

77



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

GENERACION DEL ESQUEMA DE SIMULACION
A ESTADO ESTACIONARIO DE LA PLANTA DE
ETILENO DEL COMPLEJO PETROQUIMICO
PAJARITOS



TESIS

INGENIERIA PROFESIONAL EN
FACULTAD DE QUIMICA

PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO

PRESENTA

DAVID HUERTA SAAVEDRA



MEXICO, D. F.

286713

2000



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

**GENERACION DEL ESQUEMA DE SIMULACION A
ESTADO ESTACIONARIO DE LA PLANTA DE ETILENO
DEL COMPLEJO PETROQUIMICO PAJARITOS**

Tesis para obtener el título de Ingeniero Químico

Presenta:

David Huerta Saavedra

México, D.F. 2000

Jurado asignado:

Ing. Francisco Torres Roldan

Ing. Celestino Montiel Maldonado

Ing. José Jorge Núñez Alba

Ing. María Cristina Torres Lomeli

Q. Elena Agueda Cenicerros Gómez

Sitio donde se desarrolló el tema:

Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos.

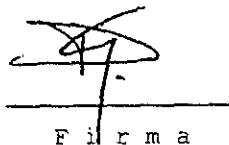
Edificio E. Facultad de Química. UNAM

Asesor : Ing. Celestino Montiel Maldonado



Firma

Sustentante: David Huerta Saavedra



Firma

**SIMULACIÓN A ESTADO ESTACIONARIO DE
LA PLANTA DE ETILENO DEL COMPLEJO
PETROQUÍMICO PAJARITOS**

PROFESIONISTA

Espero que en un futuro todo se reduzca a que llegue "El día de la lectura" y después el día de la educación. Mientras tanto quiero agradecer el apoyo que me han dado para formarme como profesionista a todos mis maestros de la carrera (con ejemplos de que ser y que no ser).

Al ingeniero Celestino Montiel por darme mi primera oportunidad para desempeñarme como profesionista, ya que ni siquiera fue mi maestro en la carrera y no me conocía salvo por una recomendación de Julia Castro, gracias por creer en los estudiantes.

Al ingeniero Jorge Núñez por mostrarme que ser ingeniero va mas allá de hacer calculo y tratar con planos y equipos. Lo más importante es saber tratar con gente y tener ética y compromiso social.

A los ingenieros Pablo Altamirano y Rafael Gutiérrez por mostrarme como se desempeña un ingeniero en la vida cotidiana, por mostrarme el como ser excelente y como se deben manejar las situaciones con arrojo y aplomo, quiero decirles que yo he relatado sus verdaderas y ciertamente acontecidas hazafias sin quitar bien ni agregar mal

AGRADECIMIENTOS

Este trámite significa la culminación de un sueño que tuve, uno de los que tanto tengo; uno mas por los que cada día me siento poderoso.

Indiscutiblemente quiero agradecer a toda aquella gente que me ha apoyado en todos los aspectos para que yo pudiera realizar muchas cosas. A mi madre por lo que me dio, a mi tía Ana María por darme un año asilo, a Naty, mis tías Virginia, Luisa y Coco, a mis primas, a la gente que me facilitó computadora para hacer este trabajo (Celestino, Palafox, Luis Fernando Pérez, Ismael, GATX, Fundación Telmex, Sala Multimedia, aunque no fue necesario a Vero también.).

Agradezco a Vero que me haya ayudado con los tramites en la universidad, a los egipcios por su amistad y porque si manejan también cargan y reman.

EÁ!

llovatar... inmolo el presente trabajo a ti y a toda aquella gente que ya no esta conmigo, que por ironias del destino partió en un abrir y cerrar de ojos...a Fernando Gómez de Paz (esta es también tu tesis amigo), a Guadalupe López (quisiera que estuvieras aqui) a Diter (también quisiera que estuvieras aqui), al Topo (gracias por enseñarme tanto, enhorabuena donde quiera que estés).

Es menester que en este momento mencione a la gente poderosa que me inspira: Gracias Doctor, Sonrisa Ácida, Brown Mouse, Vero, Desalineado a Palafox ...al minimy.

Si no menciono a Nadia y al Gordito se van a sentir. Gracias a ambos

Sea Pues!...

dejemos que se cante la canción.

El Silbador

CONTENIDO

CAPÍTULO		PAG.
	OBJETIVOS	3
	INTRODUCCIÓN	4
CAPÍTULO I	GENERALIDADES	5
CAPÍTULO II	LA PRODUCCIÓN DE ETILENO	9
CAPÍTULO III	LA PRODUCCIÓN DE ETILENO EN EL C.P.P	19
CAPÍTULO IV	LA SIMULACIÓN DE LA PLANTA	30
CAPÍTULO V	RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN	41
CAPÍTULO VI	ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS	73
CAPÍTULO VII	CONCLUSIONES Y COMENTARIOS	76
REFERENCIAS		78
APÉNDICE A	PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS DEL ETILENO	80
APÉNDICE B	MODELAMIENTO DEL REACTOR DE PIRÓLISIS	82
APÉNDICE C	BREVE ESTUDIO PARAMÉTRICO	94

OBJETIVOS

El presente trabajo tiene por objetivos los siguientes:

1. Generar un Esquema de Simulación a Estado Estacionario para la Planta de Etileno del Complejo Petroquímico Pajaritos con las siguientes características:
 - 1.1. El esquema incluirá el reactor de pirólisis y todas las secuencias de separación.
 - 1.2. En el modelo del reactor se utilizará una cinética molecular para representar el reactor (una cinética de conversión fija no es suficiente para generar un esquema flexible, utilizar un modelo cinético mecánico es una tarea compleja que queda fuera de los objetivos del presente trabajo).
 - 1.3. El esquema incluirá los sistemas de refrigeración integrados a toda la planta (se modelarán los intercambiadores de calor que involucren a los sistemas de refrigeración con área y coeficiente de transferencia de calor fijos).
 - 1.4. El esquema debe de ser lo suficientemente sólido como para poder trabajar si cambiamos las condiciones de operación.

INTRODUCCIÓN

El etileno es hoy en día el producto petroquímico que constituye la base de la industria petroquímica del mundo, en México era considerado hasta hace pocos años como un compuesto que solamente PEMEX lo podía producir.

Una de las necesidades fundamentales del Complejo Petroquímico Pajaritos es la de elevar la rentabilidad y competitividad de las plantas que conforman dicho complejo. Para poder cumplir con lo anterior es necesario poder llevar a cabo la Optimización de las Plantas de Proceso; sin embargo, para realizar esto es indispensable contar con un Esquema de Simulación de la Planta que sea confiable y capaz de representar el comportamiento a Estado Estacionario lo más cercano posible a la realidad.

El presente trabajo tiene por objetivo construir el Esquema de Simulación a Estado Estacionario de la Planta de Etileno del Complejo Petroquímico Pajaritos de PEMEX. El tener un Esquema de Simulación nos brinda muchos beneficios, entre ellos podemos citar:

- Realizar Estudios Paramétricos
- Servir como base para llevar a cabo la Optimización de la Planta
- Servir como base para realizar estudios de Ahorro de Energía
- Servir como punto de partida para realizar Estudios de la Dinámica del Proceso

Primeramente veremos la importancia que tiene el etileno en la industria química y porque se le llama la piedra angular de la petroquímica, después continuaremos con generalidades acerca de su producción y detalles de cómo es el proceso de producción de etileno en el Complejo Petroquímico Pajaritos. Finalmente veremos como generamos el esquema de simulación de la planta y analizaremos los resultados obtenidos; por último se presentan las conclusiones obtenidas en el presente trabajo.

CAPÍTULO I

GENERALIDADES

LA IMPORTANCIA DEL ETILENO

Si existe un compuesto que puede considerarse como la base de la industria petroquímica este es el etileno (Ref. 9). El etileno apareció en la industria en los años cuarenta y rápidamente ganó terreno en la petroquímica hasta ser hoy en día el compuesto petroquímico más producido a nivel mundial (solo después del amoníaco si este se considera como compuesto petroquímico).

En un principio el etileno se usó como sustituto del acetileno ya que era menos peligroso su manejo, menos costosa su producción y servía de igual manera aunque era menos reactivo (la diferencia entre el acetileno y el etileno es un segundo enlace pi; el cual le confiere mayor capacidad de reaccionar), en 1984 prácticamente el etileno había sustituido por completo al acetileno en todos los procesos (en que se usaba como materia prima). Aunque el etileno no tiene aplicación como producto final; es la materia prima de más de 50 productos obtenidos por procesos muy diversos, que son y han sido claves para el desarrollo de la industria química del mundo. Entre sus derivados más importantes tenemos que mencionar al Polietileno (en todas sus variedades) y al óxido de etileno que respectivamente son fundamentales en la industria de los polímeros y de los surfactantes. En la tabla 1.1 podemos ver los principales derivados del etileno.

Desde que comenzó a producirse el etileno en los años cuarenta no ha cesado la investigación básica y aplicada que se enfoca en este compuesto petroquímico, los avances se han dado en todo el proceso de producción, manejo y transportación, esto demuestra claramente el papel tan importante que ha desempeñado y desempeña actualmente en toda la industria petroquímica, simplemente desde 1974 hasta 1998 existen más de 400 patentes norteamericanas registradas; que tratan sobre nuevos equipos y modificaciones al proceso de producción.

Hasta principios de los años sesenta se había logrado una reducción sustancial de los costos de producción debido a las mejoras tecnológicas y a la construcción de plantas cada vez más

grandes, la crisis del petróleo de los años setenta trajo consigo que se dieran mejoras sustanciales en el proceso de producción (en la utilización de la materia prima y en la utilización de la energía).

Tabla 1.1. Productos derivados del etileno y sus usos

<i>Proceso</i>	<i>Producto</i>	<i>Usos</i>
Polimerización	Polietileno Alta Densidad	Películas, Moldes de inyección.
	Polietileno Baja Densidad	Moldes de soplado, tuberías, películas.
	Copolimeros de Poliestireno	Películas aislantes eléctricos.
	Copolimeros-Terpolimeros de etileno-propileno	Partes automotrices, llantas, cables y alambres, modificadores termoplásticos.
Oxidación	Óxido de etileno	Materia prima para producir etilenglicoles y etilenaminas que se usan como surfactantes, refrigerantes, fibras y absorbentes, químicos textiles respectivamente.
Oxidación	Acetaldehído y acetato de vinilo	Materia prima para elaborar Acetato de Polivinilo, alcoholes polivinílicos, Pentacritrol, los cuales se usan como emulsificantes de pinturas, adhesivos y resinas respectivamente.
Halogenación	Dicloruro de etileno	Disolvente, desengrasante de metales.
	Cloruro de etilo	Refrigerantes, disolventes, agentes para etilación.
	Dibromoetileno	Agente para la recuperación del plomo.
Alquilación	Bromuro de etilo	Agente para etilación, solvente, refrigerante.
	Etilbenceno	Materia prima para formar el estireno que a su vez es materia prima para formar el poliestireno, el cual se utiliza en empaques, artículos del hogar, uso automotriz, teléfonos, muebles, llantas, adhesivos.
Hidratación	Etilanilinas	Colorantes, farmacéuticos, pesticidas.
	Alquilatos de aluminio	Síntesis de catalizadores
	Etanol	Cosméticos, disolventes industriales, detergentes, saborizantes.
	Etilaminas	Inhibidores de corrosión, químicos para hule, insecticidas

La producción de etileno se lleva a cabo por medio del cracking térmico (pirólisis), este proceso ha imperado en la industria desde que comenzó a producirse y aunque existe otros procesos de producción (hidrólisis de etanol y procesos catalíticos) no han tenido repercusión a nivel industrial.

El cracking térmico consiste en someter a hidrocarburos (excepto el metano) a altas temperaturas (1290°F-1650°F o 700 - 900 °C) en reactores tubulares que se denominan hornos (dado que proporcionan la energía necesaria por medio de calentamiento a fuego directo), la alta temperatura le confiere a los hidrocarburos una gran energía que ocasiona que se fragmenten las cadenas (de 3 y más carbonos) y se formen alquenos de bajo peso molecular: el etileno (C₂H₄), el propileno (C₃H₆) y butilenos (C₄H₈), dependiendo del tipo de corriente que se someta al cracking se obtendrá una distribución de alquenos y subproductos diferente.

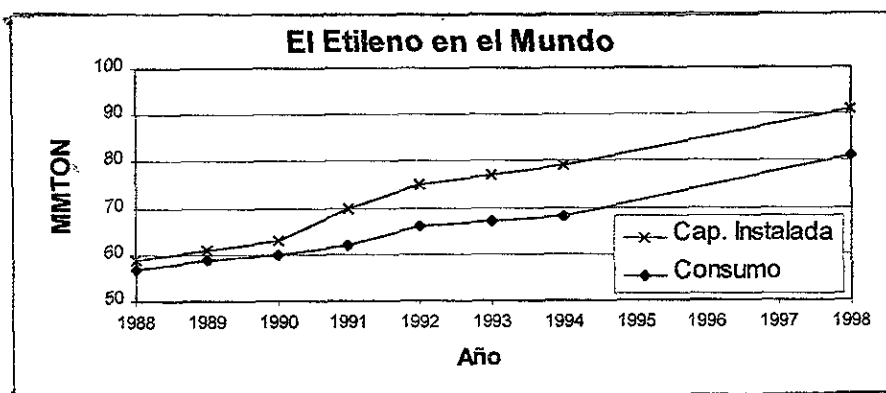
Desde sus inicios la producción mundial de etileno ha ido en aumento como consecuencia del aumento en la demanda de sus derivados (siendo el polietileno el más importante). En la gráfica 1.1 podemos ver como ha ido aumentando la producción mundial de etileno a través de los años.

