADO EN LOS CAMBIADORES

	140-C	117-C	118-C	120-C	119-C
CASO D.1	0.0151	0.0613	0.0840	0.0826	0.0930
CASO D.2	0.0226	0.0686	0.0912	0.0871	0.1002
CASO D.3	0.0298	0.0756	0.0982	0.0913	0.1071

TABLA 4.6 (CASO D) ESTUDIO DE LA CONVERSION EN EL CONVERTIDOR DE SINTESIS DE AMONIACO

CONCEPTO	CASO BASE X=0.238747	CASO D.1 X=0.25	CASO D.2 X=0.275	CASO D.3 X=0.30
Temp efuente del convertidor (°F)	578.4	589.9	615.1	639.4
Generación de NH ₃ en la reacción (lbmol/hr)	7375.1	7401.3	7454.3	7499.0
Producción de NH ₃ (lbmol/hr)	7347.3	7374.4	7429.6	7476.2
<i>CARGAS TERMICAS (BTU/HR) X 10⁶</i>				
124-C	19.66	19.54	19.22	18.96
140-C	15.44	16.19	17.67	18.91
117-C	34.24	33.23	31.21	29.50
118-C	24.10	23.38	21.99	20.82
119-C	20.73	20.96	21.43	21.82
Carga total =	114.14	113.29	111.52	110.01

TABLA 4.6 (continuación)

CONCEPTO	CASO BASE X=0.238747	CASO D.1 X=0.25	CASO D.2 X=0.275	CASO D.3 X=0.30
<i>TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP)</i>				
1ª Etapa de amoniaco	857.45	867.21	886.88	903.08
2ª Etapa de amoniaco	2284.74	2269.25	2239.22	2213.45
3ª Etapa de amoniaco	4379.85	4312.11	4178.37	4064.88
4ª Etapa de amoniaco	5632.47	5591.88	5511.72	5442.43
4ª Etapa de recirculacion de gas de sintesis*	6552.40	6315.99	5851.23	5459.07
Trabajo total =	19706.91	19356.43	18667.43	18082.92

* Las etapas 1-3 del compresor de gas de sintesis permanecen sin cambio para cualquiera de los casos, por lo que no se tabulan

CASO E. ANÁLISIS DE LA PURGA DEL CIRCUITO DE SÍNTESIS

Los gases inertes (CH_4 , Ar) aumentan su concentración dentro del circuito de sintesis de manera considerable. Como se menciono previamente, esto disminuye la concentración de amoniaco y provoca un aumento de presión del Circuito.

El diseño de la planta propone purgar una cantidad de inertes aproximadamente igual a la cantidad que entra con la "carga fresca". Sin embargo, los inertes arrastran consigo cantidades apreciables de reactivos (N_2 , H_2) y de amoniaco producido.

Compuesto	Composicion de la purga (% mol)
N_2	20.06
Ar	3.94
H_2	60.17
CH_4	13.71
NH_3	2.11

El caso de estudio para los gases de purga comprende:

1) CASO E.1, donde se elimina una cantidad de gases en la purga que constituye el 50% de la purga de diseño.

2) CASO E.2, donde se elimina una cantidad de gases en la purga que constituye el 200% de la purga de diseño.

Los efectos del aumento o disminución de la cantidad de los gases de purga se enlistan en la Tabla 4.7, de donde se concluye que, si se purgan menos gases en el Circuito de Síntesis

- Aumenta necesariamente el flujo de gases y principalmente el flujo de los inertes
- Condensa menor cantidad de amoníaco con el enfriamiento proporcionado
- Se disuelven más los inertes en el amoníaco líquido, con lo que aumenta el flujo purgado en el circuito de refrigeración
- El amoníaco del Circuito de Refrigeración es más impuro
- Aumenta el trabajo de compresión
- Aumenta la concentración de inertes en el Circuito de Síntesis

TABLA 4.7 (CASO E) ESTUDIO DE LA PURGA DEL CIRCUITO DE SÍNTESIS

	CASO BASE	CASO E.1 (purga diseño)X0.5	CASO E.2 (purga diseño)X2.0
Generación de amoníaco en la reacción (lbmol/hr)	7375.1	7610.0	6943.98
Producción de amoníaco (lbmol/hr)	7347.3	7591.6	6901.1
<i>CARGAS TÉRMICAS (BTU/HR) X10⁻⁶</i>			
124-C	19.66	19.51	19.67
140-C	15.44	13.30	15.42
117-C	34.24	40.11	29.79
118-C	24.08	28.52	20.91
119-C	20.73	20.41	19.58
TOTAL=	114.14	121.85	105.32
<i>TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP)</i>			
Etapa de recirculación	6552.4	7532.7	5798.5
1ª Etapa del compresor de amoníaco	857.5	818.0	869.5
2ª Etapa del compresor de amoníaco	2284.7	2431.1	2165.0
3ª Etapa del compresor de amoníaco	4379.8	4849.6	4028.9
4ª Etapa del compresor de amoníaco	5632.5	6049.2	5239.7
TOTAL =	19706.9	21680.6	18101.5

TABLA 4.7 (continuación)

		CASO BASE	CASO E.1 (purga diseño)X0.5	CASO E.2 (purga diseño)X2.0
Composición del gas de purga (fracc. mol)				
	N ₂	0.2006	0.1730	0.2192
	Ar	0.0395	0.0633	0.0234
	H ₂	0.6017	0.5177	0.6568
	CH ₄	0.1371	0.2221	0.0813
	H ₂ O	0.0000	0.0000	0.0000
	NH ₃	0.0211	0.0239	0.0193
Composición del amoniaco producido (fracc. mol)				
	N ₂	3.6E-8	3.4E-8	3.8E-8
	Ar	2.4E-7	3.9E-7	1.4E-7
	H ₂	1.7E-7	1.7E-7	1.7E-7
	CH ₄	3.5E-7	5.7E-7	2.1E-7
	H ₂ O	2.9E-4	2.8E-4	3.1E-4
	NH ₃	0.9997	0.9997	0.9997

CASO F. ANÁLISIS DE LA ALIMENTACIÓN DE AMONIACO LÍQUIDO AL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN

El amoniaco condensado del Circuito de Síntesis que se envía a refrigeración se encuentra a -8 °F y 355 psia. Resulta lógico pensar que la alimentación de amoniaco puede llevarse a cabo en un nivel de presión similar al que lleva la corriente, para introducirlo al Circuito de Refrigeración

La salida de la cuarta etapa de compresión de amoniaco tiene una presión de 265 psia (que es la presión más alta del Circuito de Refrigeración), con la cual se podría mezclar el amoniaco entrante. Sin embargo, el amoniaco es alimentado en niveles de presión menores (30 y 15 psia) previa expansión en válvulas

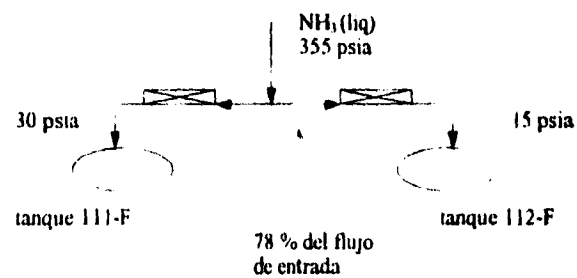
La razón de esto es simple: no es preciso manejar el flujo de amoniaco en su totalidad a través del Circuito de Refrigeración (o gran parte de él), se puede enviar una parte a almacenamiento y el resto proporciona los servicios de enfriamiento.

Un primer análisis consistió en colocar la alimentación de amoníaco a la salida de la cuarta etapa del compresor (Figura 4.3), y el resultado fue un mayor requerimiento de potencia del compresor de amoníaco para proporcionar el mismo servicio de refrigeración (ver Tabla 4.8)

TABLA 4.8 TRABAJO DE COMPRESIÓN REQUERIDO (HP)		
	Caso base	Alimentación a la salida del compresor
ETAPA 1	857.45	834.02
ETAPA 2	2284.74	2428.66
ETAPA 3	4379.85	4736.59
ETAPA 4	5632.47	6386.61
TOTAL	13154.51	14385.88

De aquí se concluye que la alimentación de amoníaco líquido en otro nivel de presión que no sea el de los tanques separadores 111-F y 112 -F provoca un aumento en la potencia del compresor de amoníaco

La alimentación de amoníaco se realiza de la siguiente manera.



El segundo análisis consistió en un caso de estudio para distintas fracciones de alimentación de amoníaco para los tanques separadores 111-F y 112-F. Los resultados obtenidos en el trabajo de compresión de amoníaco se tabulan a continuación.

TABLA 4.8 (CASO F) TRABAJO DE COMPRESION DE AMONIACO (HP)

Etapa del compresor de NH ₃	porcentaje del flujo total alimentado a cada tanque					
	0.0 % 112-F 100 % 111-F	20 % 112-F 80 % 111-F	40 % 112-F 60 % 111-F	50 % 112-F 50 % 111-F	60 % 112-F 40 % 111-F	78 % 112-F 22 % 111-F
1*	882.71	875.79	868.81	865.31	861.78	857.45
2*	2290.71	2289.05	2287.37	2286.53	2285.69	2284.75
3*	4380.42	4380.29	4380.16	4380.09	4380.01	4379.85
4*	5633.08	5632.94	5632.80	5632.73	5632.65	5632.47
TOTAL =	13186.93	13178.07	13169.14	13164.65	13160.14	13154.52

↑
DISEÑO DE LA PLANTA

Las tracciones de alimentación apropiadas, es decir las que consumen la menor potencia de compresión son las de la última columna de la Tabla 4.9, que corresponden al diseño de la planta

Si se emplean flujos mayores de alimentación al tanque 111-F, además del aumento en el trabajo de compresión, los equipos del Circuito, así como el diámetro de las tuberías tendrían mayor tamaño.

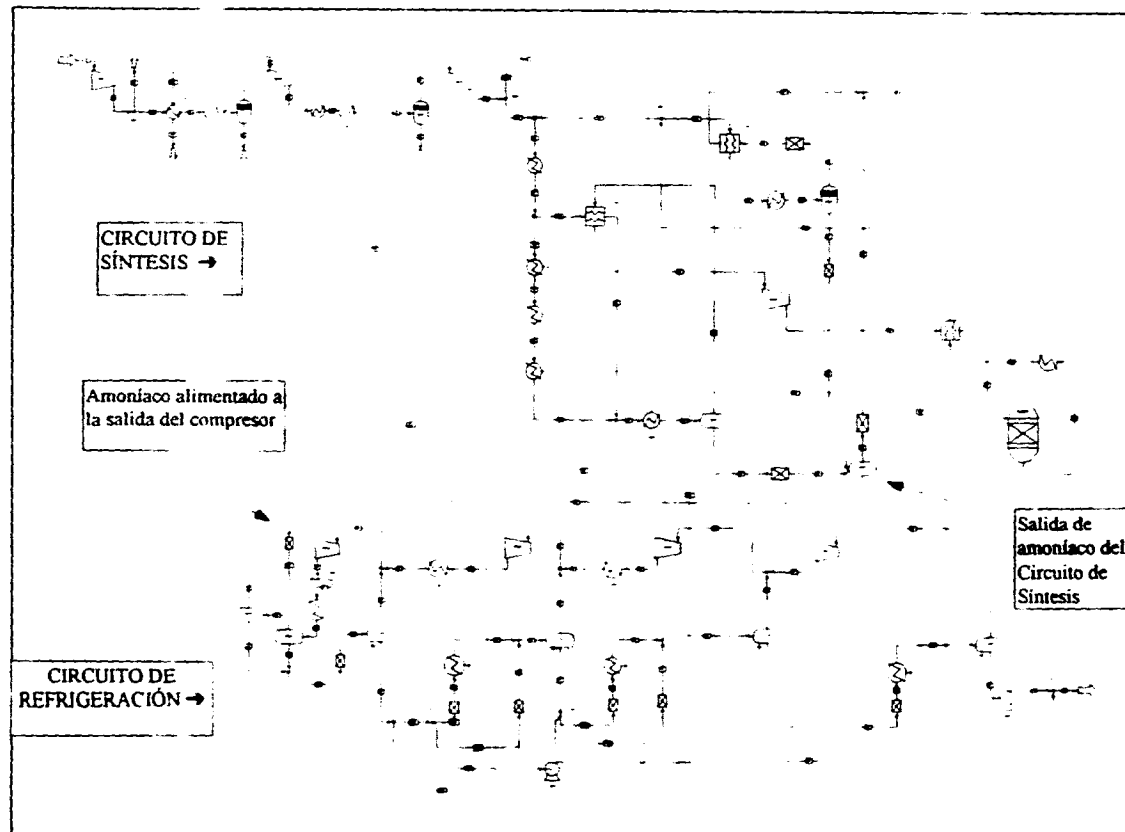


FIGURA No. 4 3 ALIMENTACION DE AMONIACO LIQUIDO A LA SALIDA DEL COMPRESOR DE AMONIACO

CASO G. ANÁLISIS DE LA CANTIDAD DE AMONIACO LÍQUIDO PRESENTE EN EL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN

En el Circuito de Refrigeración, el vapor de amoniaco producido es comprimido y después condensado para poder enviarlo nuevamente al ciclo para que vaporice a diferentes niveles de presión, con lo que proporciona los requerimientos de enfriamiento al Circuito de Síntesis.