EL ETILENO EN MÉXICO

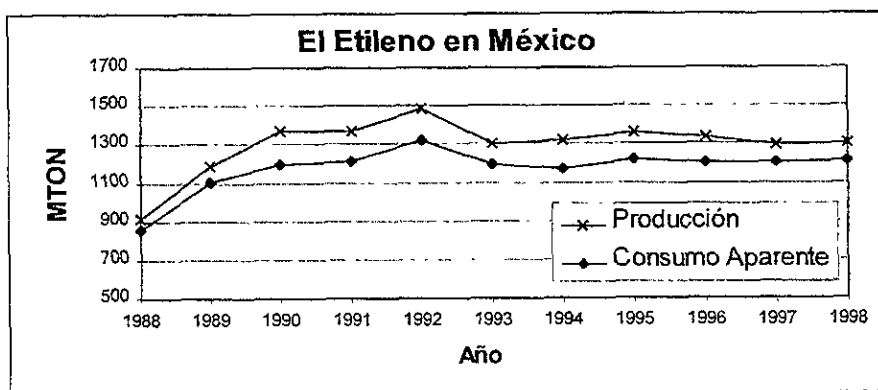
Hasta antes de la última reestructuración de los productos petroquímicos hecha por el gobierno de nuestro país, el etileno estaba considerado como uno de los productos petroquímicos secundarios de los cuales el Estado se reservaba el derecho a su producción e importación ya que era considerado como un producto estratégico (como ya lo hemos mostrado en el apartado anterior). Por esta razón, PEMEX es la única empresa que produce etileno en México, aún cuando desde 1996 ya se permite su producción por proyectos privados.

La producción de etileno en México se remonta hasta el año de 1966 cuando PEMEX puso en operación la primera planta en Reynosa Tamaulipas, con una capacidad nominal de 27,210 toneladas métricas al año. Más adelante, durante la década de los años setenta se construyeron dos plantas más con una capacidad nominal de 182,000 toneladas métricas al año cada una, una se construyó en el Complejo Petroquímico de Pajaritos en 1972 y la otra quedó ubicada en Poza Rica (1978). Con motivo del aumento de la demanda interna de etileno

(la cual siempre ha ido en acenso) en 1982 se construyó una tercera planta en el Complejo Petroquímico Cangrejera con una capacidad de 500,000 t/año (mucho mayor a la de las plantas instaladas) y posteriormente en 1989 entró en operación la última de las plantas construida en el Complejo Petroquímico de Morelos con una capacidad igual a la construida en el Complejo Cangrejera.



Gráfica 1.1 La producción de etileno en el mundo



Gráfica 1.2 La producción instalada y el consumo aparente de etileno en México

CAPÍTULO II

PRODUCCIÓN DE ETILENO

El etileno es producido a partir de alcanos o de nafta (fracciones ligeras y pesadas de Petróleo), la mejor materia prima es etano ya que los rendimientos obtenidos son los más altos; mientras que con etano se obtienen rendimientos típicos del 40%, con nafta es difícil que se pueda alcanzar el 30%; además de que es mayor la cantidad de subproductos obtenidos (véase las Tablas 2.1 y 2.2). El uso de nafta solo se debe a que no se dispone de una corriente de hidrocarburos ligeros (menores a C4); tal es el caso de países de Europa. México y los Estados Unidos poseen etano y esta es su materia prima principal para la producción de etileno (aunque en Estados Unidos también se produce etileno a partir de nafta es más importante la producción a partir de etano, en México solo se utiliza etano).

QUÍMICA DEL PROCESO

Cerca del 97% de la producción comercial anual de etileno se basa en la ruptura de enlaces de carbono-hidrógeno y de carbono-carbono a altas temperaturas junto con vapor, a este proceso se denomina cracking térmico o Pirólisis (Ref. 9).

Las reacciones de desintegración térmica, o pirólisis de hidrocarburos tienen como característica general la ruptura de enlaces carbono-carbono. Estas reacciones son en general endotérmicas y dependiendo de la materia prima que sea usada, las reacciones principales y secundarias difieren, en las tablas 2.3 y 2.4 se muestran las reacciones principales y secundarias más importantes que se presentan en un proceso de pirólisis que utiliza etano como materia prima (estas reacciones se presentan desde un punto simplificado para esbozar simplemente cuales son las transformaciones químicas principales).

Tabla 2.1- Rendimientos típicos de etileno a partir de diferentes materias primas (en porcentaje masa)

Conversión (%)	Etano 50	Etano 60	Propano 75	Propano 90	n-Butano 95	isobutano 92	n-Pentano 95	Isopentano 95
H2	3.06	3.55	1.08	1.29	1	1.39	0.8	0.9
CH4	2.6	4.2	18.83	24.7	21.8	23.6	17.52	20.6
C2H2	0.12	0.25	0.17	0.33	0.4	0.46	0.55	0.42
C2H4	41.65	48.2	25	34.5	35.8	10.3	36.5	17.95
C2H6	50	40	5.15	4.4	5.1	0.73	5.6	3.2
C3H4	0.1	0.02	0.22	0.34	0.55	2.46	0.95	1.7
C3H6	0.89	1.11	18.86	13.96	16.4	21.2	19.8	19.0
C3H8	0.14	0.17	25	10	0.15	0.33	0.55	0.55
C4H6	0.5	1.07	1.05	2.65	3.4	1.94	3.7	4.6
C4H8	0.25	0.21	1.28	1	1.7	16.7	2.6	14.38
C4H10	0.35	0.27	0.07	0.05	5.0	8.0	0.1	0.1
C5s	0.2	0.27	1.43	1.81	1.65	2.12	6.1	7.5
C6H6	0.2	0.48	1.09	2.2	2.58	3.42	1.8	4.1
C7H8	0.2	0.06	0.33	0.48	1.12	1.51	0.6	1.25
C8H8	0.03				0.45	0.67	0.1	0.25
C8H10							0.06	0.15
C9-200°C							1.48	1.75
Fuel Oil			0.3	0.85	1.7	1.99	1.09	1.5

Tabla 2.2.- Rendimientos típicos de etileno a partir de diferentes fracciones de petróleo como materias primas (en porcentaje masa)

Conversión (%)	Nafta Medio	Nafta Pesado	Keroseno Pesado	Gasóleo Pesado	Gasóleo Pesado
H2	0.63	0.8	0.63	0.65	0.47
CH4	11.7	15.3	11.4	10.6	7.9
C2H2	0.3	0.75	0.37	0.35	0.2
C2H4	24.0	29.8	23.2	24	19.5
C2H6	3.9	3.75	3.4	3.25	2.83
C3H4	0.76	1.1	0.85	1.0	0.38
C3H6	15.75	14.1	13.8	14.45	11.3
C3H8	0.41	0.25	0.45	0.45	0.36
C4H6	4.6	4.85	4.4	4.7	5.5
C4H8	6.85	4.2	4.0	4.5	4.88
C4H10	1.0	0.25	0.1	0.1	0.09
C5s	5.0	2.3	3.0	3.3	5.0
C6H6	3.15	6.3	7.2	5.8	4.16
C7H8	4.4	4.9	4.0	3.15	2.5
C8H8	2.65	2.0	2.2	1.2	1.28
C8H10	0.52	0.7	0.75	0.7	0.5
C9-200°C	3.75	2.8	4.85	1.8	2.0
Fuel Oil	1.8	3.8	13.5	17.6	29.15

Tabla 2.3 Reacciones Principales que se presentan en la Pirólisis

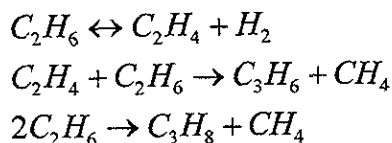
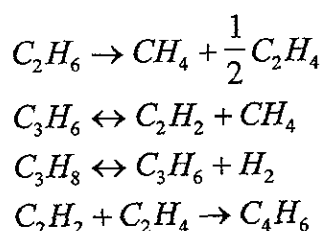


Tabla 2.4 Reacciones Secundarias que se presentan en la Pirólisis



En la actualidad el mecanismo de reacción aceptado para describir las reacciones que ocurren en la pirólisis es el mecanismo vía radicales libres. Las reacciones que ocurren en la pirólisis son muy complejas y ocurren de manera simultánea, además de ser muy sensibles a la concentración de los radicales libres. La concentración de los radicales libres es de un orden 5 veces menor que la concentración de especies moleculares; por otra parte, las reacciones que involucran radicales libres son muy rápidas (comparadas con las que involucran especies moleculares) por lo cual una concentración de pseudo-equilibrio se logra rápidamente, el nivel de esta concentración depende mucho de la temperatura (Ref. 5).

En general las reacciones de pirólisis son elementales, por lo que el orden de reacción corresponde a la molecularidad y se ha encontrado que los coeficientes cinéticos de dichas reacciones obedecen la relación de Arrhenius.

Dado que la cantidad de subproductos obtenidos es muy grande (véase las tablas 2.1 y 2.2), se recurre a añadir un inerte (agua) a la materia prima para que disminuya la presión parcial de los hidrocarburos. En los mecanismos de reacción desarrollados se ha encontrado que la

mayor cantidad de etileno proviene de reacciones de ruptura y los subproductos pesados provienen de las reacciones de unión de radicales. Al disminuir la presión parcial de los hidrocarburos se desfavorece a las reacciones de formación de subproductos, el gas inerte usado es agua y existen estudios muy detallados acerca de la relación agua/hidrocarburos que se requiere según la alimentación usada.

ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE LA PIRÓLISIS

La pirólisis de los hidrocarburos ha sido estudiada por años. Muchos esfuerzos se han realizado para desarrollar modelos cinéticos que expliquen la formación de productos a partir de diferentes alimentaciones, históricamente se han desarrollado varios modelos que aunque básicamente presentan las mismas reacciones difieren en los valores asignados a los factores de frecuencia y energía de activación, esta variación se debe a que son resultado de diferentes estudios (diferentes reactores, materias primas y condiciones de reacción). Existen tres tipos de modelos cinéticos de pirólisis, a continuación se muestran sus características principales (Ref. 5).

- a) Cinética Empírica: Es el modelo usado tradicionalmente por los productores, simplemente se basa en la experiencia acumulada en el uso de una materia prima en particular, basado en los resultados obtenidos en planta se genera un esquema de reacción de conversión fija o de una cinética de reacciones moleculares muy simplificada. Estos modelos ahora esta en desuso.

- b) Cinética Molecular: Son modelos que usan solamente esquemas de reacciones moleculares con reacciones de primer orden, estos modelos se han aplicado con éxito solamente a mezclas sencillas como etano-propano-butano, para mezclas más complicadas (nafta) se requieren demasiadas simplificaciones que hacen que su aplicabilidad no sea tan atractiva. Estos modelos han sido empleados con éxito al variar las condiciones de operación de los hornos, tienen la ventaja de que no representan una carga de computo tan grande como los modelos mecánicos, incluso; muchos modelos mecánicos son simplificados para generar un modelo molecular que se emplee en la simulación de toda una planta.

c) Modelos mecánicos: Son modelos cinéticos que involucran todo un mecanismo de reacción que explica detalladamente como ocurre la reacción (iniciación, propagación y terminación). Los valores de los factores de frecuencia y la energía de activación se obtienen a partir de Termodinámica Estadística y Teoría del Complejo Activado. Debido a la disposición de técnicas modernas de experimentación y de determinación de datos cinéticos, se han dado grandes avances en el modelamiento del cracking. Estos modelos pueden utilizarse abiertamente para la extrapolación de condiciones de operación y la modificación del tipo de alimentación. Los modelos mecánicos requieren menos datos experimentales para su validación y pueden extrapolarse con confiabilidad, son limitados en su precisión y requieren un equipo de computo que actualmente no es muy sofisticado. Para ejemplificar lo complicado de estos modelos basta mencionar que en 1978 se tenía un esquema de 133 reacciones y que en 1995 se tenía un esquema de 1700 reacciones.

REACTOR DE PIRÓLISIS

La corriente de materia prima precalentada entra al reactor; el cual está formado por una serie de tubos calentados a fuego directo (serpentines) donde bajo un control del tiempo de residencia, la temperatura final y la presión parcial de los hidrocarburos; se calienta hasta 1500°F-1600°F (815°C-870°C). Los hidrocarburos saturados de la materia prima se rompen en moléculas más pequeñas: etileno y otras olefinas, la conversión es altamente endotérmica por lo que los consumos energéticos son altísimos (del orden de 50 MMBTU/H), a la salida del reactor la corriente resultante es enfriada rápidamente hasta 1100°F-1300°F (593°C-700°C) para prevenir reacciones secundarias entre los subproductos, estos gases son separados en todos los productos deseados (Ref. 5).

Comercialmente la pirólisis de hidrocarburos se lleva a cabo prácticamente de forma exclusiva en reactores tubulares a fuego directo (Hornos), lo cual implica un alto costo de operación, que unido con la incertidumbre de contar con la materia prima de manera constante ha aumentado el interés de algunas compañías para hacer viable la producción de etileno a partir de crudo pesado y fracciones residuales de este; dichas materias primas no pueden

procesarse en un horno convencional y a la fecha no existen desarrollos comerciales basados en este tipo de tecnología.

El reactor de pirólisis es un horno con paredes hechas de material refractario que contiene tubos o serpentines por donde pasa (y reacciona) la corriente de materia prima. A temperaturas superiores a los 1000°F comienza a darse el fenómeno de pirólisis; para conseguir estas temperaturas se requiere el uso de fuego directo; el mayor consumo de energía de una planta de etileno esta en la sección de pirólisis (una planta tiene por lo regular entre 5 y 10 hornos). El horno de pirólisis se divide en dos secciones (Fig. 2.1) en virtud del mecanismo de transferencia de calor que predomine: la sección de convección y la sección de radiación, ambas secciones están bien definidas en la construcción de los reactores ya que los materiales empleados y la disposición de los serpentines son muy diferentes en ambos casos (Ref. 5).

En la sección de convección, la transferencia de calor se lleva a cabo por la convección de los gases de combustión que provienen de la zona de radiación. En esta sección no ocurre la pirólisis; solo un precalentamiento, los serpentines están dispuestos de manera horizontal y en

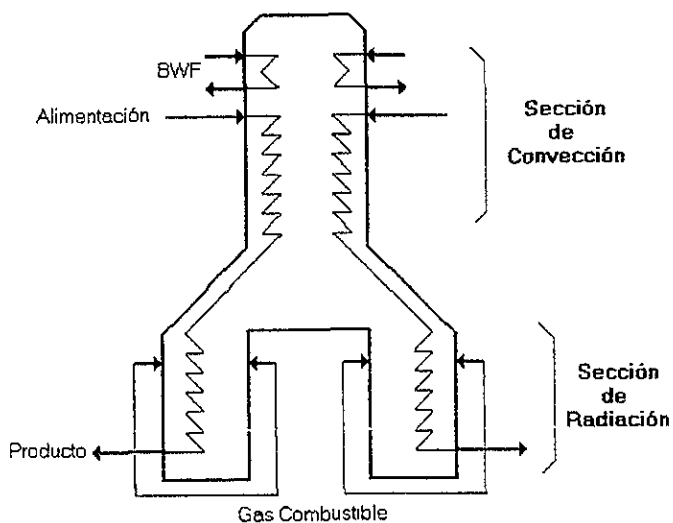


Fig 2. 1 Esquema de un Reactor de Pirólisis

esta sección se trata de recuperar la mayor cantidad de energía calentando el agua que se utilizará para la generación de vapor (BFW: Boiler Feed Water).

En la sección de radiación, la transferencia de calor se lleva a cabo por radiación, los serpentines se colocan verticalmente entre paredes de material refractario; donde el fuego directo de los quemadores le da la temperatura suficiente para que la radiación caliente los serpentines.

Al final de la sección de convección la temperatura de la corriente es alrededor de 1100°F (590°C), y aumenta hasta 1600°F (870°C) al final de los serpentines (al final de la sección de radiación).

Un horno de pirólisis tiene típicamente 4 serpentines verticales de 60m cada uno, con porciones rectas de 9 m y retornos con radio de 0.2 m. (Ref. 5).

Clásicamente los serpentines tienen un diámetro interno de 0.10m, las velocidades de flujo son muy altas, hasta 250 m/s y el número de Reynolds puede alcanzar fácilmente el valor de 250,000 (un flujo completamente turbulento, lo que permite modelar los reactores como un reactor de flujo en pistón sin gradiente axial). El flux de calor a la entrada y salida puede ser del orden de 85 y 55 kJ/m²s, basado en el área interna del serpentín. Para prevenir efectos de "sombra" en la sección de radiación y para alcanzar mayor eficiencia en la transferencia de calor, los serpentines son colocados en una sola hilera aunque también se suele poner dos hileras estratificadas. (Ref 5).

Para conseguir altos rendimientos en la pirólisis se busca operar a altas temperaturas con bajos tiempos de residencia; hablamos de 0.5 s de tiempo de residencia.

Los hornos de pirólisis son diseñados para altas capacidades de producción, las especificaciones pueden variar de una planta a otra. Algunos productores se enfocan hacia la máxima producción de etileno, otros se enfocan hacia una mejor distribución de los productos, aunque la selección de la materia prima es importante en el diseño, el diseño de los hornos y la operación de los mismos mantienen muchos elementos en común que pueden considerarse como especificaciones buscadas. Los flux de calor han aumentado considerablemente a través

de los años; ya sea reduciendo el diámetro de los tubos o aumentando la temperatura superficial del tubo. El diseño de los hornos de pirólisis involucra un complejo estudio de la Transferencia de Calor, Dinámica de Fluidos y Cinética de las Reacciones Químicas.

PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ETILENO

Puede decirse que el proceso de producción de etileno es el típico proceso en la industria química donde continuamente la materia prima se lleva a las condiciones necesarias para que reaccione en un reactor, el producto formado es entonces enviado a un sistema de separación (gigantesco comparado con la sección de reacción) para separar la materia prima que no reaccionó (para volvería a utilizar), los subproductos y el producto deseado (Ref. 5).

De manera muy general, la materia prima (el hidrocarburo) es diluida con vapor de agua y es pasado a un horno de pirólisis que consiste en un reactor tubular a fuego directo. La temperatura del horno está entre 1292°F –1598°F (700°C- 870°C). El vapor es agregado a la corriente de hidrocarburos para disminuir la formación de subproductos pesados (al disminuir la presión parcial de los hidrocarburos disminuye la formación de subproductos pesados con cadenas mayores a 5 carbonos) y coque en los tubos del horno, el tiempo de residencia es de 1 segundo o menos (mayores tiempos de residencia implican mayor formación de subproductos). El rendimiento del etileno y los demás productos está determinado por las condiciones de reacción y por supuesto por la materia prima; debido a la gran similitud entre la formación de etileno y propileno, este es el mayor subproducto obtenido (Ref. 9).

La corriente de gases calientes provenientes del horno de pirólisis es enfriada rápidamente para evitar la formación de subproductos más pesados (C7 o más); generalmente en una torre de apagado, después de ello se prepara la mezcla para separarla por destilación. La corriente de producto se somete a una etapa de compresión y de secado (para eliminar el agua que se solidificaría en las siguientes etapas) y enfriamiento hasta llegar a los 500 psi (34 bar) aproximadamente. Los gases ácidos (CO, CO₂, H₂S) son absorbidos en un sistema que emplea monoetanolaminas, sosa o simplemente agua. Después de tener el efluente endulzado, comprimido y enfriado se somete al sistema de separación donde se separa el hidrógeno por separación Flash y los demás hidrocarburos por destilación. La

siguiente etapa de la separación puede variar mucho dependiendo de la materia prima usada y los subproductos obtenidos, generalmente se tienen tres sistemas de destilación: demetanización, fraccionamiento de propano-butano y fraccionamiento de etileno-etano, las torres de destilación son muy grandes (mas de 100 platos en el fraccionador de etano - etileno). El etileno producido es en todos los casos de alta pureza debido a las necesidades del mercado, en el apéndice A se encuentran las propiedades físicas, químicas y grados comerciales de este compuesto.

La planta tiene altos consumos energéticos, por una parte se tiene la sección de pirólisis con temperaturas de hasta 1598°F (870°C) y por otra se requiere un sistema de refrigeración capaz de proporcionar temperaturas de hasta -150°F (-100°C), por lo cual generalmente se usan dos sistemas de refrigeración: etileno y propileno. En la Figura 2.2 se muestra un esquema simplificado de la producción de etileno

La manufactura de etileno invariablemente implica la formación de subproductos, la mayoría de los cuales son importantes petroquímicos. Algunos de los subproductos requieren de un procesamiento para poder tener un valor comercial.

- Hidrógeno : Todos los procesos de Producción de etileno generan cantidades significativas de hidrógeno, incluso algunas plantas de etileno a partir de etano están integradas con una planta de amoniaco para suministrar el hidrógeno requerido.
- Acetileno : El acetileno puede ser un subproducto muy importante en la producción de etileno, sin embargo es muy común que se hidrogene el acetileno para generar etileno (principalmente) y etano.
- Metilacetileno y Propadieno: Estos compuestos son de poco interés en la industria petroquímica, así que en muchos casos se hidrogenan al igual que el acetileno.
- Propileno : El propileno es el mayor subproducto obtenido en las plantas de etileno cuando se utiliza otra materia prima diferente al etano, en realidad existen muchas plantas que tienen la flexibilidad de cambiar de producto final a etileno - propileno, debido al interés que se tiene en él como materia prima del polipropileno.
- Butadieno y Butenos: Las plantas de etileno basadas en nafta y materias primas más pesadas producen cantidades significativas de mezclas de C4-hidrocarburos,

predominantemente 1,3-butadieno e isobutileno, este subproducto representa una materia prima importante para la industria del plástico.

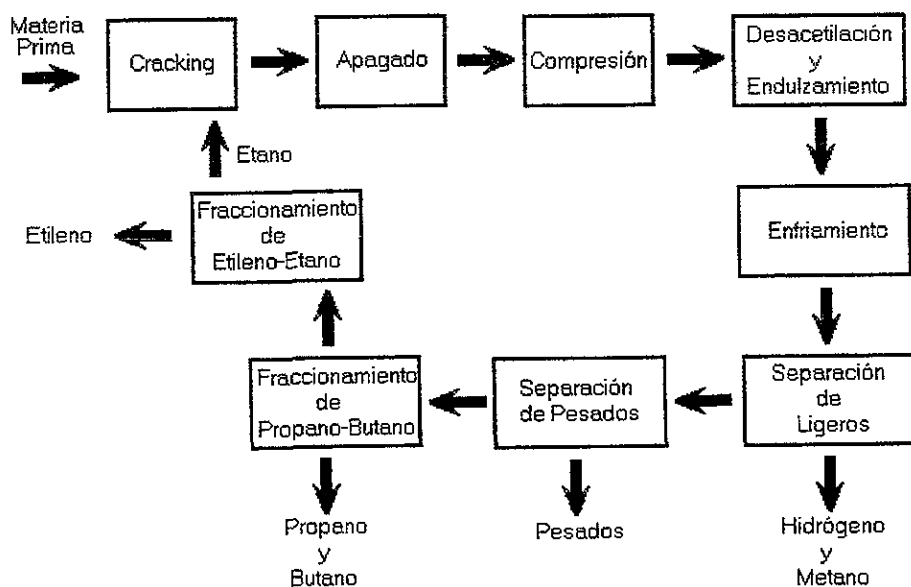


Fig. 2.2 Esquema Simplificado del Proceso de Producción de etileno

CAPÍTULO III

PRODUCCIÓN DE ETILENO C.P. PAJARITOS

El proceso de producción de etileno que posee PEMEX en el complejo Petroquímico Pajaritos consta de una planta que fue construida en 1972 (con tecnología de 1970).

La Planta se encuentra en Coatzacoalcos, Veracruz; la materia prima consiste en etano, y la planta tiene una capacidad de 181,400 Toneladas Métricas por año de etileno de alta pureza basado en 330 días de operación, la capacidad de esta unidad es de 1,212,120 lb de etileno producto de alta pureza por día de operación a 272 psig y 80°F ($\pm 7^\circ\text{F}$). La unidad esta también diseñada para producir y separar las siguientes corrientes de subproductos: gas rico en hidrógeno, gas rico en metano y una corriente de propileno y productos pesados

La unidad está diseñada para procesar una corriente de etano con las características que se indican en la tabla 3.1

La unidad está diseñada para producir simultáneamente el etileno de alta pureza y los subproductos indicados anteriormente, las características del etileno de alta pureza se encuentran en la tabla 3.2 y las características de los subproductos se encuentran en las tablas 3.3, 3.4 y 3.5. (siempre y cuando se suministre la alimentación especificada).

Los servicios auxiliares que requiere la planta son vapor de alta presión, vapor de baja presión, aire de planta y aire de instrumentos. El vapor de alta presión se produce en la planta, el resto de los servicios son suministrados a la planta en el límite de baterías.

Tabla 3.1 Especificaciones del etano alimentado a la planta

Componente	% en Mol
Metano	5.3
Etano	90.0
Propano	4.4
CO2	0.3
Azufre	50 ppm en peso
Temperatura : 81°F	
Presión : 250 psig (\pm 100 psig)	

Tabla 3.2 Especificaciones del producto (las ppm son en peso)

Componente	Composición
Etileno	99.95 %w min
Metano y etano	350 ppm max
Propileno	1 ppm max
Butileno	1 ppm max
Otras oleofinas	1 ppm max
Butadieno	1 ppm max
CO2	5 ppm max
Nitrógeno	5 ppm max
Acetileno	5 ppm max
Hidrógeno	1 ppm max
CO	5 ppm max
Oxígeno	2 ppm max
Temperatura:	80°F (\pm 7)
Presión:	272 psig

Tabla 3.3 Características del gas rico en
Hidrógeno (estimación)

Componente	% en mol
Hidrógeno	89.1
Metano	9.4
Etileno	1.3
Etano	0.07
CO	menor al 3%
Temperatura :	100 °F max
Presión :	50 psig

Tabla 3.4 Características del gas rico en
Metano (estimación)

Componente	% en mol
Hidrógeno	16.9
Metano	80.1
Etileno	2.8
Etano	0.06
CO	0.14
Temperatura:	100 °F max
Presión:	50 psig

Tabla 3.5 Características del propileno y productos pesados

Componente	% en mol
Etano	1.0
Propileno	39.1
Propano	11.9
Propadieno y Metilacetileno	0.4
Butadieno	12.1
Butilenos	17.0
Butanos	3.6
C5 y más pesados	14.9
Temperatura:	120 °F máx
Presión:	340 psig

DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

La Planta del Complejo Petroquímico Pajaritos se divide en 9 secciones (Un plano general de la planta se muestra en la figura 3.1):

- A. **Sección de Cracking.**
- B. **Sección de Apagado.**
- C. **Sección de Compresión.**
- D. **Sección de Remoción de Gases Ácidos y Desacetilación.**
- E. **Sección de Secado y de Enfriamiento.**
- F. **Sección de Demetanización y Detanización**
- G. **Sección de Fraccionamiento de etileno**
- H. **Sistema de Refrigeración de Propileno**
- I. **Sistema de Refrigeración de Etileno**

Sección de Cracking: El etano proveniente de Límites de Batería junto con el etano de recirculación y con vapor de dilución reaccionan en 5 calentadores tubulares a fuego directo; (cada calentador u horno tiene 4 serpentines) antes de entrar al reactor se le debe añadir a la corriente pequeñas cantidades de H_2S u otro mercaptano para reducir el número de reacciones indeseables que tienen lugar en la superficie del tubo (reacciones de deshidrogenación), donde se logra una temperatura de salida de $1580^{\circ}F$ ($860^{\circ}C$). El efluente de cada horno es preapagado hasta $1200^{\circ}F$ ($649^{\circ}C$) con condensado y vapor en un equipo diseñado para este fin y posteriormente se enfría hasta $600^{\circ}F$ ($316^{\circ}C$) en una línea de intercambiadores de calor en los cuales se genera vapor a 650psig. Los efluentes de los intercambiadores de calor se mezclan entre sí y se envían a la torre de apagado.

Sección de Apagado: En la torre de apagado, la mayor parte del vapor de dilución y algunos hidrocarburos pesados se condensan por contacto directo con agua de enfriamiento. El producto neto de domos se envía al sistema de compresión. Los hidrocarburos condensados se separan del agua de apagado y del vapor de agua condensado en un tanque de decantación de agua de apagado. El exceso de condensado se envía al drenaje. Una parte de la recirculación de agua de apagado se usa para precalentar la alimentación de etano a los

hornos. La regulación de la temperatura del agua de apagado a la entrada de la torre de apagado se efectúa controlando el intercambio de calor entre el agua de apagado y el agua de enfriamiento.

Sección de Compresión: Los vapores de la torre de apagado se comprimen en un compresor de 4 etapas hasta una presión de 550 psig (38 bar) con enfriamiento entre etapas a 110°F (43°C). El gas ácido que acompaña a los vapores comprimidos (el mercaptano añadido a la corriente de alimentación) se separa entre la tercera y cuarta etapa de compresión; la corriente proveniente de la tercer etapa pasa a la sección de desacetilación y remoción de gases ácidos donde se remueven los gases ácidos y se hidrogena parcialmente el acetileno en un reactor llamado Convertidor de Acetileno, del Convertidor de Acetileno pasa a la 4ª etapa de compresión, el gas a la salida de la 4ª etapa se enfría hasta 60°F (15°C) con propileno refrigerante. El líquido que se condensa se separa y los vapores se envían a la sección de secado. Los condensados de agua e hidrocarburos de las tres primeras etapas de compresión se regresan al tanque acumulador de agua de apagado. El condensado de la 4ª etapa se recircula al tanque de descarga de la 3ª etapa, donde los componentes ligeros se autoevaporan y los pesados se combinan con el condensado de esta etapa para regresarlos al tanque acumulativo de agua de apagado (el tanque de decantación de la sección de apagado).