Una vez que el amoniaco ha sido condensado y los inertes se han eliminado a través de la purga, comienza la expansión y evaporación para el nivel de 127 psia y 68.8 °F. El líquido saturado es dividido en este punto en dos corrientes:

- 1) La primera continuará a lo largo del Circuito de Refrigeración para proporcionar el servicio de enfriamiento.
- 2) La segunda corriente es bombeada y enviada como producto a almacenamiento sin pasar por el Circuito, ya que no es necesario manejar todo el flujo de amoniaco producido para proporcionar el enfriamiento requerido (tal como se estableció en el Caso F).

La cantidad de amoniaco que es estrictamente indispensable que pase por el circuito debe ser determinada de manera apropiada, pues un flujo en exceso tiene como consecuencia una mayor potencia en el compresor de amoniaco, así como tuberías de mayor diámetro y equipo de mayores dimensiones.

Por el contrario, la falta de amoniaco suficiente en el Circuito provocará que las corrientes de refrigerante que enfrían al Circuito de Síntesis alcancen temperaturas muy altas o vaporicen por completo al tener que retirar una determinada carga térmica con un pequeño flujo de amoniaco. La completa vaporización enviará todo el amoniaco al compresor, y los equipos subsecuentes del Circuito se secarán (es decir, no tendrán alimentación de amoniaco líquido).

CASO G. ANÁLISIS DE LA CANTIDAD DE AMONIACO LÍQUIDO PRESENTE EN EL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN

En el Circuito de Refrigeración, el vapor de amoniaco producido es comprimido y después condensado para poder enviarlo nuevamente al ciclo para que vaporice a diferentes niveles de presión, con lo que proporciona los requerimientos de enfriamiento al Circuito de Síntesis.

Una vez que el amoniaco ha sido condensado y los inertes se han eliminado a través de la purga comienza la expansión y evaporación para el nivel de 127 psia y 68.8 °F. El líquido saturado es dividido en este punto en dos corrientes:

- 1) La primera continuará a lo largo del Circuito de Refrigeración para proporcionar el servicio de enfriamiento.
- 2) La segunda corriente es bombeada y enviada como producto a almacenamiento sin pasar por el Circuito, ya que no es necesario manejar todo el flujo de amoniaco producido para proporcionar el enfriamiento requerido (tal como se estableció en el Caso F).

La cantidad de amoniaco que es estrictamente indispensable que pase por el circuito debe ser determinada de manera apropiada, pues un flujo en exceso tiene como consecuencia una mayor potencia en el compresor de amoniaco, así como tuberías de mayor diámetro y equipo de mayores dimensiones.

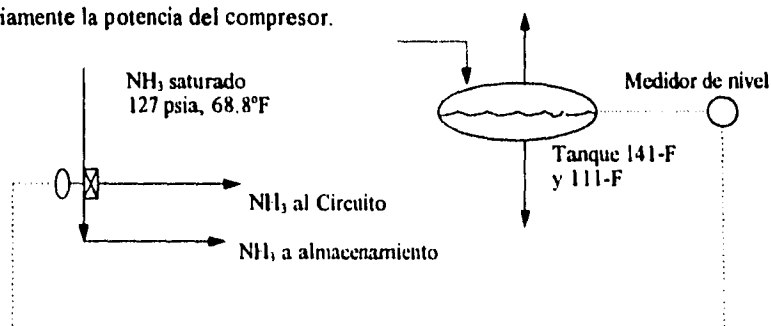
Por el contrario, la falta de amoniaco suficiente en el Circuito provocará que las corrientes de refrigerante que enfrían al Circuito de Síntesis alcancen temperaturas muy altas o vaporicen por completo al tener que retirar una determinada carga térmica con un pequeño flujo de amoniaco. La completa vaporización enviará todo el amoniaco al compresor, y los equipos subsiguientes del Circuito se secarán (es decir, no tendrán alimentación de amoniaco líquido).

Para éste análisis se variaron los flujos de amoniaco que entran al Circuito y se consideró la potencia requerida en el compresor.

La división de amoniaco que se encontró apropiada es: 56.5 % del flujo total debe circular dentro del Circuito, y el resto (43.5 %) se envía a almacenamiento. En ésta división las temperaturas del refrigerante son las apropiadas para retirar calor de las corrientes de proceso del Circuito de Síntesis y ninguna corriente vaporiza por completo.

Conforme se avanza a lo largo del Circuito, los tanques separadores manejan un flujo menor de amoniaco en equilibrio, es por esto que la vaporización completa ($V/F=1$) por un incremento de temperaturas se ve reflejado directamente en los tanques 111-F y 141-F (Ver primera fila de la Tabla 4.10) y el equipo subsecuente a ellos.

Durante la operación de la planta, se debe cuidar el nivel de líquido de los tanques antes mencionados con el fin de evitar altas temperaturas en el Circuito y una operación anormal de los equipos subsecuentes. El control de nivel de éstos tanques estará dado por la alimentación de amoniaco al Circuito; es decir, cuando por alguna causa en la operación de la planta sea necesario retirar una cantidad mayor (o menor) de carga térmica del Circuito de Síntesis, debe controlarse el nivel de los tanques separadores con el fin de alimentar un flujo mayor (o menor) de amoniaco al circuito de refrigeración, sin aumentar innecesariamente la potencia del compresor.



Conforme el amoníaco pasa a través de los distintos niveles de presión, la pequeña cantidad de inertes que no condensa va siendo arrastrada hacia el compresor, y al salir de la última etapa de compresión es eliminada a través de la purga, es así que el amoníaco que circula por los distintos niveles de enfriamiento tiene una pureza mayor que el amoníaco que es enviado directamente a almacenamiento

A la salida del Circuito de Refrigeración el amoníaco líquido efluente del tanque 112-F (cuya presión es prácticamente la atmosférica), es bombeado y enviado a almacenamiento junto con el amoníaco que no entró al ciclo

TABLA 4.10 LÍQUIDO SATURADO PROVENIENTE DE LOS TANQUES SEPARADORES

FRACCIÓN DE NH ₃ EN EL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN	LÍQUIDO EFLUENTE DEL TANQUE 110-F (lbmol/hr)	LÍQUIDO EFLUENTE DEL TANQUE 141-F (lbmol/hr)	LÍQUIDO EFLUENTE DEL TANQUE 111-F (lbmol/hr)	LÍQUIDO EFLUENTE DEL TANQUE 112-F (lbmol/hr)
0.50	8478.19	0	0	3109.28
0.56	9580.17	698.75	198.66	3132.05
0.565	9589.89	747.94	244.65	3175.72
0.60	9658.23	1094.93	569.33	3483.96
0.65	9757.38	1599.20	1041.33	3932.07
0.70	9858.57	2113.92	1523.13	4389.49
0.85	10175.09	3724.16	3030.42	5820.50
1.00	10512.60	5441.20	4637.70	7346.44

En la Tabla 4.10 se encuentran tabulados los flujos de líquido efluente de cada uno de los tanques separadores para diferentes alimentaciones de amoníaco al Circuito, y la Figura 4.4 presenta de manera más clara los tanques separadores que vaporizan por completo a flujos menores de amoníaco dentro del Circuito. De ésta figura se aprecia que el tanque 111-F es el primero que se secaría por la falta de amoníaco líquido, por lo tanto el esquema de control que se propone debe instalarse en éste tanque.

Resultados adicionales de la variación del flujo de amoníaco, se encuentran listados en la Tabla 4.11