Sección de Remoción de Gases Ácidos y Desacetilación: La corriente proveniente de la 3ª etapa de compresión se pasa a una torre de lavado con solución de sosa; de ahí los vapores se envían al Convertidor de Acetileno. La alimentación al convertidor es precalentada con el efluente del reactor en un intercambiador de calor. El Convertidor de Acetileno es un reactor de lecho empacado donde el acetileno se hidrogena (junto con el butadieno y el metilacetileno) con ayuda de un compuesto catalizador; agregándole H₂S en cantidades controladas se consigue mejorar la selectividad del catalizador (evitando a toda costa hidrogenar el etileno). Se utilizan dos reactores; mientras uno está en operación el otro esta regenerándose. La regeneración requiere el uso de un calentador de fuego directo. El efluente del convertidor que se usa para precalentar la alimentación, se envía posteriormente a la 4ª etapa de compresión.

Sección de Secado y de Enfriamiento: El gas que se obtiene en la sección de compresión (endulzado y sin acetileno) se seca en secadores de lecho empacado usando

como desecante alúmina activada, antes de pasar a las secciones de recuperación a baja temperatura. Se suministran 3 secadores, dos funcionan en serie mientras el tercero esta en regeneración. La regeneración y el enfriamiento de los secadores se realizan mediante un solo paso de gas residual rico en hidrógeno.

El gas seco se subenfria progresivamente y se condensa parcialmente por etapas a diferentes niveles de baja temperatura con eliminación de condensados en cuatro etapas. Los vapores remanentes forman el gas residual rico en hidrógeno. Los condensados extraídos constituyen las corrientes de alimentación a la torre demetanizadora. El subenfriamiento no solo se logra mediante el empleo de propileno y etileno como refrigerantes, sino también evaporando las corrientes de etano de recirculación y recalentando los gases residuales ricos en hidrógeno y metano. El uso de un expansor para reducir la presión del gas residual rico en hidrógeno permite alcanzar el nivel más intenso de frío requerido en la etapa final del proceso de subenfriamiento. La planta puede funcionar sin expansor a cambio de una reducción en la recuperación de etileno. Los gases residuales ricos en hidrógeno y metano se envían al tanque de gas combustible después de pasar por el sistema de Refrigeración de Propileno.

Sección de Demetanización y Detanización: Los condensados obtenidos en la sección de secado y enfriamiento se alimentan a la torre demetanizadora. La torre se recalienta usando vapores de propileno como medio calefactor (provenientes del sistema de refrigeración con propileno), el reflujo se obtiene por condensación parcial de los gases superiores usando etileno refrigerante. El producto neto de domos forma el gas residual rico en metano mencionado anteriormente. Los fondos de la Demetanizadora se envían a la torre Detanizadora donde el etileno y el etano se separan del propileno e hidrocarburos más pesados. La Detanizadora tiene un rehervidor y un condensador parcial. El rehervidor utiliza vapor de baja presión como medio calefactor. El reflujo se obtiene por condensación parcial de los vapores superiores, utilizando propileno refrigerante. El producto del fondo se envía al límite de batería, esta corriente esta formada por los butanos y compuestos más pesados ; el producto neto de cabeza consiste en etano y etileno principalmente y se envía a la torre fraccionadora de etileno.

Sección de Fraccionamiento de Etileno: El producto neto de cabeza de la torre Detanizadora se alimenta a la torre fraccionadora de etileno, la corriente consiste principalmente de etileno y etano con pequeñas cantidades de metano, propileno y propano. La columna opera a 287psig (20 bar) y la temperatura de -19°F (-28°C) en la parte superior se

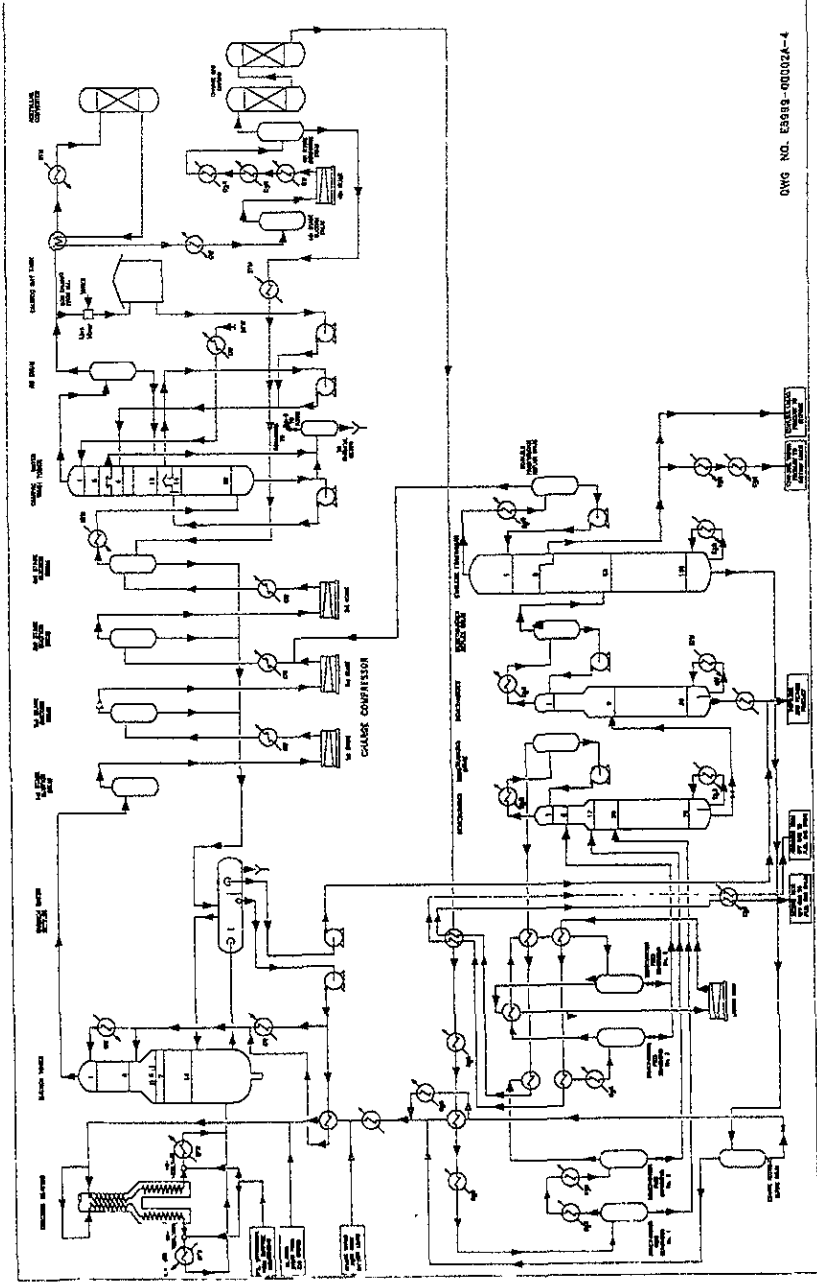
mantiene condensado parcialmente el domo con la evaporación de propileno refrigerante. La temperatura del fondo de 22°F (-5°C) se mantiene condensando los gases calientes de propileno refrigerante que provienen de la compresora de propileno. El etano producido en el fondo se envía a un tanque de balance donde se mantiene constantemente un volumen de etano capaz de suministrar a la planta su capacidad normal durante 30 min. El efluente de etano se evapora para recircularlo a la alimentación de los hornos de pirólisis usando los vapores de alimentación a la demetanizadora (en la sección de secado y enfriamiento). Un cambiador en paralelo permite el uso de los gases de propileno para evaporar cantidades adicionales de etano para la alimentación de los hornos de pirólisis, en caso de que hubiera fluctuaciones anormales en el fondo de la fraccionadora de etileno y/o la alimentación a la demetanizadora. Sin embargo, el uso principal de este intercambiador y del tanque de balance es de proporcionar alimentación a los hornos de pirólisis en los casos de falla total o parcial del suministro de etano proveniente de límite de baterías y facilitar así un paro ordenado de la planta.

El etileno producido es extraído de la 9ª etapa de la torre fraccionadora de etileno y es entregado en los límites de batería. Finalmente el 100% del producto se entregará como vapor sobrecalentado a 80°F (26°C) y 272psig (18barm). Sin embargo, las instalaciones permiten la entrega del 60% del producto como líquido a -19°F (-28°C) y 275psig (18 bar) para subenfriarlo y almacenarlo en tanques a -153°F (102°C) y 1.5psig (0.1 bar).

Sistema de refrigeración a base de propileno: El sistema de refrigeración con propileno es un sistema cerrado en etapas múltiples (véase la figura 3.2) usando una compresora centrífuga que suministra refrigeración a 4 niveles diferentes que son: -35°F, -5°F, 45°F y 60°F (-37°C, -20°C, 7°C y 15°C). El efluente de la compresora se condensa con agua de enfriamiento y se subenfria con varios productos y corrientes de proceso. La condensación a diferentes niveles de presión, también se efectúa en los rehedidores de la demetanizadora, en la fraccionadora de etileno y en el evaporador del etileno producto líquido. Bajo condiciones especiales, la condensación también se efectúa en el evaporador complementario de etano.

Sistema de refrigeración a base de etileno: El sistema de refrigeración con etileno es un sistema cerrado de etapas múltiples (véase la figura 3.3), usando un compresor centrífugo, que suministra refrigeración a 3 diferentes niveles que son: -150°F, -100°F y -65°F (-100°C, -

73°F y -53°F). El efluente del compresor se sobrecalienta usando los niveles de alta presión del propileno refrigerante y se condensa con los niveles de baja presión del mismo.



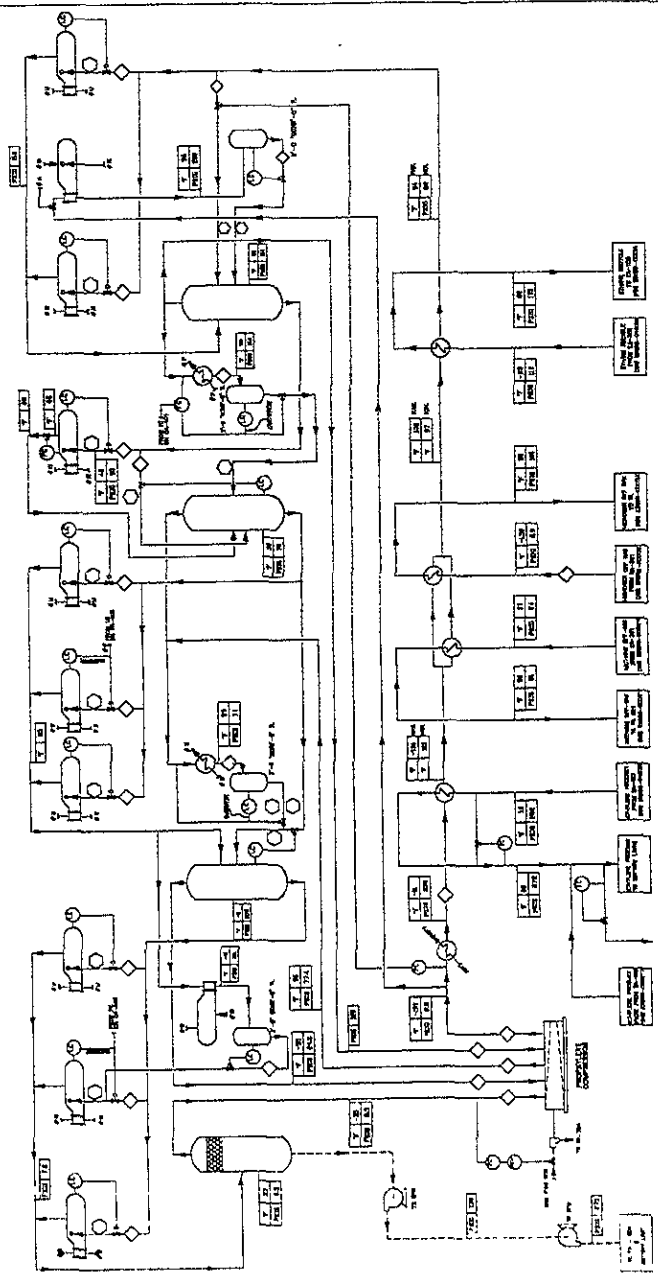
DWG NO. E3998-00002A-4

PROPOSED
REVISIONS
BY: [Signature]

PROPOSED
REVISIONS
BY: [Signature]

PROPOSED
REVISIONS
BY: [Signature]

PROPOSED
REVISIONS
BY: [Signature]

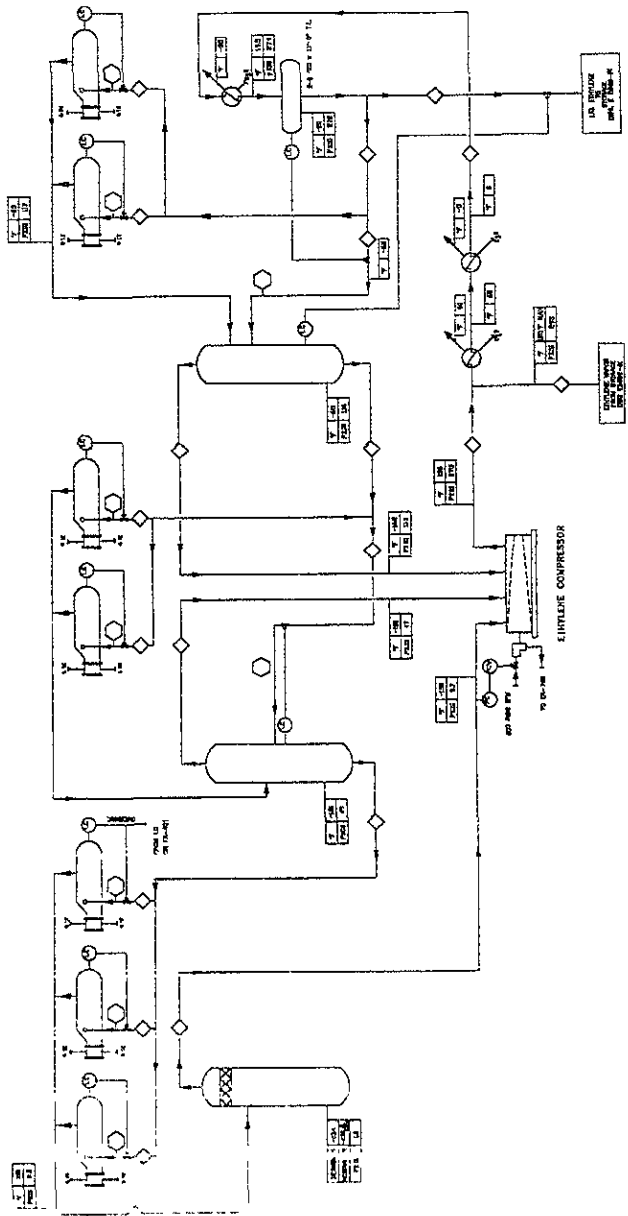


DWG. NO. E3989-0000H-8

INSTRUMENTS ARE SHOWN
AS SUPPLIED BY THE
MANUFACTURER

INSTRUMENTS ARE SHOWN
AS SUPPLIED BY THE
MANUFACTURER

INSTRUMENTS ARE SHOWN
AS SUPPLIED BY THE
MANUFACTURER



DWG. NO. 5959-00001

Para realizar la simulación de la planta se contó con los diagramas de flujo de proceso (DFP) de cada una de las secciones que conforman la planta, el balance de materia y energía de diseño, un resumen de los intercambiadores de calor, varios simuladores comerciales y con el mejor equipo de cómputo disponible

METODOLOGÍA PARA GENERAR EL ESQUEMA DE SIMULACIÓN

Para generar el presente esquema de simulación se siguió la siguiente metodología:

1. Analizar que componentes están presentes en las corrientes del proceso y seleccionar los que formarán parte del modelo.
2. Analizar las secciones de la planta para determinar las características del modelo de cada una.
3. Con base a las características encontradas en el punto 2, se escogerá el simulador comercial que se utilizará para generar el esquema de simulación.
4. Se realizará un análisis de la topología de la planta y se planteará una estrategia para construir el esquema de simulación.
5. Se probará el esquema de la planta con un reactor de conversión fija, los errores que se encuentren en el esquema se corregirán por completo en esta etapa.
- 6 Una vez que el esquema de simulación sea sólido se sustituirá el modelo cinético de la pirólisis de conversión fija por un modelo molecular.

A continuación se presentan a detalle cada uno de los puntos de la metodología seguida.

1. Selección de los componentes que se utilizarán en el modelo.

La información disponible en las hojas de balance nos indica que participan los siguientes componentes: hidrógeno, metano, acetileno, etileno, etano, propadieno, metilacetileno, propileno, propano, butadieno, butilenos, butanos, C5 y pesados, agua, sosa, azufre, H₂S, CO₂ y CO (19 en total). La mayoría de estos componentes no representan ningún problema, dado que el azufre es un compuesto que tiene la misma función que el H₂S (es de uso alternativo) se eliminó del esquema. La sosa también se eliminó dado que solo se usa en la sección de lavado y esta operación no se modelará como un sistema de absorción, sino como una separación pura (se define que todos los gases ácidos se separan de la corriente).

Para definir que compuestos representarán a los butilenos, los butanos y el C5 y pesados se tuvo que hacer un estudio preliminar de la cinética de pirólisis (Ref. 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19), se procedió a comparar los compuestos que usan los diferentes modelos disponibles y después de analizar el tipo de alimentación usada en la planta y la de los esquemas se llegó a lo siguiente:

Tabla 4.1 Pseudocomponentes presentes en el sistema y su representación

Pseudocomponentes	Componentes Representativos
Butilenos	1 Buteno, trans-2 Buteno e isoButeno
Butanos	n-Butano e isoButano
C5 y Pesados	nPentano y Benceno

Al analizar el peso que tienen los componentes en la planta (véase la tabla 4.2) se llegó a la conclusión de que en todas las corrientes el acetileno, propadieno, metilacetileno, butadieno, butilenos, C5 y Pesados, CO y CO₂ son despreciables comparados con el hidrógeno, metano, etileno, etano, propileno y propeno; por esto mismo, aunque podríamos despreciarlos, simplemente no tendremos la misma tolerancia en cuanto a las diferencias encontradas entre la simulación y los datos de diseño (diferencias del 5% con respecto a los compuestos representativos y hasta el 100% en los demás)

Tabla 4.2 Proporción de los Componentes presentes en el efluente del reactor de pirólisis

Compuesto	Proporción con Relación al CO2
Hidrógeno	594
Etileno	578
Agua	574
Etano	440
Metano	148
Propileno	16.5
Butadieno	9.3
C5 y Pesados	5.8
Propano	4.5
Acetileno	3.4
H2S	3.1
CO	3.0
Butilenos	1.9
Butanos	1.4
CO2	1.0
Metilacetileno	0.6
Propadieno	0.4
Sosa	0.0
Azufre	0.0

2. Análisis de las Secciones que conforman la Planta de Etileno.

La Planta de Etileno esta formada por 9 secciones de las cuales dos involucran una reacción química y dos son sistemas de refrigeración.

Sección de cracking: (Fig. 5.2) se caracteriza por emplear altas temperaturas y bajas presiones, en esta sección no intervienen equilibrios líquido vapor por lo que podremos utilizar

incluso el modelo de gas ideal para modelar el sistema. Por otra parte, la sección no tiene ciclos; esto simplifica la simulación de gran manera. Aunque esta sección tiene el reactor, el modelado del reactor se considera como un punto aparte (que se expondrá más adelante).

Sección de apagado (Fig. 5.3): puede dividirse en dos partes, una parte donde se tiene una mezcla de hidrocarburos y agua y otra parte donde se tienen corrientes de hidrocarburos y corrientes de agua, específicamente se tiene una torre de absorción donde se da la mezcla de agua fría con el efluente de los hornos, en esta torre tendremos equilibrios líquido-vapor-agua, es por ello que necesitaremos un modelo termodinámico como NRTL o la ecuación de estado RKS modificada para mezclas de hidrocarburos-agua. En esta sección tenemos un ciclo que involucra un tanque de separación (donde los incondensables que se hayan absorbido en agua se separan y regresan a la torre). Otro ciclo importante es el correspondiente al agua de apagado, aparte de la torre y el tanque separador no existen operaciones de equilibrio ni mezclas de agua-hidrocarburos.

Sección de compresión (Fig. 5.4): tiene una serie de etapas de equilibrio líquido-vapor a altas presiones y temperaturas moderadamente bajas (los tanques de succión a las etapas de compresión) que hacen necesario utilizar un modelo termodinámico como Peng Robinson (PR) para modelar el sistema, esta sección solo contiene un ciclo que no implica muchos problemas; sin embargo, en esta sección se tienen los primeros equipos de transferencia de calor que involucran al sistema de refrigeración.

Sección de desacetilación y lavado cáustico (Fig. 5.5): implica un gran sistema de absorción y un reactor de lecho fijo, estas operaciones no son de gran impacto en el proceso ya que por una parte el lavado cáustico remueve gases ácidos que solo representan menos del 1% de la corriente y la desacetilación hidrogena alquinos y dialquenos que solo representan menos del 2% de la corriente. En base a lo anterior se ha considerado que estas operaciones se pueden modelar como un separación pura y un reactor de conversión fija (la conversión en base a datos de diseño del reactor).

Sección de secado y subenfriamiento (Fig. 5.6): involucra varias etapas de equilibrio líquido vapor a altas presiones y bajas temperaturas por lo que tendremos que usar el modelo termodinámico de PR o RKS, por otra parte se tienen varias operaciones de transferencia de calor utilizando los sistemas de refrigeración, *esta sección es la que tiene una mayor*

integración con los sistemas de refrigeración además de tener una topología complicada (varios ciclos anidados), con base a todo lo anterior es de esperarse que esta sea la etapa crítica de la simulación.

Sección de demetanización y deetanización (Fig. 5.7): consiste en dos torres de destilación, las cuales son de 70 y 38 etapas, sin extracciones laterales, son torres de condensador - rehervidor que pueden modelarse perfectamente bien utilizando las herramientas disponibles en el simulador. En esta sección no se presenta ningún ciclo por lo que la simulación se reduce a simular simplemente las torres de destilación. *Aunque los servicios del condensador y rehervidor son proporcionados por los sistema de refrigeración no se han integrado a estas secciones.*

Sección de fraccionamiento de etileno (Fig. 5.8): se divide en dos partes principalmente, una torre de destilación y una etapa de intercambio de calor, aquí es donde esta un ciclo crítico ya que los fondos de la torre pasan a enfriar la alimentación desecada de la sección de secado y subenfriamiento, la cual genera la alimentación a las torres demetanizadoras y deetanizadoras que a su vez genera la alimentación a la torre fraccionadora de etileno.

Secciones de refrigeración (Fig. 5.9 y 5.10): quedan determinadas por todo el proceso, (se construirá con forme se construya todo el proceso) cada sección tiene 4 y 3 componentes y las operaciones de equilibrio líquido-vapor son a altas presiones y bajas temperaturas.

En base a las características del sistema, hemos decidido usar el modelo termodinámico de Peng-Robinson para representar la planta en todas sus secciones (excepto la torre de apagado), esta decisión está fundamentada en anteriores estudios y recomendaciones para simular sistemas de hidrocarburos ligeros a las condiciones que imperan en la planta. Tradicionalmente los sistemas de apagado se han modelado utilizando el modelo de gas ideal para la fase gas, ley de Henry para los incondensables en la fase líquida y un modelo de presión de vapor para el agua (Antoine), en este trabajo utilizaremos la ecuación de estado de Kabadı Danner (Ref.8) que es una modificación a la ecuación de estado original de RKS que ha sido modificada para brindar una mejor representación de los sistemas agua-hidrocarburo especialmente en las regiones de dilución, esta decisión se hizo en base a que la torre es un

sistema que trabaja en condiciones de dilución y que esta ecuación de estado nos permite realizar estudios posteriores que impliquen una optimización del uso del agua de apagado.

3. Selección del Simulador que se utilizará

Hemos visto la gran complejidad del proceso, esto se debe a la gran integración de los sistemas de refrigeración con casi toda la planta (3 secciones de las 7 están íntimamente relacionadas con estos sistemas), por otra parte necesitamos una flexibilidad suficiente en cuanto al modelado de los hornos para poder utilizar un modelo de cinética molecular (y tal vez un modelo de cinética mecánica como extensión a este trabajo).

Las herramientas disponibles para la simulación de procesos son Pro/II, Aspen, HYSIM y HYSYS; de entre todas estas herramientas se seleccionó HYSYS por poseer las siguientes características:

- Simulación en tiempo real: Esto nos permite ahorrar tiempo ya que los cálculos se realizan conforme diseñemos el esquema (en un proceso tan grande como el de producción de etileno esta es una gran ventaja).
- La estructuración del proceso puede hacerse en base a secciones (DFP) que permiten darle mayor orden al esquema de simulación. Esto nos permite conservar las secciones de la planta de etileno y tener la misma nomenclatura en el esquema de simulación.
- Este simulador es usado por el propio PEMEX para sus trabajos de simulación.

4. Análisis de la topología de la planta y planteamiento de la estrategia para construir el esquema de simulación

Como puede verse en el diagrama principal de la planta de etileno (Fig. 5.1), la planta está compuesta de muchas secciones altamente relacionadas, para realizar la simulación se procedió a realizar un análisis de la topología de la planta

4.1. El horno de pirólisis será lo último que modelaremos, al modelar la sección de cracking supondremos el efluente del reactor hasta que tengamos construido completamente el esquema, solo hasta entonces abordaremos el reactor.

4.2. Se construirán cada una de las secciones de la planta por separado (para darle orden y solidez al esquema, de esta manera podemos indicarle al simulador una secuencia de como debe calcular las secciones para facilitar la convergencia). Se guardará la misma nomenclatura que los DFP de diseño. Se simulará cada sección por separado suponiendo las alimentaciones con base a los datos de diseño.

4.3. Las torres de destilación se modelarán en dos etapas, la primera etapa consistirá en modelar el condensador y el rehervidor como dos etapas más (esto simplifica los cálculos). En la segunda etapa incluiremos al condensador y al rehervidor como dos equipos, incluiremos la bomba de retorno del reflujo y su válvula de expansión y por último dividiremos la corriente de los fondos tal como esta especificado en los diagramas de flujo de proceso de diseño.

4.4. Después de analizar los ciclos presentes en la planta (Fig. 4.1), se ha dividido la Planta en dos BLOQUES, uno formado por las secciones que no tienen gran interacción con los sistemas de refrigeración (Bloque 1: secciones de cracking, apagado, compresión y desacetilación-lavado) y otra que esta muy integrada con los sistemas de refrigeración (Bloque 2 : secado-enfriamiento, demetanización - deetanización y fraccionamiento de etileno). Una vez que consigamos simular todas las secciones de un bloque se procederá a unir las secciones entre sí, esto con el fin de que al final tengamos dos bloques bien consolidados que uniremos por las corrientes que los relacionen; esto facilitará la convergencia.

En la Fig. 4.1 encontramos claramente porque se ha decidido unir en dos Bloques la planta y no se ha pretendido unir una a una las secciones hasta completar la planta. Además de la integración con los sistemas de enfriamiento; el Bloque 1 esta formado por secciones que al unirse no presentan ningún problema para que se consiga la convergencia, el Bloque 2 esta formado por secciones muy integradas (pueden verse 3 ciclos anidados) sin contar que en la sección E existen dos ciclos anidados (lo cual lo hace que sea un sistema de 5 ciclos anidados). Además de todo lo expuesto en el Bloque 2 se encuentran las tres torres de destilación por lo que es de esperarse que la parte crítica de la simulación sea representar satisfactoriamente este Bloque (sin contar el modelo del reactor). Finalmente; al tener los 2 Bloques, el trabajo se reduce a unir los dos Bloques por las dos corrientes restantes (corrientes de corte).