FIG. 4.4 LIQUIDO US. FRACC. DE NH3
en el Circuito de Refrigeracion

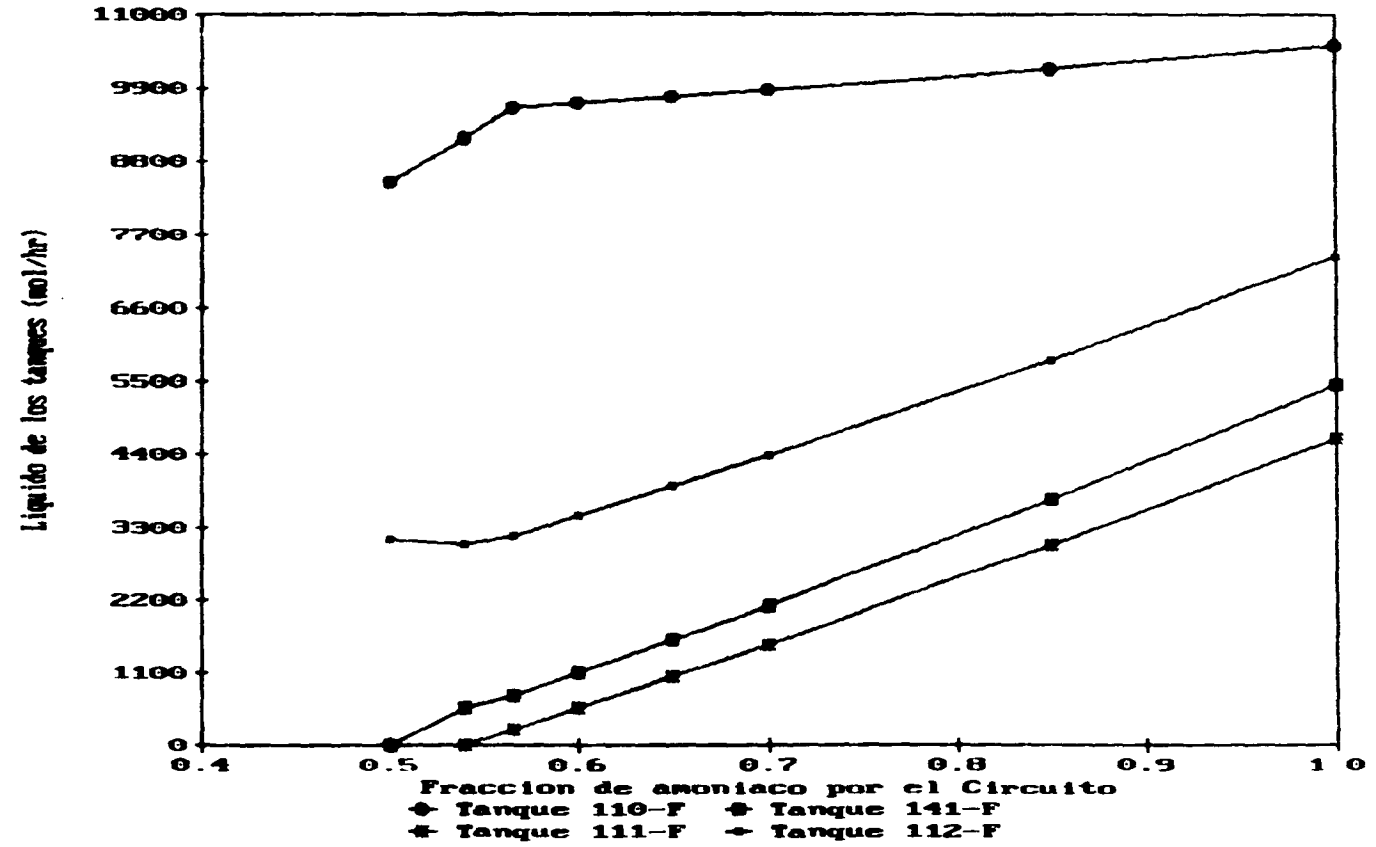


TABLA 4.11 (CASO G) ESTUDIO DEL FLUJO DE AMONIACO EN EL CIRCUITO DE COMPRESIÓN Y REFRIGERACIÓN

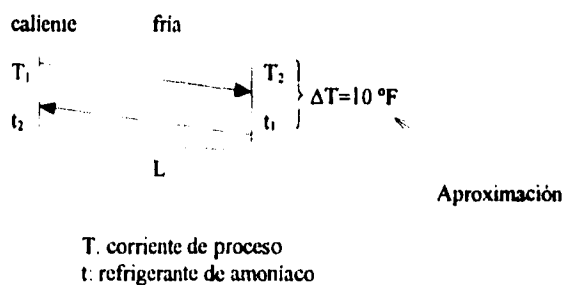
CONCEPTO	CASO G.1	CASO G.2	CASO BASE	CASO G.3	CASO G.4	CASO G.5	CASO G.6	CASO G.7
Fracción de flujo de amoniaco en el Circuito	0.50	0.56	0.565	0.60	0.65	0.70	0.85	1.0
<i>TEMPERATURA DE LOS TANQUES FLASH (°C)</i>								
110-F	-68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8
141-F	118.5	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0
111-F	190.3	0.6	0.6	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
112-F	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7
<i>1°F DE LOS TANQUES FLASH</i>								
110-F	0.241142	0.227382	0.227273	0.226508	0.225415	0.224320	0.221012	0.217676
141-F	1.000000	0.869755	0.861961	0.811054	0.747851	0.693679	0.569404	0.482412
111-F	1.000000	0.927495	0.912284	0.818458	0.713947	0.633427	0.474368	0.380181
112-F	0.415194	0.432129	0.428974	0.408104	0.381565	0.358253	0.302700	0.261996
<i>FLUJO DE VAPOR DE LOS TANQUES FLASH (lbmol/hr)</i>								
110-F	2694.11	2819.46	2820.56	2828.31	2839.54	2851.01	2886.85	2925.05
141-F	4239.10	4666.15	4670.35	4700.01	4743.10	4787.08	4924.67	5071.40
111-F	2041.14	2541.23	2544.43	2566.74	2599.01	2631.93	2734.87	2844.64
112-F	2207.49	2383.38	2385.71	2402.14	2426.03	2450.42	2526.70	2608.03
<i>TRABAJO DE COMPRESIÓN DE AMONIACO (HP)</i>								
4ª ETAPA	5064.38	5627.51	5632.47	5667.38	5718.04	5769.72	5931.40	6103.78
3ª ETAPA	4203.87	4375.37	4379.85	4411.31	4456.97	4505.568	4649.29	4804.70
2ª ETAPA	2350.68	2282.27	2284.75	2302.37	2328.07	2354.33	2436.50	2524.13
1ª ETAPA	793.38	856.62	857.45	863.36	871.94	880.70	908.115	937.34
TOTAL =	12412.31	13141.76	13154.52	13244.42	13375.02	13508.31	13925.30	14369.94
PRODUCCIÓN DE NH ₃ (lbmol/hr)	7348.38	7347.33	7347.32	7347.26	7347.16	7347.06	7346.77	7346.44

CASO H. ANÁLISIS DE LAS TEMPERATURAS DE CONDENSACIÓN DE AMONÍACO EN EL CIRCUITO DE SÍNTESIS.

Las temperaturas de salida de los cambiadores donde condensa el amoníaco, para el caso de diseño se muestran en la Tabla 4.12, las cuales presentan una aproximación, ΔT , de 10°F de acuerdo a la temperatura del refrigerante de amoníaco que se emplea para retirar calor

TABLA 4.12 TEMPERATURA DE LAS CORRIENTES DE LOS CAMBIADORES

CAMBIADOR	TEMPERATURA DE SALIDA, T(°F)	TEMPERATURA DE AMONÍACO, t(°F)
140-C	79	68.8
117-C	42	32.0
118-C	10	0.6
119-C	-10	-26.7



El aumentar o disminuir la temperatura de salida de los cambiadores tiene como consecuencia la variación de la carga térmica, lo que produce una mayor o menor vaporización del amoníaco empleado como refrigerante.

El aumento en la vaporización del amoníaco requiere una mayor potencia del compresor, por lo que estas temperaturas deben ser las más apropiadas de modo que se produzca el menor vapor posible.

De los casos de estudio realizados, el resultado fue que la disminución en la temperatura de salida (disminución de la aproximación) de cada uno de los cambiadores provoca un

requerimiento menor de potencia del compresor. Por el contrario, para un aumento en la aproximación de temperatura se tiene un consumo de potencia mayor.

Lo anterior se explica por medio del concepto de trabajo perdido: la generación de entropía (y por lo tanto el trabajo perdido) aumentará debido a las irreversibilidades causadas por un gran ΔT en los intercambiadores

La Tabla 4.13 que se anexa sobre estos casos de estudio apunta claramente a disminuir las temperaturas de salida (corriente de proceso caliente) con el fin de disminuir la potencia del compresor de amoniaco.

Sin embargo, a partir de la Ecuación de Fourier

$$Q=U \cdot A \cdot \Delta T_{ml}$$

siendo

Q = carga térmica (BTU/hr)

A = área de transferencia de calor (ft²)

U = coeficiente global de transferencia de calor (BTU/ hr ft² °R)

ΔT_{ml} = diferencia media logarítmica de temperaturas (°R), definida para cambiadores a contracorriente como

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln (T_1 - t_2)/(T_2 - t_1)}$$

siendo

T₁ corriente de entrada del fluido caliente (°R)

T₂ corriente de salida del fluido caliente (°R)

t₁ corriente de entrada del refrigerante (°R)

t₂ corriente de salida del refrigerante (°R)

indica que al ser más cercanas la temperaturas de las corrientes caliente y fría, es decir si la aproximación es menor, el valor de ΔT_{ml} disminuye, y por la tanto el área crece.

Es necesario evaluar si resulta conveniente tener una aproximación de temperaturas menor, con lo que la transferencia de calor se realiza con un gradiente de temperaturas reducido (lo que disminuye la generación de entropía), a expensas de un aumento en el área de los cambiadores ya instalados.

El tanque separador *141-F* es el que produce una cantidad de vapor mayor (ver diagrama P vs. H del compresor de amoníaco, Figura 4.6, así como su esquema Figura 4.5), por lo que la variación en la temperatura de salida del cambiador *117-C'* (con el que intercambia calor) tiene una contribución mayor en la potencia del compresor de amoníaco

TABLA 4.13 (CASO H) ANALISIS DE LAS TEMPERATURAS DE LOS CAMBIADORES DEL CIRCUITO DE SINTESIS

EQUIPO	CASO BASE	CASO H.1	CASO H.2	CASO H.3	CASO H.4	CASO H.5	CASO H.6
	$T_{100-C} + 5^{\circ}F$	$T_{100-C} - 5^{\circ}F$	$T_{112-C} + 5^{\circ}F$	$T_{112-C} - 5^{\circ}F$	$T_{119-C} + 5^{\circ}F$	$T_{119-C} - 5^{\circ}F$	$T_{119-C} - 5^{\circ}F$
TEMPERATURA ESPECIFICADA DE LOS CAMBIADORES ($^{\circ}F$)							
140-C	79	84	74	79	79	79	79
117-C	42	42	42	47	37	42	42
118-C	10	10	10	10	10	15	5
119-C	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10
CARGAS TÉRMICAS OBTENIDAS (BTU/HR) X 10 ⁶							
140-C	15.44	10.21	20.56	15.44	15.44	15.44	15.44
117-C	34.24	39.47	29.12	30.06	38.29	34.24	34.24
118-C	24.08	24.08	24.08	28.25	20.02	20.58	27.49
119-C	20.73	20.73	20.73	20.73	20.73	24.23	17.32
TEMPERATURA DE TANQUES FLASH OBTENIDA ($^{\circ}F$)							
110-F	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8
141-F	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0
111-F	0.6	0.6	0.5	0.6	0.6	0.5	0.6
112-F	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7
V/F DE TANQUES FLASH							
110-F	0.227273	0.180546	0.272363	0.227167	0.227376	0.227189	0.226480
141-F	0.861961	0.876003	0.803341	0.780858	0.940826	0.861356	0.804808
111-F	0.912284	0.913257	0.840238	0.925591	0.894621	0.785934	0.914789
112-F	0.428974	0.429177	0.413178	0.429269	0.428688	0.463622	0.368058
TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP) DE AMONÍACO							
ETAPA 4	5632.47	5662.19	5629.12	5637.29	5627.79	5636.26	5668.69
ETAPA 3	4379.85	4627.48	4160.55	4416.29	4344.40	4383.47	4412.29
ETAPA 2	2284.75	2284.63	2297.84	2473.33	2101.68	2316.52	2273.80
ETAPA 1	857.45	857.40	861.86	857.38	857.53	985.58	739.18
TOTAL =	13154.52	13431.70	12949.36	13384.29	12840.39	13321.83	13093.96

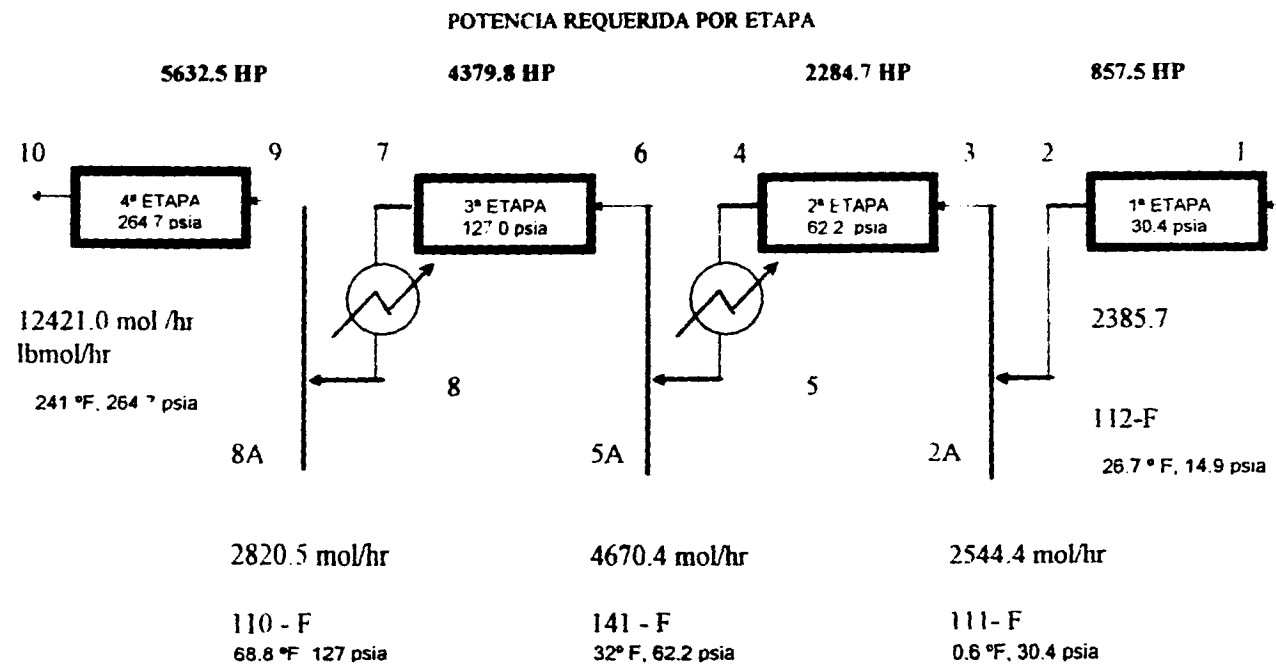
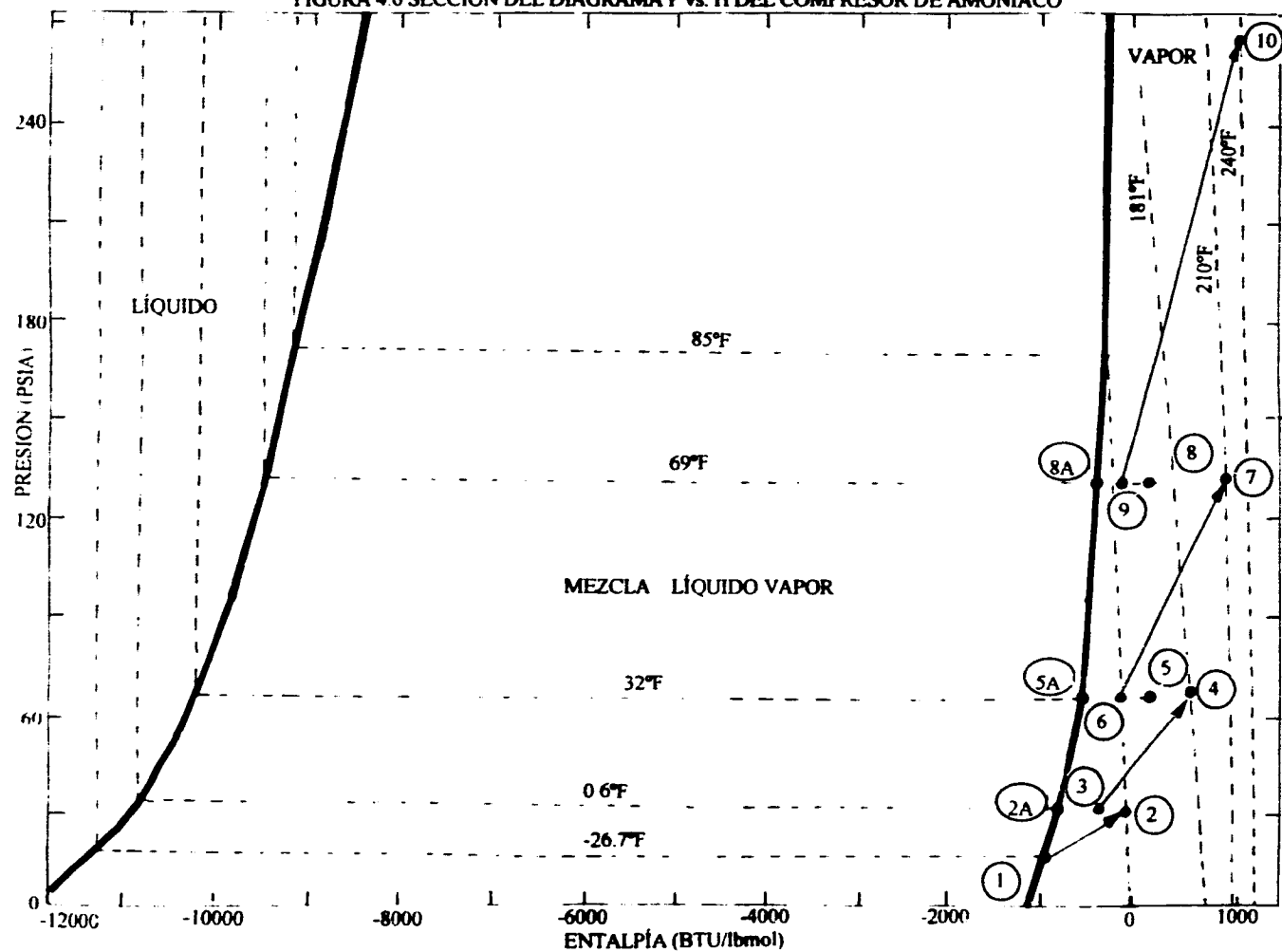


FIGURA 4.5 ESQUEMA DEL COMPRESOR DE AMONIACO

FIGURA 4.6 SECCIÓN DEL DIAGRAMA P vs. H DEL COMPRESOR DE AMONIACO



CASO I. ANÁLISIS DE LAS PRESIONES DE EQUILIBRIO DEL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN DE AMONIACO

El amoníaco que circula por el circuito de refrigeración es prácticamente puro :

% MOL	
N ₂	0.01159
Ar	0.01386
H ₂	0.04679
CH ₄	0.02448
H ₂ O	0.03333
NH ₃	99.87000
total =	100.00000

por lo que las condiciones de amoníaco saturado de ésta mezcla son muy parecidas a las reportadas para componente puro.

Las condiciones de los tanques separadores cuyo vapor alimenta al compresor de amoníaco son las siguientes⁽⁶⁾

TANQUE	T (°F)	P (PSIA)
110-F	68.8	127
141-F	32.0	62.2
111-F	0.6	30.4
112-F	-26.7	14.9

El análisis llevado a cabo consiste en la variación de las presiones de equilibrio de los tanques (y su consiguiente variación de temperatura), para conocer el efecto en el trabajo de compresión del amoníaco vaporizado. La vaporización en los tanques separadores se controla por medio de expansión en válvulas, con lo cual se determina la presión de salida

Las condiciones del tanque 112-F se conservaron fijas con el fin de tener amoníaco a condiciones ambiente (15 psia -26.7 °F)

⁽⁶⁾ En el ANEXO se encuentra una Tabla de propiedades de amoníaco puro, donde puede corroborarse que las condiciones de equilibrio son muy parecidas a la que propone el diseño.

**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

La potencia consumida en el Circuito de Refrigeración es además altamente dependiente de las condiciones del agua de enfriamiento. pues al enfriar la corriente de amoníaco se reduce su volumen y se requiere menor potencia de compresión

El aumento en la presión de equilibrio de los tanques tiene como consecuencia una disminución en la potencia para comprimir el vapor producido, debido a que este flujo de vapor decrece, tal y como puede verse en la forma que presenta en diagrama P vs. H para amoníaco de la Figura 4.6

Nuevamente el tanque separador I-I-F, que produce una cantidad considerablemente mayor de vapor de amoníaco, es determinante en la reducción o aumento de la potencia requerida en el compresor. Lo anterior puede verse en los CASOS I.5 al I.10 de la Tabla 4.14, donde la variación de presión se realiza para un sólo tanque aislado, con el fin de ver el efecto específico.

El trabajo de compresión es proporcional a: 1) la relación de compresión $P_{salida}/P_{entrada}$, y 2) al volumen manejado de acuerdo a la ecuación para un compresor centrífugo. Para un gas que sigue comportamiento de gas ideal, la potencia de un compresor adiabático está dada por:

$$\text{Potencia (HP)} = (3.03 \times 10^{-4} / g) \cdot P_{entrada} \cdot Q_{entrada} [(P_{salida}/P_{entrada})^g - 1] \quad (1)$$

donde

$$g = (C_p/C_v - 1) / (C_p/C_v)$$

P = presión (psia)

Q = flujo volumétrico (ft³/min)

de donde puede verse la dependencia directa del volumen de amoníaco manejado con la potencia requerida. Los resultados de la Tabla 4.14 corroboran la ecuación (1) de potencia de un compresor centrífugo.

TABLA 4.14 (CASO I) ANÁLISIS DE LAS PRESIONES DEL CIRCUITO DE COMPRESIÓN Y REFRIGERACIÓN DE AMONIACO.

EQUIPO	CASO BASE	CASO L1 - 5 psia	CASO L2 - 10 psia	CASO L3 + 5 psia	CASO L4 + 10 psia	CASO L5 P _{111-F} + 5 psia	CASO L6 P _{111-F} - 5 psia	CASO L7 P _{141-F} + 5 psia	CASO L8 P _{141-F} - 5 psia	CASO L9 P _{110-F} + 5 psia	CASO L10 P _{110-F} - 5 psia
PRESIÓN ESPECIFICADA (PSIA)											
111-F	30.4	25.4	20.4	35.4	40.4	35.4	25.4	30.4	30.4	30.4	30.4
141-F	62.2	57.2	52.2	67.2	72.2	62.2	62.2	67.2	57.2	62.2	62.2
110-F	127.0	122.0	117.0	132.0	137.0	127.0	127.0	127.0	127.0	132.0	122.0
TEMPERATURA OBTENIDA (°F)											
111-F	0.6	-6.6	-15.1	6.9	12.5	6.9	-6.6	0.6	0.6	0.6	0.6
141-F	32.0	28.1	23.9	35.8	39.3	32.0	32.0	35.8	28.1	32.0	32.0
110-F	68.8	66.6	64.3	71.0	73.1	68.8	68.8	68.8	68.8	71.0	66.6
V/F DE TANQUE FLASH											
112-F	0.428974	0.428593	0.428265	0.429387	0.429821	0.428942	0.429053	0.428641	0.429339	0.429768	0.428166
111-F	0.912284	0.913621	0.915629	0.911441	0.910980	0.909062	0.915923	0.910884	0.913840	0.916078	0.908443
141-F	0.861961	0.860460	0.858861	0.863403	0.864811	0.862898	0.860858	0.859744	0.864306	0.864657	0.859190
110-F	0.227273	0.230963	0.234702	0.223635	0.220050	0.227402	0.227121	0.227393	0.227142	0.223383	0.231243
TRABAJO DE COMPRESIÓN DE AMONIACO (HP)											
ETAPA 1	857.45	626.67	358.87	1061.29	1244.48	1061.47	626.60	857.54	857.36	857.24	857.67
ETAPA 2	2284.75	2526.11	2838.90	2091.42	1932.30	1863.65	2772.11	2515.51	2040.91	2284.03	2285.48
ETAPA 3	4379.85	4663.91	4990.55	4130.13	3908.62	4374.24	4386.46	3893.61	4916.04	4626.94	4126.61
ETAPA 4	5632.47	6004.24	6399.93	5281.97	4950.60	5626.61	5639.38	5627.02	5638.44	5292.64	5990.60
TOTAL =	13154.52	13820.93	14588.26	12564.81	12036.01	12925.97	13424.56	12893.68	13452.74	13060.84	13260.36
FLUJO DE VAPOR DE TANQUES FLASH (LBMOL/HR)											
112-F	2385.71	2382.29	2378.38	2388.737	2391.41	2389.15	2382.05	2385.95	2385.43	2385.12	2386.31
111-F	2544.43	2555.51	2569.22	2535.18	2527.28	2530.02	2561.03	2550.69	2537.97	2543.41	2545.47
141-F	4670.35	4661.73	4654.08	4679.72	4689.70	4669.84	4670.95	4653.16	4688.76	4697.41	4642.71
110-F	2820.56	2879.81	2941.38	2763.33	2707.93	2819.26	2822.09	2819.35	2821.88	2765.73	2876.82
TOTAL =	12421.05	12479.34	12543.06	12366.95	12316.28	12408.26	12436.12	12409.16	12434.05	12391.66	12451.32

CASO J. ANÁLISIS DEL EFECTO COMBINADO DE LAS TEMPERATURAS DE CONDENSACIÓN DE AMONIACO EN EL CIRCUITO DE SÍNTESIS Y LAS PRESIONES DE EQUILIBRIO DEL CIRCUITO DE REFRIGERACIÓN.

Como se ha mencionado previamente, el servicio de enfriamiento requerido en los cambiadores del Circuito de Síntesis, donde se condensa el amoníaco es proporcionado por amoníaco del Circuito de Refrigeración de diversos niveles de presión

Estos cambiadores han sido diseñados con una aproximación de temperaturas (= diferencia de las temperaturas de salida de la corriente caliente y de entrada de la corriente fría) de 10°F para los cambiadores 140-C', 117-C', 118-C' y de 18 °F para el cambiador 119-C'

El análisis de trabajo perdido indica que en éstos cambiadores hay una alta generación de entropía, debida principalmente a la transferencia de calor y a un ΔT grande.

Adicionalmente, una aproximación de temperaturas grande tiene como consecuencia que las presiones a las que opera el Circuito de Refrigeración produzcan una mayor cantidad de vapor y la potencia requerida del compresor de amoníaco crezca.

El presente análisis tiene como objetivo determinar las mejores condiciones de **Temperatura** de los cambiadores del Circuito de Síntesis, y **Presión** de los tanques separadores de amoníaco del Circuito de Refrigeración. Estas condiciones de temperatura y presión se verificarán para aproximaciones de temperatura de 10°F, 8°F y 6°F

De manera mas explícita para el primer cambiador del Circuito (140-C') que emplea amoníaco como fluido frío, la temperatura de salida de la corriente de proceso es 79°F, y por lo tanto el refrigerante debe entrar a una temperatura de 69°F si la aproximación de temperaturas, ΔT , es de 10°F.