En la Fig. 4.1, además de mostrarse los ciclos presentes en el esquema; se ha representado la secuencia con que los ciclos se van cerrando para tener al final la planta completa, los

ciclos se irán cerrando del más pequeño al más grande en el sentido de las manecillas del reloj; esto es, la corriente supuesta que alimenta a la sección se remplazará por la corriente calculada, comenzando por la Sección A en el Bloque 1 y por la Sección E en el Bloque 2, al final tendremos dos bloques; quedando solamente dos ciclos por cerrar, continuando con la metodología descrita se cerrará primeramente el ciclo G-C y por último el ciclo G-A (en esta parte no se tendrá aún el reactor).

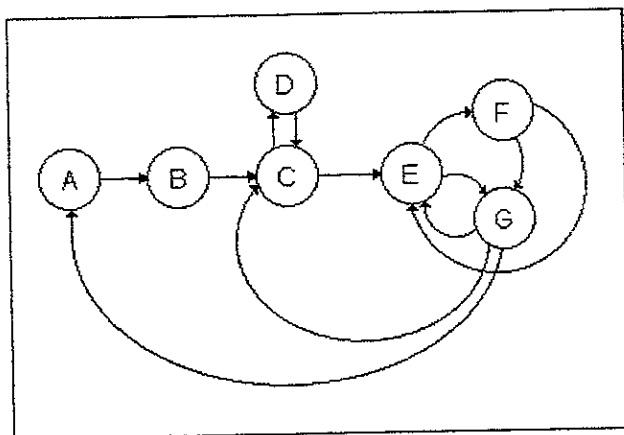


Fig. 4.1 Ciclos presentes en el esquema de simulación de la Planta (Fig. 5.1). Cada círculo (nodo) representa una sección de la planta (A: Cracking, B: Apagado, C : Compresión, D : Desacetilación y Lavado, E: Enfriamiento, F: Demetanización y Deetanización y G: Fraccionamiento de Etileno).

Debe de quedar claro además; que aunque la representación de la planta puede parecer muy simple, es de una configuración muy complicada ya que por si solas algunas secciones tienen ciclos muy difíciles de resolver y que aunque el simulador hace los cálculos el papel del ingeniero químico es entre otros el de determinar en que secuencia debe de hacer los cálculos cuando el simulador tiene varias alternativas, determinar que variables utilizará para dar los estimados iniciales, seleccionar que forma parte del modelo y que no, determinar cual es la aplicabilidad del modelo e interpretar los resultados obtenidos por decir algunas de las decisiones que debe tomar.

Hasta ahora ya sabemos como vamos a construir el esquema de simulación de toda la planta, a continuación vamos a indicar como construimos el esquema de simulación de cada sección tomando como ejemplo la sección de secado y enfriamiento.

La Sección de Secado y Enfriamiento (Fig. 5.6) tiene la función de quitarle el agua a la corriente procedente del sistema de compresión y enfriarla para mandarla al sistema de destilación; esta sección esta formada por varios ciclos que involucran equipos de los sistemas de refrigeración de etileno y propileno (intercambiadores de calor). El principal problema que se encuentra en esta sección es el de definir las corrientes de corte (véase la fig. 5.6)

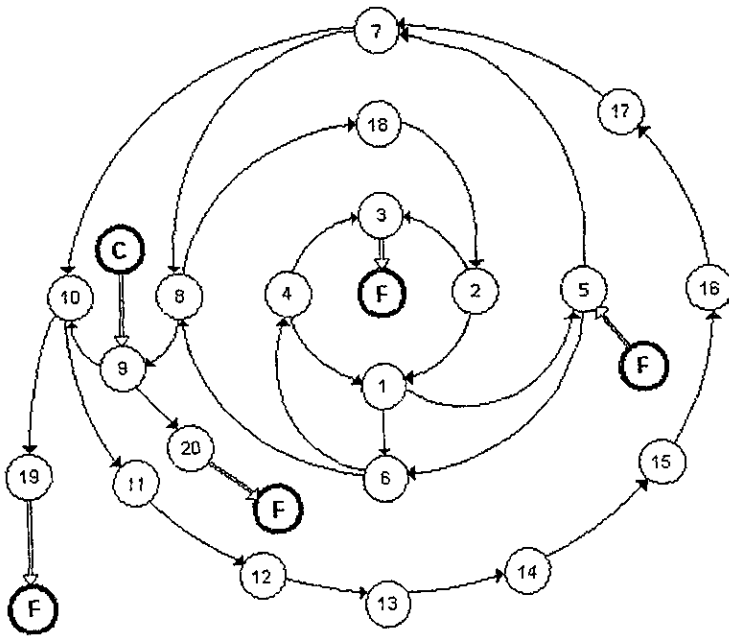


Fig. 4.2 Esquema de los ciclos presentes en la sección E (Secado y Enfriamiento).

- Nota 1.- Los nodos con numeración representan equipos de la sección.
 2.- Los nodos con letras representan secciones completas a donde se dirigen o de donde provienen corrientes

De igual manera que realizamos un análisis topológico de la configuración de la planta, realizamos un análisis de esta sección, el resultado de este análisis se muestra en la figura 4.2. Como puede verse en esta figura la configuración de la sección presenta varios ciclos y el arreglo de estos es muy complicado, lo que nos brinda varias alternativas para la selección de las corrientes de corte. Por otra parte, aunque podría pensarse en seguir la secuencia de cálculo del ciclo interno al más externo debe de estudiarse la estructura de los sistemas de refrigeración para elegir una secuencia correcta (los nodos 11-20 son intercambiadores de calor que involucran a los sistemas de refrigeración).

El mismo análisis que se realizó a esta sección es necesario aplicarlo a cada una de las demás secciones. El principal objetivo de este tipo de análisis es facilitar la elección de las corrientes de corte y determinar la secuencia de cálculo que se deberá seguir dentro de la sección. El procedimiento para generar el esquema de simulación de cada sección será similar al seguido para formar la planta, los ciclos se simularán uno a uno suponiendo la alimentación (con base a la información de diseño) y hasta que se obtengan resultados satisfactorios se procederá a unir los ciclos entre sí, de esta manera se generará todo el esquema de simulación de la sección.

Al comenzar a unir las secciones se presentarán los mayores problemas de la simulación: es de esperarse que no converja el esquema fácilmente, en tal caso deberá de modificarse la elección de las corrientes de corte, los métodos de convergencia, los valores de inicialización para las secuencias de cálculo, especificaciones de grados de libertad o la secuencia de cálculo. Al finalizar este punto tendremos el esquema de simulación de la planta sin el reactor de pirólisis.

5.- Prueba del Esquema de Simulación con el Modelo de Conversión Fija

Finalmente para validar el esquema de simulación (sin el reactor) utilizaremos un reactor de conversión fija para comprobar que el esquema funcionará con el reactor que modelaremos

posteriormente, la validación consistirá en modificar la alimentación y el enfriamiento conseguido en el ciclo E-G (este ciclo consiste en el enfriamiento de la alimentación a la demetanizadora, que se consigue con una parte de los fondos de la torre fraccionadora de etileno; la corriente que retorna a la sección E simplemente ha sido enfriada), se escogió esta variable porque es una variable clave para el Bloque 2 (altera la temperatura de alimentación a las torres), esto hace que se muevan las variables de toda la planta permitiéndonos comprobar que alguna modificación posterior a las mismas (dentro de un rango razonable); estará siendo efectuado por nuestras modificaciones realizadas. Cabe mencionar que al no tener otros datos diferentes a los de diseño y que al utilizar un reactor de conversión fija los cambios realizados no pueden compararse con ningunos resultados ni pueden tomarse como una propuesta, su objetivo es simplemente validar el esquema de simulación (que independientemente del reactor de cinética molecular el esquema está bien hecho). En el apéndice B encontramos el modelo del reactor de conversión fija.

El objetivo de esta etapa es depurar al máximo el esquema de simulación, todos los errores que se presenten deberán de ser corregidos, se utiliza una cinética de conversión fija porque el tiempo que necesita el simulador para resolver el reactor es mucho menor que el que emplea al resolver un modelo molecular, esto nos ahorra tiempo entre cada iteración.

6.- Modelo de Cinética Molecular para el Reactor de Pirólisis

Por último modelaremos el reactor, esto es debido a la complejidad y lo delicado que es modelar un reactor como el de pirólisis. Paralelamente al desarrollo del esquema se estudiará a fondo el problema y se simulará por separado el reactor, una vez conseguido un modelo que reproduzca satisfactoriamente los datos de diseño este sustituirá al reactor de conversión fija que tenía la planta al concluir el punto 5, esto se realizará de dos formas; la primera consistirá en sustituir el reactor cuando este ya este unido a toda la planta; la segunda forma consistirá en sustituir al reactor cuando la planta aún no este cerrada, esto es, se procederá a cerrar la planta con el reactor de pirólisis molecular; el objetivo de estas dos formas de introducir el reactor es el de confirmar que el reactor permite al esquema convergir desde dos puntos diferentes. Los detalles del modelo se encuentran en el apéndice B

CAPÍTULO V RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

El esquema de simulación generado se presenta en las siguientes páginas, el modelo desarrollado del reactor de pirólisis se muestra en el Apéndice C.

El esquema desarrollado tiene las siguientes consideraciones.

- Se eliminó la corriente de agua que sirve para precalentar la alimentación, esta corriente se sustituyó por una corriente de energía determinada por la temperatura de salida de la corriente de hidrocarburo (se fijaba la temperatura dejando libre el acercamiento); esto se hizo con fines de disminuir la carga de computo (se elimina un ciclo) ya que se observó que este intercambiador esta sobrediseñado y que no presenta problema el área de transferencia disponible ya que se encontró un sobrediseño del 50%.
- A la corriente de agua de apagado al salir del tanque de decantado se le eliminaron los hidrocarburos incondensables (H_2 , metano, etano, etileno), esto con el fin de evitar que una acumulación de incondensables en el circuito de agua de apagado pudiera causar problemas (como podría ser la aparición de una segunda fase)
- De la sección de secado y enfriamiento salen 4 alimentaciones a la torre demetanizadora; en la sección de demetanización se juntan las alimentaciones 3 y 4 para formar una sola alimentación. Para simplificar la secuencia de cálculo en el esquema desarrollado, se unieron las alimentaciones 3 y 4 para formar una alimentación única que es la que sale de la sección de enfriamiento y entra a la sección de demetanización. La principal razón para hacer esta simplificación es que eliminamos una corriente de corte, lo cual nos permite tener el menor número de corrientes de corte posible.
- Las torres de apagado y destilación se modelaron con una eficiencia de 0.7.

El esquema de simulación se construyó de la forma más apegada posible a los planos originales de la planta, a continuación se muestran los Diagramas de Flujo de Proceso que se construyeron con el simulador.