Se realizaron los casos en que la aproximación tenía un valor de 8 y 6°F, por lo que fue necesario ajustar la presión del tanque separador 110-F de modo que el amoníaco tuviese una temperatura de 71 y 73°F, respectivamente. Las variaciones tanto de temperatura de los cambiadores, como de presión de los tanques separadores, se encuentran en la Tabla 4.15

Adicionalmente se modificó la temperatura de salida de este mismo cambiador a valores de 74 y 84°F, donde también se realizó la simulación para los casos en que la aproximación de temperaturas era de 8 y 6°F

Este mismo tipo de estudio se realizó con los cambiadores 117-C y 118-C. El Caso de Estudio completo comprende tres Tablas, donde la primera es para la variación del cambiador 140-C, la segunda para el cambiador 117-C y finalmente la tercera se dedica al cambiador 118-C

Del conjunto de Tablas 4.15 del CASO J se llega a la conclusión de que aproximaciones menores (6°F e inclusive 8°F), requieren menor potencia del compresor y disminuyen el trabajo perdido de los cambiadores; sin embargo, tal y como se había mencionado anteriormente, el disminuir la aproximación de temperaturas tiene como consecuencia un aumento en el área de transferencia

Es necesario hacer el análisis de costos del aumento de áreas de cambiadores vs el costo de vapor de alta presión para accionar las turbinas del compresor de amoníaco, para poder evaluar si resulta conveniente tener aproximaciones de temperatura menores

El trazo de la potencia de compresión (HP) vs la temperatura de salida de los cambiadores para diferentes ΔT constantes (Figuras 4.7) indica que las temperaturas a las que fue diseñado el Circuito son, en la mayoría de los casos, las que producen el menor trabajo de compresión de amoníaco. Lo anterior habla del grado de optimización que tiene el diseño de la planta.

TABLA 4.15 (CASO J) ESTUDIO DE LAS TEMPERATURAS DEL CIRCUITO DE SÍNTESIS DE AMONIACO PARA UNA ΔT_2 CONSTANTE. (continuación)

EQUIPO	CASO BASE $\Delta T_2=10^\circ$	CASO J.9 $\Delta T_2=10^\circ$	CASO J.10 $\Delta T_2=10^\circ$	CASO J.11 $\Delta T_2=8^\circ$	CASO J.12 $\Delta T_2=8^\circ$	CASO J.13 $\Delta T_2=8^\circ$	CASO J.14 $\Delta T_2=6^\circ$	CASO J.15 $\Delta T_2=6^\circ$	CASO J.16 $\Delta T_2=6^\circ$
TEMPERATURA DE SALIDA DEL CAMBIADOR ($^\circ\text{F}$)									
140-C	79	79	79	79	79	79	79	79	79
117-C	42	37	47	42	37	47	42	37	47
118-C	10	10	10	10	10	10	10	10	10
119-C	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10
CARGAS TÉRMICAS OBTENIDAS (BTU/HR) X 10^{-6}									
140-C	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44
117-C	34.24	38.29	30.07	34.24	38.29	30.07	34.24	38.29	30.07
118-C	24.08	20.02	28.25	24.08	20.02	28.25	24.08	20.02	28.25
119-C	20.73	20.73	20.73	20.73	20.73	20.73	20.73	20.73	20.73
PRESIÓN ESPECIFICADA DEL TANQUE FLASH (psia) Y TEMPERATURA OBTENIDA ($^\circ\text{F}$)									
110-F	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8
141-F	62.2 , 32.0	56 , 27.1	69 , 37.0	65 , 34.1	58.5 , 29.1	72 , 39.1	67.6 , 36.0	61 , 31.1	74.5 , 40.8
111-F	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
112-F	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7
V/F DE TANQUES FLASH									
110-F	0.227273	0.227195	0.227311	0.227341	0.227207	0.227369	0.227402	0.227343	0.227416
141-F	0.861961	0.942950	0.777040	0.860705	0.942074	0.775436	0.859572	0.941225	0.774132
111-F	0.912284	0.897265	0.924215	0.911483	0.896157	0.923669	0.910778	0.895106	0.923239
112-F	0.428974	0.429189	0.428868	0.428784	0.428980	0.428706	0.428616	0.428781	0.428577
TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP) DE AMONIACO									
ETAPA 1	857.45	857.39	857.48	857.50	857.45	857.53	857.55	857.50	857.56
ETAPA 2	2284.75	1822.97	2811.89	2415.48	1937.82	2954.11	2533.45	2049.30	3069.60
ETAPA 3	4379.85	5011.46	3759.60	4101.94	4732.22	3494.55	3856.63	4467.04	3283.81
ETAPA 4	5632.47	5636.00	5630.74	5629.36	5632.58	5628.08	5626.61	5629.31	5625.97
total =	13154.52	13327.82	13059.70	13004.28	13160.06	12934.27	12874.24	13003.16	12836.93

TABLA 4.15 (CASO J) ESTUDIO DE LAS TEMPERATURAS DEL CIRCUITO DE SÍNTESIS DE AMONIACO PARA UNA ΔT_3 CONSTANTE. (continuación)

EQUIPO	CASO BASE $\Delta T_3 = 10^\circ$	CASO J.17 $\Delta T_3 = 10^\circ$	CASO J.18 $\Delta T_3 = 10^\circ$	CASO J.19 $\Delta T_3 = 8^\circ$	CASO J.20 $\Delta T_3 = 8^\circ$	CASO J.21 $\Delta T_3 = 8^\circ$	CASO J.22 $\Delta T_3 = 6^\circ$	CASO J.23 $\Delta T_3 = 6^\circ$	CASO J.24 $\Delta T_3 = 6^\circ$
TEMPERATURA DE SALIDA DEL CAMBIADOR ($^\circ F$)									
140-C	79	79	79	79	79	79	79	79	79
117-C	42	42	42	42	42	42	42	42	42
118-C	10	5	15	10	5	15	10	5	15
119-C	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10
CARGAS TÉRMICAS OBTENIDAS (BTU/HR) X 10^{-6}									
140-C	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44	15.44
117-C	34.24	34.24	34.24	34.24	34.24	34.24	34.24	34.24	34.24
118-C	24.08	27.49	20.58	24.08	27.49	20.58	24.08	27.49	20.58
119-C	20.73	17.32	24.23	20.73	17.32	24.23	20.73	17.32	24.23
PRESIÓN ESPECIFICADA DEL TANQUE FLASH (psia) Y TEMPERATURA OBTENIDA ($^\circ F$)									
110-F	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8	68.8
141-F	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0
111-F	30.4 , 0.6	26.5 , -5.0	34 , 5.1	31.5 , 2.0	28 , -2.8	35.5 , 6.9	33 , 3.9	29.7 , -0.9	37 , 9.2
112-F	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7	-26.7
V/F DE TANQUES FLASH									
110-F	0.227273	0.226348	0.227270	0.227303	0.226401	0.227301	0.227342	0.226444	0.227339
141-F	0.861961	0.803913	0.861943	0.862179	0.804272	0.862169	0.862466	0.804567	0.862441
111-F	0.912284	0.917429	0.782467	0.911544	0.916382	0.781098	0.910564	0.915508	0.779422
112-F	0.428974	0.368015	0.463895	0.428964	0.368028	0.464010	0.428953	0.368044	0.464153
TRABAJO DE COMPRESIÓN DE AMONIACO (HP)									
1º ETAPA	857.45	586.12	1158.26	904.38	646.85	1226.30	966.43	697.56	1309.54
2º ETAPA	2284.75	2652.10	2007.86	2187.13	2500.86	1887.30	2058.75	2375.73	1740.58
3º ETAPA	4379.85	4418.12	4379.86	4378.54	4415.78	4378.60	4376.82	4413.85	4376.97
4º ETAPA	5632.47	5674.79	5632.59	5631.11	5672.34	5631.18	5629.32	5670.33	5629.48
total =	13154.52	13331.12	13178.57	13101.15	13235.83	13123.38	13031.32	13157.47	13056.57

FIGURA 4.7.1 HP US. TEMPERATURA
para distintas aproximaciones

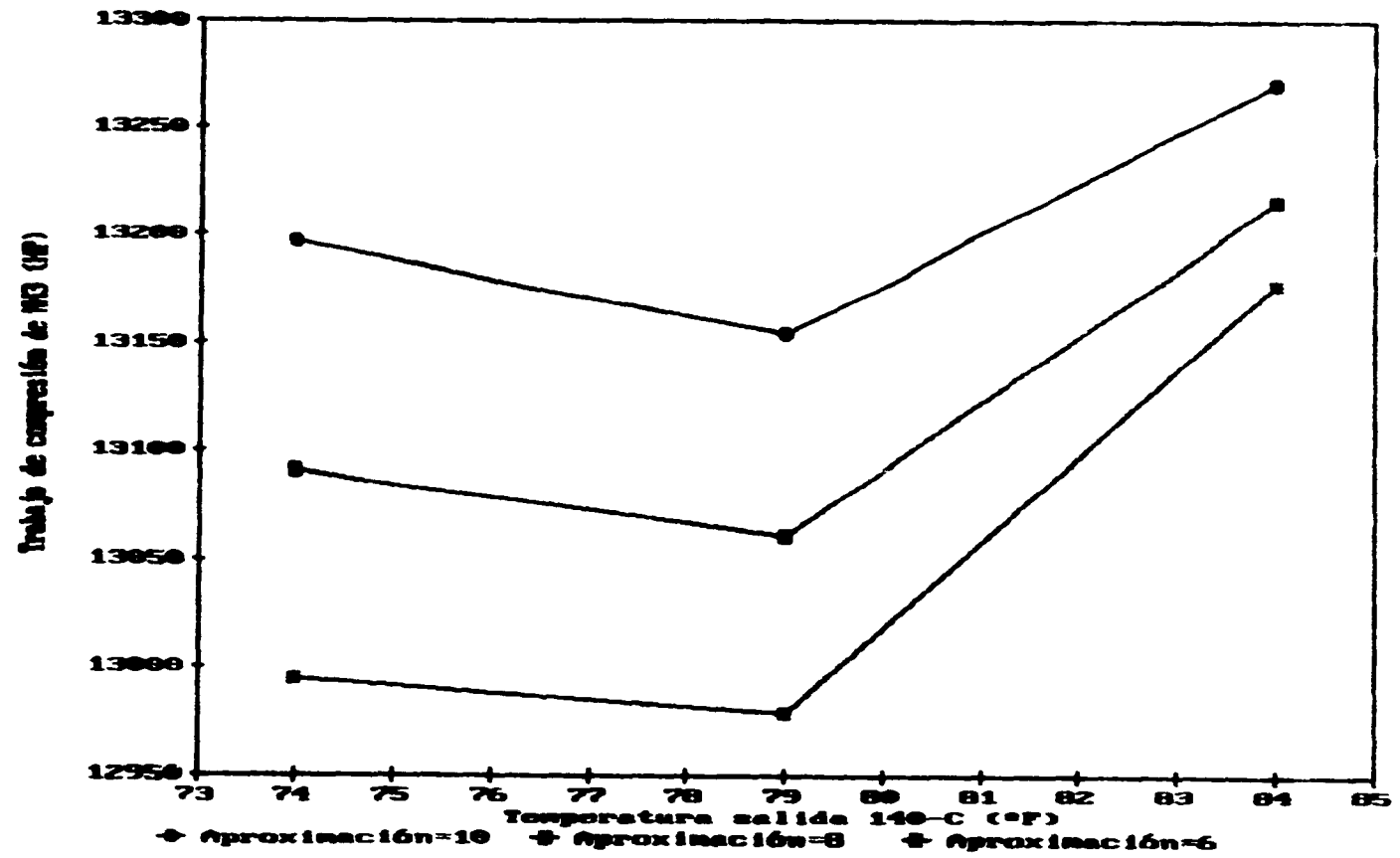


FIGURA 4.7.2 HP US. TEMPERATURA para distintas aproximaciones

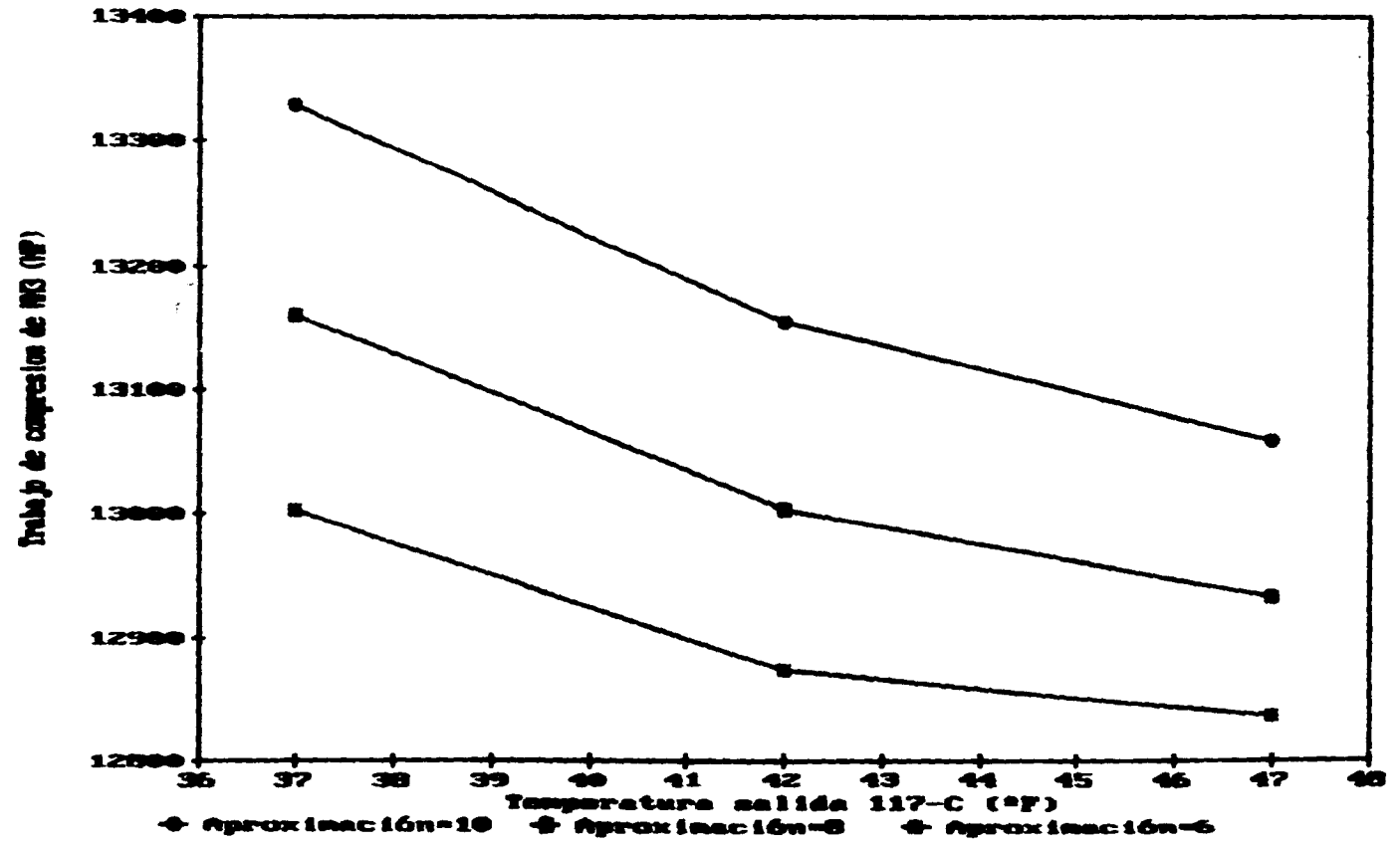
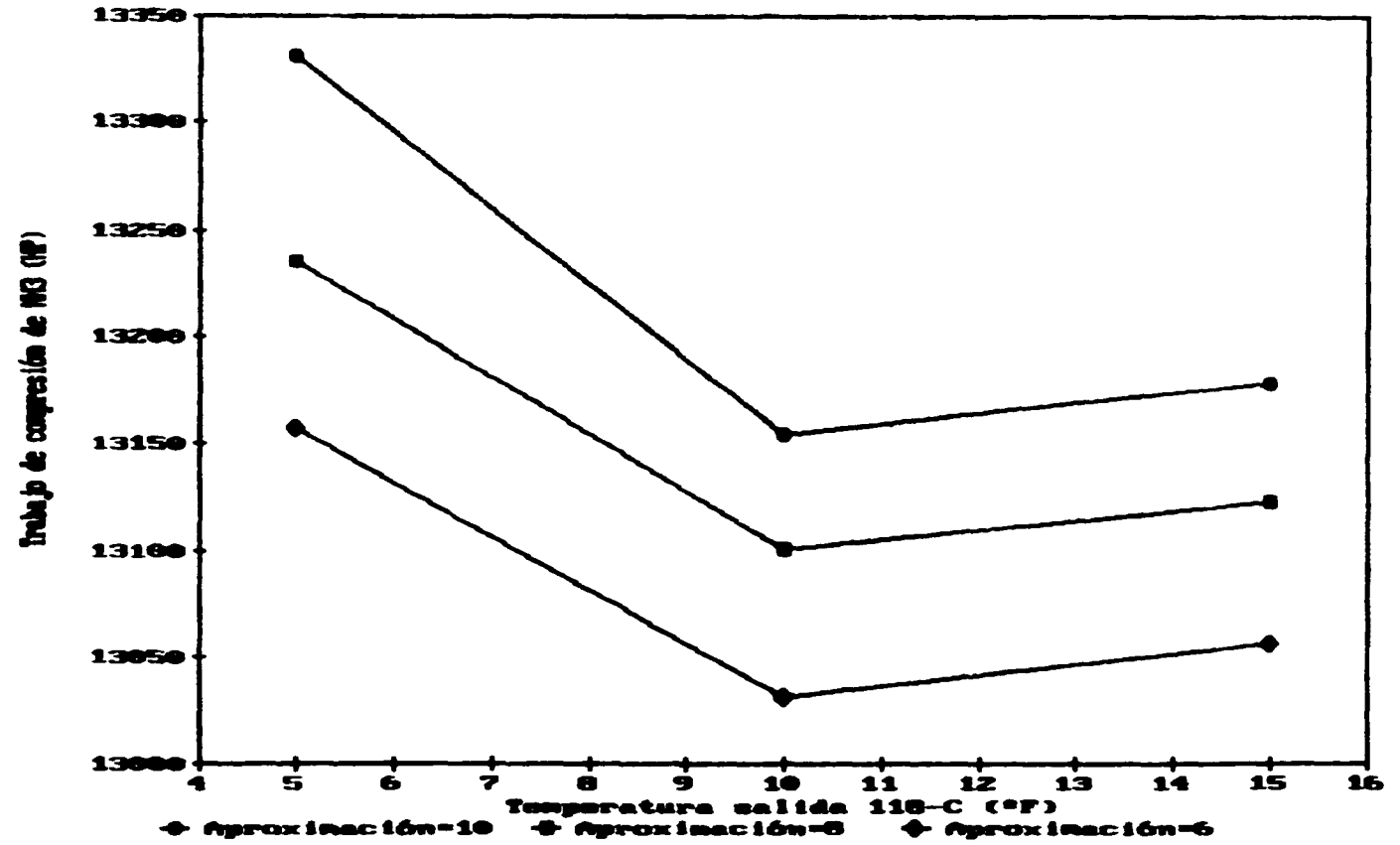


FIGURA 4.7.3 HP US. TEMPERATURA para distintas aproximaciones



**CASO K. ANÁLISIS DE LA ALIMENTACIÓN DE LA "CARGA FRESCA"
DIRECTAMENTE AL CONVERTIDOR DE SÍNTESIS.**

A continuación se presenta una propuesta de cambio del esquema de proceso con el fin de disminuir los servicios de potencia requeridos.

Con el interenfriamiento del compresor de gas de síntesis no es posible condensar toda el agua presente en la corriente (aunque si se logra retirar un 95% de ella), por la que la corriente de "carga fresca" debe mezclarse con la corriente de recirculación, a la cual debe condensársele el amoníaco producido a través de una serie de enfriamientos sucesivos; con esto se logra que el agua también condense y sea arrastrada prácticamente en su totalidad por el amoníaco que se envía a refrigeración.

CARGA FRESCA		GAS DE SÍNTESIS (después de condensación de amoníaco)	
	% MOL		% MOL
N ₂	24.64	N ₂	21.10
Ar	0.32	Ar	3.10
H ₂	73.93	H ₂	62.97
CH ₄	1.09	CH ₄	10.93
H ₂ O	0.01	H ₂ O	0.00
NH ₃	0.00	NH ₃	2.00

La razón por la cual se debe remover el agua presente es porque, al igual que otros compuestos oxigenados, el agua envenena el catalizador empleado en la síntesis de amoníaco.

El manejar los flujos de carga fresca y gas recirculado dentro del circuito de síntesis requiere de mayor enfriamiento y mayor potencia de compresor de recirculación.

Se propone aquí emplear algún método que extraiga el agua de la "carga fresca" de gas de síntesis con el fin de poder alimentarla directamente al Convertidor junto con la recirculación (a la que previamente se le condensó el amoníaco), de modo que se tenga nuevamente la relación 3H₂:N₂ la cual disminuye en cada paso por el Circuito.

Los resultados de la simulación del CASO K se tabulan a continuación con fines comparativos respecto a los del diseño original de la planta.

TABLA 4.16 (CASO K) ALIMENTACIÓN DE "CARGA FRESCA" AL CONVERTIDOR

CARGAS DE LOS CAMBIADORES DEL CIRCUITO (BTU/HR) x10 ⁻⁶		
CAMBIADOR	CASO BASE	CASO K
140-C	15.44	19.32
117-C	34.24	27.72
118-C	20.08	19.58
120-C	40.85	32.24
119-C	20.73	21.62
121-C	111.44	87.99
123-C	149.09	148.49
TOTAL =	391.87	356.96

TRABAJO DE COMPRESIÓN (HP)		
	CASO BASE	CASO K
Etapa 1 de amoníaco	857.45	913.80
Etapa 2 de amoníaco	2284.75	2173.11
Etapa 3 de amoníaco	4379.85	3935.80
Etapa 4 de amoníaco	5632.47	5315.16
Etapa de recirculación	6552.39	5072.7
TOTAL =	19706.91	17413.57

La reducción en el trabajo de compresión es el incentivo para esta propuesta. Un análisis económico determinará si la inversión en el equipo de eliminación de agua se paga con el ahorro en el trabajo de compresión.

La Figura 4.8 muestra el esquema de proceso cuando se introduce un método que elimine por completo el agua de la corriente, y sea posible alimentar la "carga fresca" de manera directa al *Convertidor de amoníaco*.

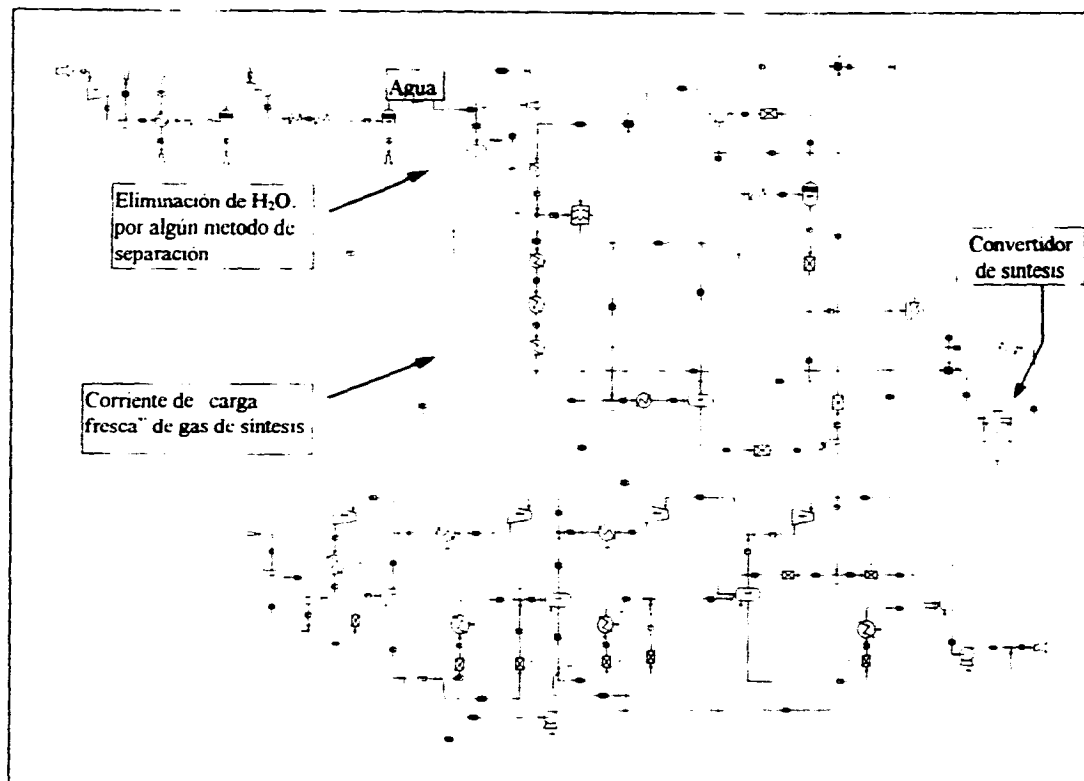


FIGURA No 4 8 ESQUEMA DE PROCESO CON ALIMENTACIÓN DE "CARGA FRESCA" DIRECTAMENTE AL CONVERTIDOR DE AMONIACO

CASO L. ANÁLISIS DE LA INTRODUCCIÓN DE UNA TURBINA PARA RECUPERAR TRABAJO EN LA EXPANSIÓN DE LOS GASES PURGADOS.