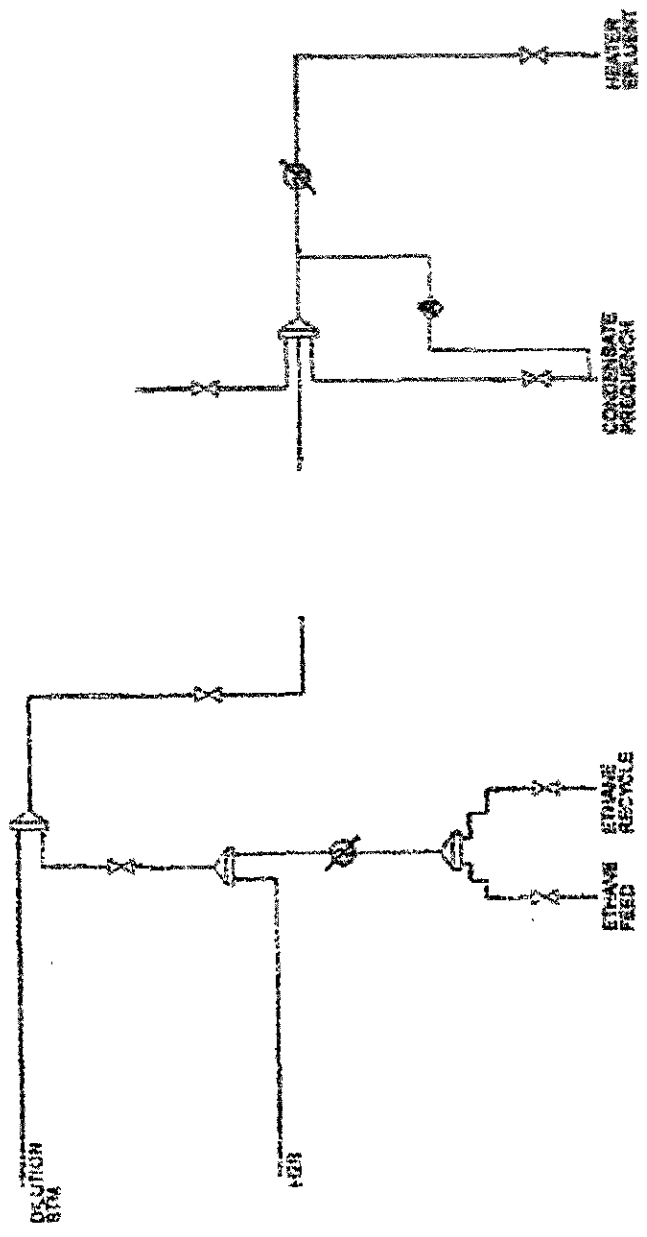


Fig. 5.2 Sección de Cracking

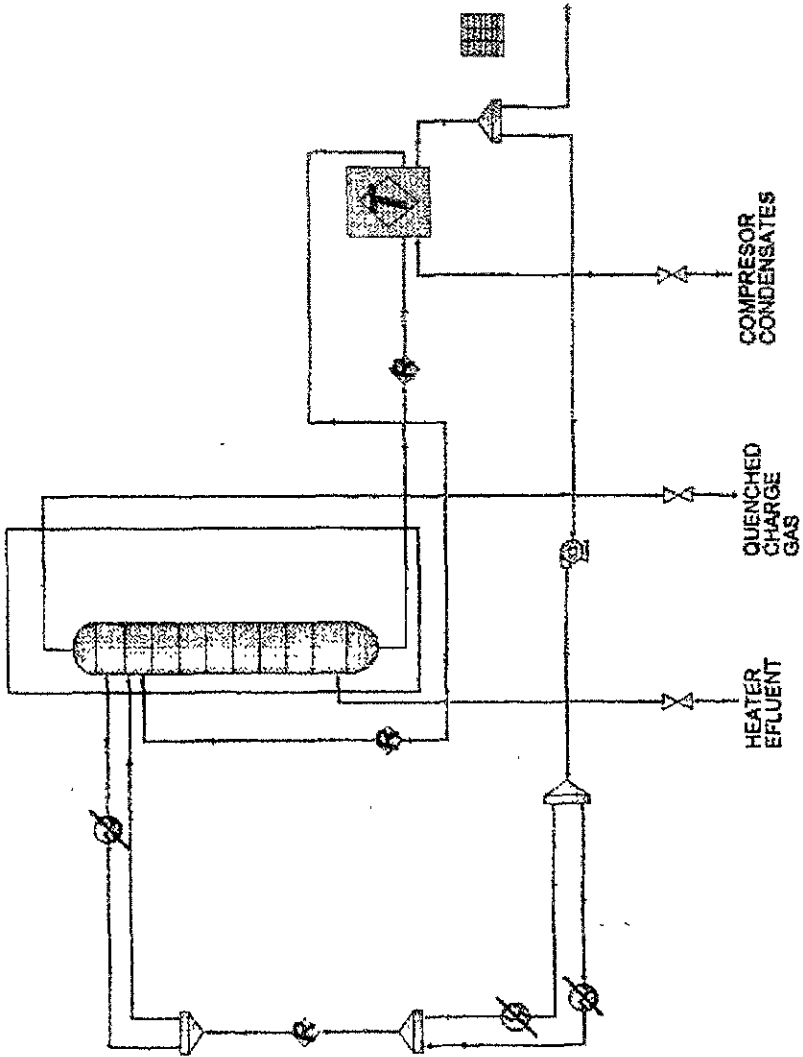


Fig. 5.3 Sección de Apagado

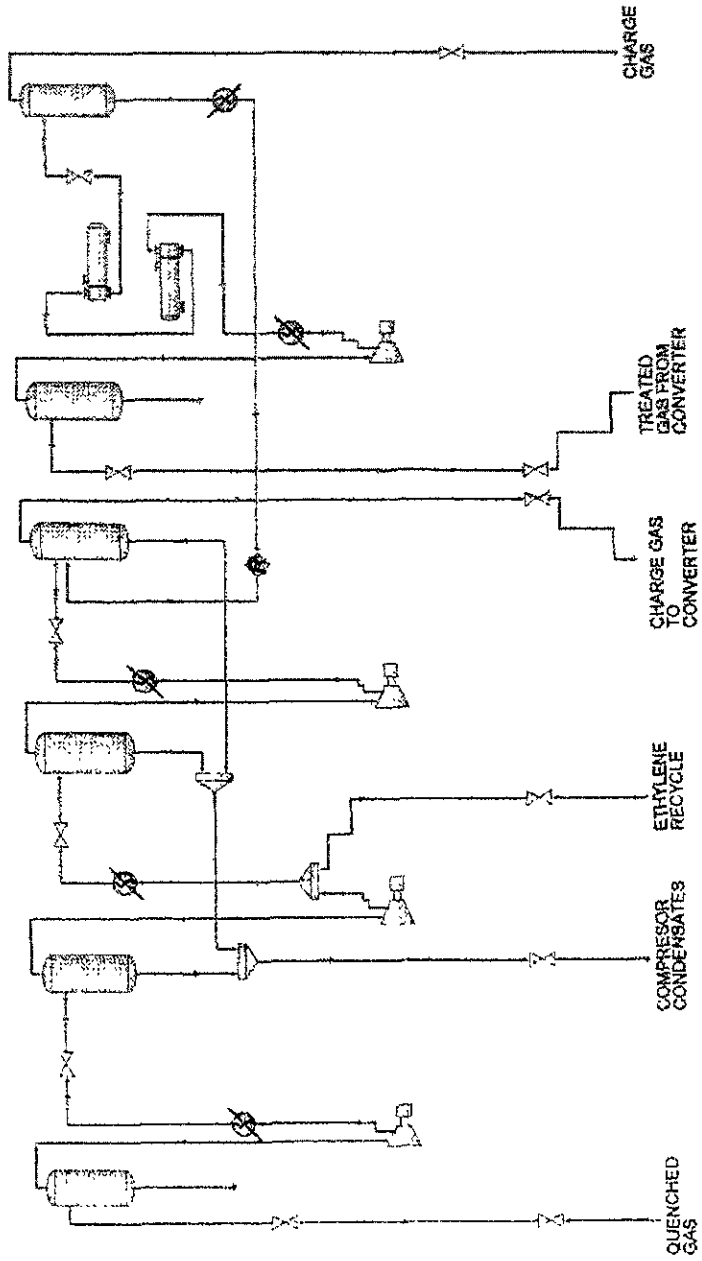


Fig. 5.4 Sección de Compresión

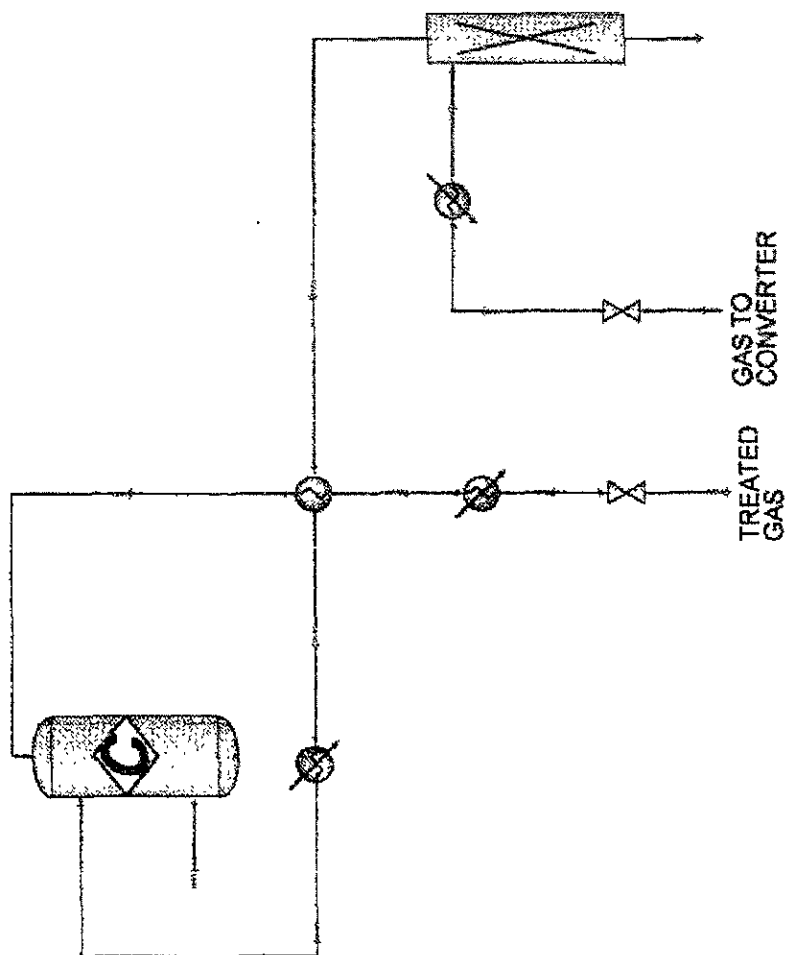


Fig. 5.5 Sección de Desacetilación y Lavado Cáustico

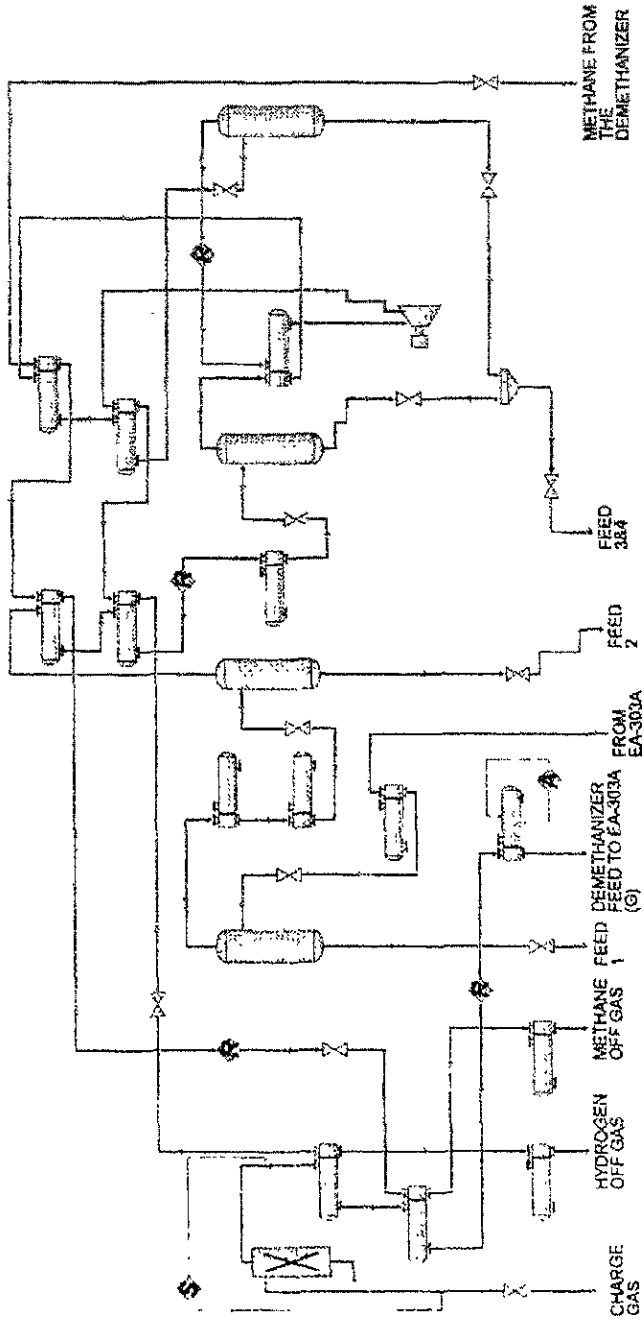


Fig. 5.6 Sección de Secado y Enfriamiento

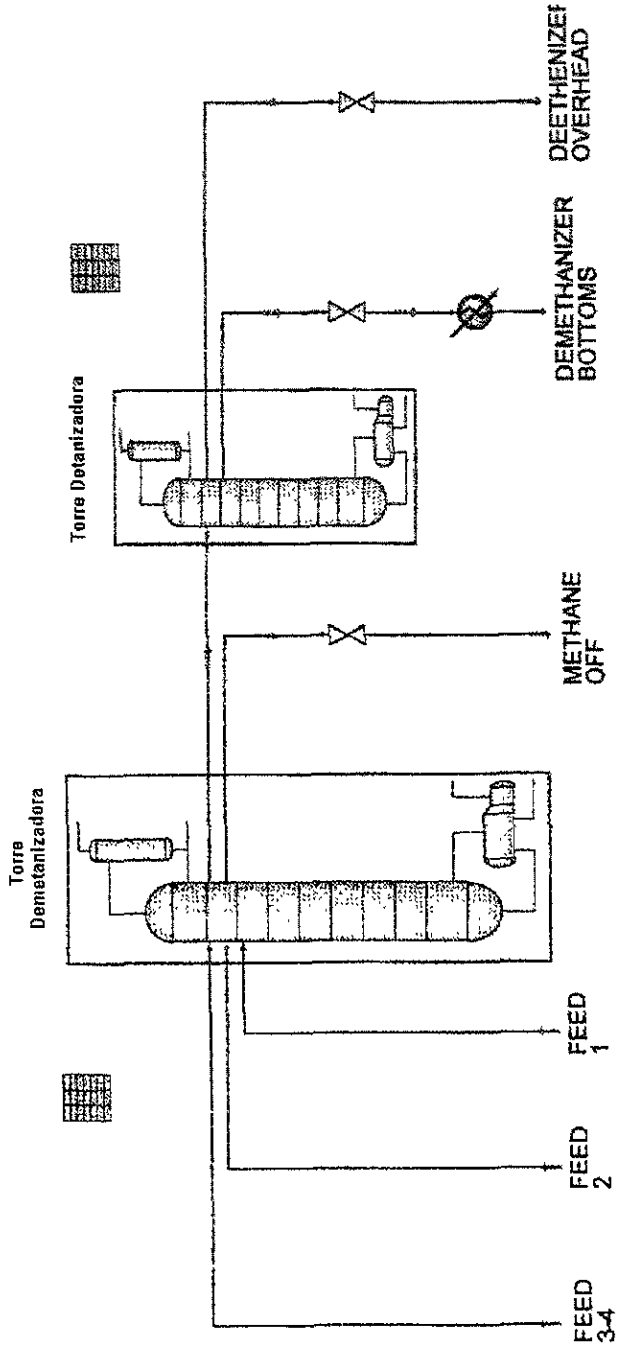


Fig. 5.7 Sección de Demetanización y Deetanización

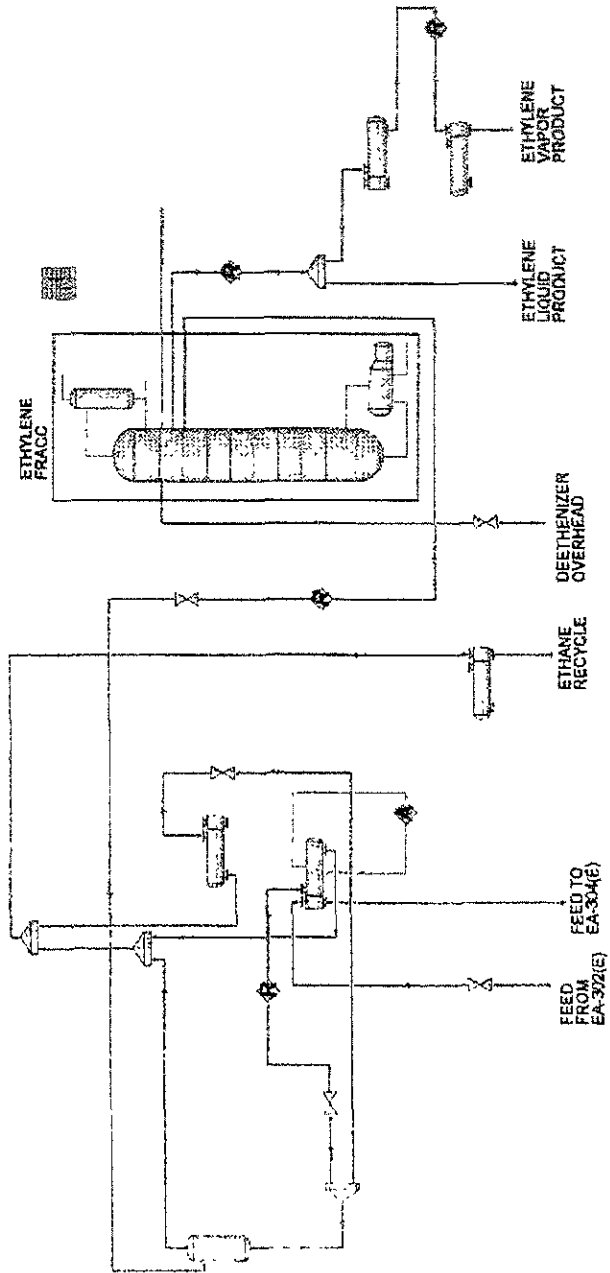


Fig. 5.8 Sección de Fraccionamiento de Etileno

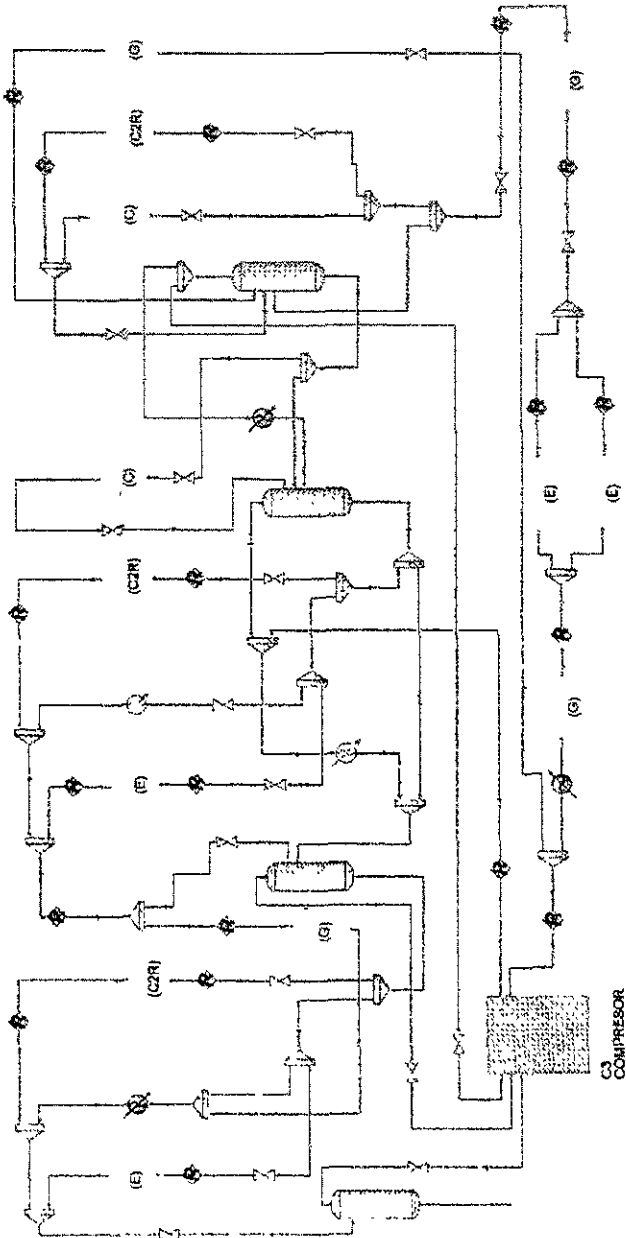


Fig. 5.9 Sistema de Refrigeración a base de Propileno

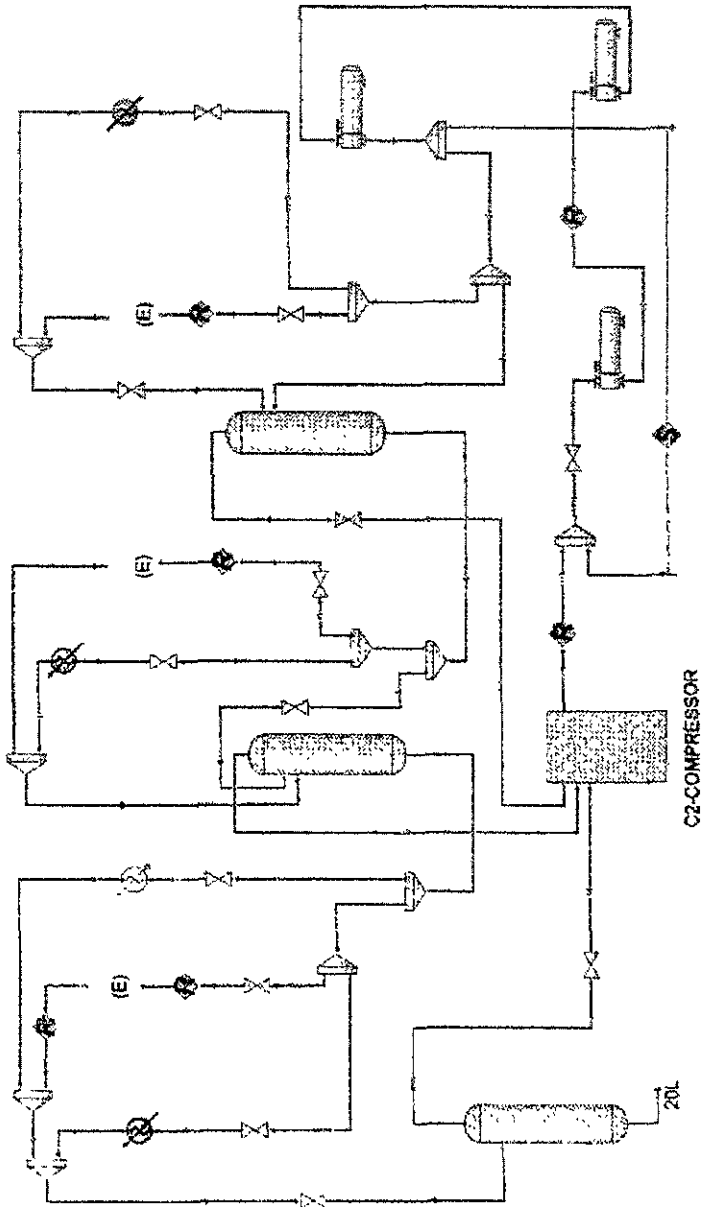


Fig. 5.10 Sistema de Refrigeración a base de Etileno

A continuación se muestran los resultados obtenidos en el presente trabajo y su comparación con los datos de diseño; en todos los casos, la comparación se realiza de la siguiente forma:

$$\text{DIFERENCIA} = (\text{RESULTADO SIMULACIÓN} - \text{DATO DISEÑO}) \times 100 / \text{DATO DISEÑO}$$

La comparación se hizo tomando las unidades siguientes:

Flujo: Lbmol / h
 Temperatura: °F
 Presión: Psig

Las características de los productos especificados en diseño y los resultados obtenidos en el presente trabajo se muestran a continuación:

Tabla 5.1 Resultados de los Productos Obtenidos

Sección Nombre	Diseño				Simulación				Diferencia (%)			
	Etileno	Hidrogeno	Metano	Pesados								
	G 9	E 4	E 5	F 11	9	4	5	11	9	4	5	11
Flujo (LbMOL/HR)	1312.3	2024.4	352.9	123.9	1807.2	1996.0	343.5	162.0	-0.3	-1.4	-2.6	23.5
T (F)	-19	30	30	196.0	-19.9	53.7	39.7	112.9	5.0	78.9	32.3	-73.6
P (PSIG)	275	100	55	395.0	275.7	75.0	26.0	395.0	0.2	-25.0	-52.7	0.0
Componente (LbMOL/HR)												
1 Hidrógeno	0	1803.7	59.6	-	0.0	1765.7	82.7	0.0		-2.1	38.8	
2 Metano	0.3	191.2	282.6	-	0.0	216.6	260.8	0.0	-90.8	13.3	-7.7	
3 Acetileno	0	0	0	-	0.0	0.0	0.0	0.0				
4 Etileno	1811.8	25.3	10	-	1807.0	12.7	0.0	0.0	-0.3	-49.9	-100.0	
5 Etano	0.2	1.5	0.2	1.3	0.2	1.0	0.0	65.3	-23.5	-31.1	-100.0	98.0
6 Propadieno	0	0	0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0				
7 Metilacetileno	0	0	0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0				-11422.4
8 Propileno	0	0	0	48.4	0.0	0.0	0.0	45.9				-5.5
9 Propano	0	0	0	14.8	0.0	0.0	0.0	13.6				-8.6
10 Butadieno	0	0	0	15.0	0.0	0.0	0.0	2.4				-523.1
11 Butilenos	0	0	0	21.1	-	-	-	9.2				-130.0
12 Butanos	0	0	0	4.4	-	-	-	0.0				inf
13 C5 y Pesados	0	0	0	15.4	-	-	-	25.6				28.1
14 Agua	0	0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0				
15 H2S	0	0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0				
16 CO2	0	0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0				
17 CO	0	0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0				

A continuación se presentan los resultados de las corrientes más importantes del proceso (corrientes de corte que unen las secciones), para identificar las corrientes véase la figura 5.1..

Tabla 5.2 Diferencias encontradas en las Principales Corrientes de Proceso

		Diferencias Obtenidas		
Corriente	Descripción	%F	%T	%P
Charge Gas	Corriente Procedente de la Sección de Compresión a la Sección de Enfriamiento	2.47	7.3	0
Ethylene Recycle	Corriente de Purga en la Torre Fraccionadora de Etileno que elimina los pesados.	171	-14.2	0