Los gases que se envían a purga en el Circuito de Síntesis (después de que ha ocurrido la reacción de obtención de amoníaco), son enfriados hasta -10°F para condensar la mayor parte de amoníaco presente; los gases remanentes se expanden y se envían a combustible (se puede recuperar algo más de amoníaco por medio de absorción antes de que pasen a combustible).

En la expansión antes mencionada no se recupera el trabajo por medio de una turbina, sino simplemente se tira la presión empleando para ello una válvula. Los resultados del análisis de trabajo perdido indica que se genera una gran cantidad de entropía en este paso, por lo que el presente caso propone substituir la válvula por una turbina.

Como la purga contiene algo de amoníaco, es preciso cuidar que al disminuir la presión en la turbina no se alcance temperaturas muy bajas a las que pudiera solidificar el amoníaco ($T_{\text{solidif}} = -108^{\circ}\text{F}$), adicionalmente, el emplear temperaturas muy bajas en el proceso requiere de materiales especiales en los equipos y tuberías, lo cual aumenta la inversión.

En el esquema propuesto (Ver Figura 4.9), la temperatura mínima alcanzada es de -45°F y se recuperan 397.3 HP por medio de la turbina (resultado de la simulación para este CASO L), potencia que puede ser empleada para accionar motores pequeños.

Análisis:

Se recuperan $397.3\text{ HP} = 1'010'922.33\text{ BTU/hr}$

en lugar de perder $W_p = 1'714'809.44\text{ BTU/hr}$, que es el resultado obtenido del cálculo de trabajo perdido para la válvula incluida en el diseño (ver Tabla 3.8, sistema 44).

De lo anterior se concluye que resulta conveniente la introducción de una turbina que pueda accionar motores pequeños, pues la temperatura alcanzada en la expansión no es demasiado baja, y muy probablemente los materiales empleados en los equipos y tuberías no aumentarán grandemente la inversión.

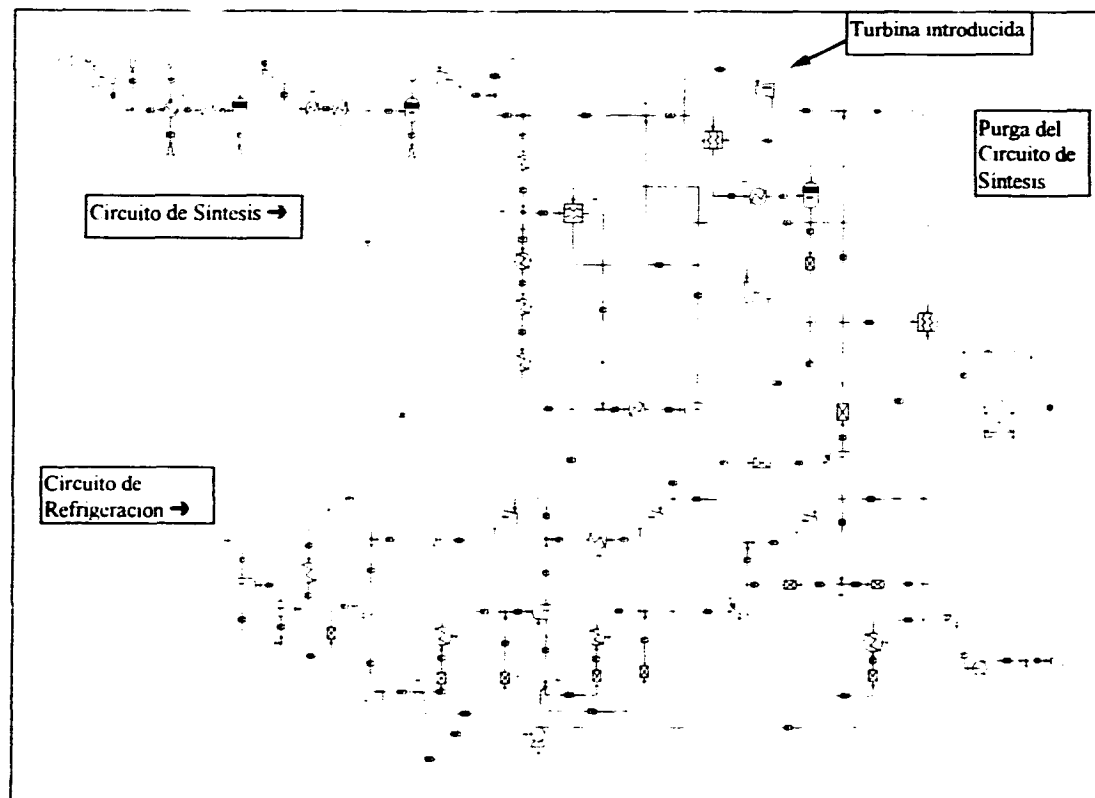


FIGURA No. 4.9 ESQUEMA DE PROCESO CON INTRODUCCIÓN DE LA TURBINA

CAPÍTULO V
DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS
OBTENIDOS EN LOS CASOS
DE ESTUDIO

V DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS DE LOS CASOS DE ESTUDIO.

Los Casos de Estudio realizados (del A al L) han permitido conocer con detalle la estructura que presenta el diseño de las Secciones de la Planta de Amoniaco.

Tambien ha sido posible a través de ellos, conocer la respuesta del sistema a variaciones en las condiciones de operacion. Esta respuesta ha sido medida a través del consumo de potencia (caballos de fuerza) que se deben emplear para mantener el amoniaco producido en condiciones tales que proporcionen servicios de enfriamiento en el Circuito de Sintesis.

Adicionalmente se estableció la dependencia que guardan el Circuito de Refrigeración con respecto a la cambiadores del Circuito de Sintesis donde condensa el amoniaco producido.

Finalmente también se ha detallado la manera como operan los compresores de los dos Circuitos de modo que consuman la menor potencia.

A continuación se presenta un resumen de las conclusiones que se obtienen del análisis de los Casos de Estudio.

1 Caso A *Análisis del compresor de gas de sintesis*

El compresor de gas de sintesis requiere diferentes relaciones de compresión en cada uno de los pasos. Las condiciones de diseño están muy cerca del punto óptimo.

2 Caso B *Análisis de la presión en el Circuito de Sintesis*

Un aumento en la presión del Circuito de Sintesis trae como consecuencia una mayor potencia neta de compresión, sumando los requerimientos del compresor de sintesis y del compresor de refrigeración. Un aumento de 10 psia a la presión del Circuito de sintesis, ahorra 200 HP de potencia. En consecuencia, el Circuito de Sintesis debe operar a la mayor presión posible, que permita una operación segura.

3. *Caso C. Análisis de la composición de metano en el Circuito de Síntesis*

Un aumento en la cantidad de inertes en el gas de síntesis, conlleva un aumento en los requerimientos de potencia del Circuito de Síntesis. Es necesario vigilar la operación de los equipos anteriores, en especial la Sección de Reformación, para evitar fuga de CH_4 en el efluente del Reformador Secundario; así como en la Sección de Absorción de CO_2 , ya que todo el CO_2 que no se absorba, se transformará a CH_4 en el reactor de metanación. Un aumento del 0.1% mol de CH_4 en el gas de síntesis necesitará 60 HP de potencia adicionales.

4. *Caso D. Análisis de la conversión del Reactor*

La conversión de hidrógeno a amoníaco es determinante para el consumo de potencia del Circuito de Síntesis. Un aumento del 1% en la conversión de hidrógeno ahorrará 300 HP. Es importante, por lo tanto que la conversión se mantenga en valores cercanos al diseño para evitar consumos irracionales de energía.

5. *Caso E. Análisis de la purga del Circuito de Síntesis*

La concentración de inertes en el Circuito de Síntesis se regula con la cantidad de gas purgado. Un flujo pequeño de purga aumenta la concentración de inertes, disminuye la pureza del producto y requiere un mayor potencia en el compresor de síntesis. Por otro lado, un gasto alto de gases de purga trae las ventajas señaladas, pero disminuye la producción de amoníaco por la pérdida de éste en el gas de purga. El flujo óptimo es una variable que debe minimizar una función de costos:

$$\text{COSTO} = (\text{COSTO DE COMPRESIÓN}) - (\text{COSTO DE AMONÍACO PRODUCIDO})$$

El flujo de purga debe controlarse a través del análisis del contenido de inertes en el Circuito de Síntesis.

6. *Caso F. Análisis de la alimentación de amoníaco líquido al Circuito de Refrigeración*

La entrada del amoníaco líquido al Circuito de Refrigeración, está localizada en el punto óptimo. Cualquier otro sitio de localización requerirá un mayor trabajo de compresión. Lo anterior se debe a que los tanques 111-F y 112-F son críticos en la operación del Circuito de

Refrigeración. La alimentación de amoníaco ayuda a que se requiera un flujo menor de amoníaco proveniente de niveles anteriores del Circuito de Refrigeración.

7. *Caso G. Análisis de la cantidad de amoníaco líquido presente en el Circuito de Refrigeración*

El flujo de amoníaco que circula a través de los diferentes niveles del Circuito de Refrigeración debe controlarse con toda precisión, mediante el nivel del tanque 111-F. Un flujo en exceso tiene como consecuencia una mayor potencia de compresión. Un flujo menor que el mínimo requerido, conllevará el que no haya suficiente amoníaco para proveer la refrigeración y se secará algunos de los tanques, principalmente el 111-F.

8. *Caso H. Análisis de las temperaturas de condensación de amoníaco en el Circuito de Síntesis*

9. *Caso I. Análisis de las presiones de equilibrio del Circuito de Refrigeración de amoníaco*

10. *Caso J. Análisis del efecto combinado de las temperaturas de condensación de amoníaco en el Circuito de Síntesis y las presiones de equilibrio en el Circuito de Refrigeración.*

De los Casos de Estudio H, I y J se han extraído las condiciones de operación que dan como resultado un mejor aprovechamiento de los requerimientos de potencia de los compresores. Con estas condiciones de operación se conformó la siguiente **Propuesta** para el esquema de las Secciones de Síntesis y Refrigeración.

A continuación se enumeran las características que se han modificado del **Caso Base** con el fin de reducir los requerimientos de potencia de compresores y los requerimientos de enfriamiento para condensar amoníaco.

La conversión del Convertidor de Síntesis, tendrá un valor de 25% (Caso D.1)

El flujo de amoníaco que circula por el Circuito de Refrigeración será:

$$\text{FLUJO (lbmol/hr)} = 0.565x(\text{Líquido})_{\text{Tanque 110-F}}$$

(Caso G)

Debe hacerse notar que aunque este valor de flujo aparece en el Caso Base, no es el que emplea el diseño. $FLUJO (lbmol/hr) = 0.555x(Líquido)_{Tanque 110-F}$, sino que se encontró a partir de la simulación de modo que los equipos del Circuito de Refrigeración no se secan.

Para una aproximación de temperaturas de 8°F, se fijan las temperaturas de salida de los cambiadores del Circuito de Síntesis a los siguientes valores:

Cambiador	Temperatura de salida (°F)*
140-C	79
117-C	47
118-C	10

* Casos J 3, J 13 Y J 19

Con estas condiciones de operación, se obtiene una reducción en la potencia de los compresores (cerca del 17%), aunque a la par se reducen las cargas de los cambiadores del Circuito de Síntesis que condensan al amoníaco producido. (Ver Tabla 5.1)

TABLA 5.1 RESULTADOS DE LA POTENCIA DE COMPRESORES Y CARGA TÉRMICA PARA LAS CONDICIONES PROPUESTAS

	CASO BASE	PROPUESTA
Potencia Total (HP)	42.547 2	41.815.4
Carga térmica total de los cambiadores donde condensa amoníaco (BTU/hr)x10 ⁴	155 0	152 8

Si el Circuito de Síntesis opera a presiones más altas que las de diseño (ver Caso B.1) se tendrá como consecuencia una mayor reducción de los requerimientos de potencia.

En este contexto, resultaría interesante evaluar el costo de equipos y tuberías que permitieran su utilización a condiciones más severas de presión y compararla con los

costos de producción de vapor de alta presión que accionan a los compresores. Todo esto con el fin de corroborar si resulta viable la operación del Circuito a altas presiones para economizar en los requerimientos de potencia.

Si se añade a la **Propuesta** original la simulación de la operación del Circuito de Síntesis a las presiones especificadas en el Caso B I, el requerimiento total de potencia es de $41,663 \text{ HP}$ que es 2.1% menor a la potencia de diseño, sin que se modifique la carga térmica total

11 **Caso K. Análisis de la alimentación de la "carga fresca" directamente al Convertidor de síntesis de amoníaco**

La eliminación total del agua en el gas de síntesis de amoníaco, antes de introducirlo al Circuito de Síntesis, permite localizar la alimentación después de la sección de condensación de amoníaco, con los consiguientes ahorros:

- Disminución de 2300 HP de trabajo de compresión
- Disminución de 35×10^6 BTU/hr de carga térmica de refrigeración

Estos ahorros permitirán evaluar la viabilidad económica de diferentes procesos para eliminar el agua.

12 **Caso L. Análisis de la introducción de una turbina para recuperar trabajo, en la expansión de los gases purgados.**

La instalación de una turbina en los gases de purga puede recuperar 400 HP. Este ahorro permitirá evaluar la viabilidad económica de la instalación de este equipo

CAPÍTULO VI
CONCLUSIONES

VI CONCLUSIONES

Primeramente es importante citar la conveniencia del empleo de Simuladores para el estudio de esquemas de proceso, tanto por su accesibilidad como por el hecho de que representan un menor costo que otras opciones de análisis. Además los ordenadores pueden realizar cálculos con gran rapidez, lo que permite llevar a cabo una gran cantidad de estudios en poco tiempo.

El desempeño de la Planta de Amoniaco obtenido a través de la Simulación demostró tener características muy similares a las condiciones de diseño. Esto hizo posible obtener un buen modelamiento a través del empleo de ecuaciones de estado contenidas en los Simuladores.

El análisis termodinámico del esquema de proceso mostró ser de gran utilidad en la localización de zona o equipos de proceso que no hacen un uso adecuado de la energía proporcionada; en este trabajo de tesis, se detectaron esas zonas y se analizaron las causas por las que la cantidad de trabajo perdido es grande.

De esta detección de zonas con gran cantidad de trabajo perdido surgió el incentivo para analizar las condiciones de operación dentro de un intervalo con el fin de conocer la respuesta del esquema. Así los casos de estudio proporcionaron el criterio para decidir si los valores de las variables de diseño son los mejores, o si se puede hacer alguna modificación que permita disminuir la cantidad de trabajo perdido, y por ende el consumo total de energía del proceso.

Pudo corroborarse que las condiciones de operación de la Planta de Amoniaco son en su gran mayoría las mejores, quedando limitadas sólo donde presentan suma importancia los costos de equipo: como en los casos de operación a bajas temperaturas, a presiones altas o el aumento de áreas de transferencia de calor.

Las modificaciones realizadas al esquema de la planta producen una reducción de los servicios muy pequeña, lo cual conduce a verificar que el esquema de proceso con que fue diseñada la Planta de Amoníaco es muy cercano al *óptimo*, esto es, que se ha realizado la mejor selección de las variables de operación, de modo que la planta opere de manera más eficiente. empleando el menor nivel energético, pero conservando una alta productividad.

Sin embargo, puede verse que este tipo de análisis

Cálculo de Trabajo Perdido + Casos de Estudio,

puede aplicarse a cualquier proceso; con lo que quedarán indicados los pasos del proceso donde exista mayor cantidad de trabajo perdido. Si el proceso se encuentra operando en condiciones de sus variables tales que las cantidades de trabajo perdido no son grandes (cercano al *óptimo*), se podrá entonces realizar un estudio económico de costos de equipo vs costos de operación que conduzca a disminuir aún más las irreversibilidades del proceso

Por el contrario, si el proceso no cuenta con las mejores condiciones de operación, el análisis completo permitirá establecerlas, con el fin de que la energía disponible del proceso sea empleada eficientemente

• BIBLIOGRAFÍA

• ANEXO

BIBLIOGRAFÍA EMPLEADA

- Balzhiser, Richard E., Samuel, Michael R. y Eliassen, John D. "Chemical Engineering thermodynamics. The study of energy, entropy and equilibrium" Prentice Hall Inc. New Jersey 1972
- Burghardt, M. David "Ingeniería termodinámica" 2^{da} Edición (trad. del inglés Lic. José Carlos Escobar Hdez) Edit Harla. México 1984
- Douglas, James M "Conceptual design of chemical processes" 1988
- Edgar, T F and Himmelblau, D M. "Optimización of chemical Processes" Mc Graw-Hill, Inc 1988
- Green, Richard (Editor) "Process technology and flowsheets" Volume II Chemical Engineering Magazine. McGraw-Hill New York 1983
- Felder, Richard M y Rousseau, Ronald W "Principios elementales de los procesos químicos) 2^{da} Edición (trad. M^a. Eugenia Costas B.) Addison-Wesley Iberoamericana Estados Unidos 1991
- Henley, Ernest J and Bieber, Herman "Chemical engineering calculations. Mass and energy balances" Mc Graw-Hill Book Co. Inc 1959
- Himmelblau, David M "Basic principles and calculations in chemical engineering" Prentice Hall, Inc New Jersey 1962
- Husan, Asghar "Chemical process simulation" Wiley eastern limited 1986
- Jennings, J R. (Editor) "Catalytic ammonia synthesis Fundamentals and practice" Plenum Press, Nueva York y Londres 1991

- Knapp, H. et al., "Vapor-liquid equilibria for mixtures of low boiling substances",
DECHEMA Chemistry Data Series, 6, 1982
- Ludwig, Ernest E "Applied process design for chemical and petrochemical plants"
Volume 3 2nd Edition Gulf publishing Co 1983
- Moring, Virgil Faires "Thermodynamics of heat power" The MacMillan Company
New York 1958
- Newman, A. Hall e Ibele, Warren E "Engineering thermodynamics"
Prentice Hall Inc 1960
- Reklaitis, G V, Ravindran, A. y Ragsdell, K M. "Engineering optimization, methods and
applications" John Wiley and Sons, Inc 1983
- Reklaitis, G. V "Balances de materia y energia" 1989
- Smith, J.M. y Van Ness, H.C "Introduction to chemical engineering thermodynamics"
1987
- Stocchi, E "Industrial Chemistry Volume I" (trad al inglés K.A.K. Lott y E.L. Short)
aEllis Horwood Series 1990
- Strelzoff, Samuel. "Technology and manufacture of ammonia" John Wiley and Sons, Inc.
Estados Unidos 1981
- User Guide. Aspen Plus™ Second Edition. Aspen Technology, Inc Cambridge, M. A
1990.
- Walas, Stanley M. "Chemical process equipment. Selection and design"
Butterworth-Heinemann Series 1990

ANEXO

PROPIEDADES DE AMONIACO PURO*

Peso Molecular	17.03
Punto de congelación	-77.7°C
Punto de ebullición	-33.35°C
Temperatura crítica	113°C
Presión crítica	112.5 atm
Densidad crítica	0.235 g/cm ³
Compresibilidad crítica	0.242
Conductividad térmica crítica	0.522 kJ/(K h m)
Densidad de líquido	
a 0°C, 1 atm	0.6386 g/cm ³
a -33.43°C, 1 atm	0.682 g/cm ³
a 40°C	0.580 g/cm ³
Densidad del gas	
a 0°C, 1 atm	0.7714 g/L
a -33.43°C, 1 atm	0.888 g/L
Presión de vapor	
a 25.7°C	10 atm
a -77.7°C	6.077 kPa
Estructura molecular	pirámide simétrica
ángulo de enlace H-N-H	106.67°
longitud de enlace N-H	1.0124 Angstrom
Potencial de ionización	10.2 eV
Refracción molar	5.448 cm ³ /g mol
Índice de refracción, líquido a 16.5°C	1.325
Entalpía de disociación de enlace	
H-NH ₂ , a 25°C	431 kJ/mol
H-N a 25°C	388 kJ/mol
Momento dipolar	1.47 debye
Constante de ionización en agua	
a 25°C (pK)	9.25
Propiedades del gas ideal, 25°C y 1 bar	
Calor específico (C _p)	35.652 J/K mol
Entropía estándar de formación	192.774 J/K mol
Entalpía estándar de formación	-45.898 kJ/mol
Energía libre de formación	-16.367 kJ/mol
Constante de equilibrio (log K _f)	2.867

*Fuente de los datos:

Kirk Othmer *Encyclopedia of Chemical Technology, Handbook of Chemistry and Physics,*

EFFECTOS TOXICOLÓGICOS DEL AMONIACO

Efecto	Tiempos de exposición	Concentraciones	
		ppm	mg/m ³
Tolerable	1 h	390	228
Peligroso	30-50 min	2 500-3 500	1 900-2 560
Letal	Pocos segundos	5 000-10 000	3 800-7 600

El amoniaco puede, dentro de ciertos límites, formar mezclas explosivas con el aire, lo que puede causar peligrosos accidentes

Límites de flamabilidad de amoniaco en aire: 16 y 25%

Límites de flamabilidad de amoniaco en oxígeno: 15 y 79%

ENTALPÍAS PARA AMONIACO PURO*

Amoniaco saturado

Temp (°F)	Presión abs (lb/in ²)	Volumen (ft ³ /lb)		Entalpia (Btu/lb)	
		Líquido	Vapor	Líquido	Vapor
-60	5.55	0.02278	44.73	-21.2	589.6
-50	7.67	0.02299	33.08	-10.6	593.7
-40	10.41	0.02322	24.86	0.0	597.6
-30	13.90		18.97	10.7	601.4
-20	18.30	0.02369	14.68	21.4	605.0
-16	20.34		13.29	25.6	606.4
-12	22.56		12.06	30.0	607.8
-8	24.97		10.97	34.3	609.2
-4	27.59		9.991	38.6	610.5
0	30.42	0.02419	9.116	42.9	611.8
4	33.47		8.333	47.2	613.0
8	36.77		7.629	51.6	614.3
12	40.31		6.996	56.0	615.5
16	44.12		6.425	60.3	616.6
20	48.21	0.02474	5.910	64.7	617.8
24	52.59		5.443	69.1	618.9
28	57.28		5.021	73.5	619.9
32	62.29		4.637	77.9	621.0
36	67.63		4.289	82.3	622.0
40	73.32	0.02533	3.971	86.8	623.0
50	89.19	0.02564	3.294	97.9	625.2
60	107.6	0.02597	2.751	109.2	627.3
70	128.8	0.02632	2.312	120.5	629.1
80	153.0	0.02668	1.955	132.0	630.7
90	180.6	0.02707	1.661	143.5	632.0
100	211.9	0.02747	1.419	155.2	633.0
110	247.0	0.02790	1.217	167.0	633.7
120	286.4	0.02836	1.047	179.0	634.0

*Datos tomados de: Reklaitis, G. V. *Balances de materia y energía*. (1989)

PROPIEDADES CRÍTICAS DE LA MEZCLA DE GAS DE SÍNTESIS

	Tc (K)	Pc (bar)	Vc (cm ³ /mol)	Zc
N ₂	126.2	33.9	89.8	0.290
Ar	150.8	48.7	74.9	0.291
H ₂	43.6	20.483	51.5	0.291
CH ₄	190.4	46.0	99.2	0.228
H ₂ O	647.3	221.2	57.1	0.235
NH ₃	405.5	113.5	72.5	0.244