Demethanizer Feed 1	1a Alimentación a la Torre Demetanizadora, proveniente de la Sección de Enfriamiento.	2.89	-23.1	0
Demethanizer Feed 2	2a Alimentación a la Torre Demetanizadora, proveniente de la Sección de Enfriamiento.	2.98	-23	0
Demethanizer Feed 3	3a Alimentación a la Torre Demetanizadora, proveniente de la Sección de enfriamiento.	1.6	11	0
Demethanizer Feed 4	4a Alimentación a la Torre Demetanizadora, proveniente de la Sección de Enfriamiento.	44.69	-2.6	0
Deethanizer Overhead	Corriente que contiene el Etano y Etileno que se separan en la Torre Fraccionadora de etileno.	3.58	-31	0
Ethane Recycle	Etano que se separa del Etileno en la Torre Fraccionadora para mezclarlo con la materia prima.	6.19	-0.1	0

Los resultados detallados del modelo del reactor desarrollado se muestran en las tablas 5.3, 5.4 y 5.5.

Tabla 5.3 Resultados del Modelo de Reactor desarrollado

Nombre FLUJO (LBMOL/HR) T (F) P (PSIG)	DISEÑO				SIMULACIÓN				Comparación (Simulación vs diseño) (Diferencias en %)	
	Entrada		Salida		Entrada		Salida		Comp (%Lbmol)	Formación
	Comp	Formación	Comp	Formación	Comp	Formación	Comp	Formación		
Componente (LBMOL/HR)			%				%			
1 Hidrógeno	0.0	1901.2	24.9	1901.2	0.0	1850.5	24.2	1850.5	-3.1	-2.7
2 Metano	123.4	474.1	6.2	350.7	123.4	477.4	6.2	354.0	0.2	0.9
3 Acetileno	0.0	11.0	0.1	11.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-100.0	-100.0
4 Etileno	2.0	1849.1	24.3	1847.1	56.9	1877.0	24.5	1820.2	1.0	-1.5
5 Etano	3515.1	1407.9	18.5	-2107.2	3527.5	1494.4	19.5	-2033.1	5.6	-3.5
6 Propadieno	0.0	1.2	0.0	1.2	0.0	0.0	0.0	0.0	-100.0	100.0
7 Metilacetileno	0.1	1.8	0.0	1.7	0.0	0.0	0.0	0.0	-99.3	-99.2
8 Propileno	5.5	52.8	0.7	47.3	8.7	54.5	0.7	45.9	2.8	-3.1
9 Propano	103.4	14.4	0.2	-89.0	104.2	15.2	0.2	-89.0	5.3	0.0
10 Butadieno	0.0	29.9	0.4	29.9	0.0	4.9	0.1	4.9	-83.7	-83.6
11 Sulfonos	0.0	6.0	0.1	6.0	0.0	6.7	0.1	6.7	11.1	11.5
12 Butanos	0.0	4.4	0.1	4.4	0.0	0.0	0.0	0.0	-100.0	-100.0
13 CS y Pesados	0.0	18.6	0.2	18.6	0.0	25.8	0.3	25.8	38.2	38.9
14 Agua	1845.8	1836.8	24.1	-9.0	1845.8	1845.8	24.1	0.0	0.0	-100.0
15 H2S	0.0	0.0	0.0	0.0	0.6	0.6	0.0	0.0	-	-
16 CO2	0.0	9.7	0.1	9.7	6.8	6.8	0.1	0.0	-30.2	-100.0
17 CO	0.0	3.2	0.0	3.2	0.0	0.0	0.0	0.0	-100.0	-100.0

Tabla 5.4 Resultados Obtenidos en la distribución de Productos en el Reactor Modelado

Conversión de la Materia Prima	Diseño	Simulación	Comparación
Conversión de Etano :	59.95	57.64	-3.86
Conversión de Propano :	86.07	85.37	-0.81
Conversión de Etano + Propano :	60.69	58.43	-3.73
Productos Formados :	4232.0	4108.0	-2.93
Distribución de los Productos (en %Lbmol)			
Hidrógeno:	44.92	45.05	0.27
Metano:	8.29	8.62	3.98
Acetileno:	0.26	0.00	-99.98
Etileno :	43.65	44.31	1.52
Propadieno :	0.03	0.00	-100.00
Metilacetileno :	0.04	0.00	-99.19
Propileno :	1.12	1.12	-0.14
Butadieno :	0.71	0.12	-83.14
Butilenos :	0.14	0.16	14.91
Butanos :	0.10	0.00	-100.00
C5 y Pesados :	0.44	0.63	43.10
CO ₂ :	0.23	0.00	-100.00
CO :	0.08	0.00	-100.00

Tabla 5.5 Cantidad de Calor Requerido por los hornos de Pirólisis

Cantidad de Calor Requerido por los Hornos	Diseño	Simulación	Comparación
Consumo (MMBTU/H)	276.30	262.90	-4.85

Para el modelado de los equipos de intercambio de calor se contó con los datos de coeficiente de transferencia de calor, el área de transferencia, la carga térmica intercambiada y el acercamiento que se produce, estos datos solo se usaron en los equipos que involucraban corrientes de proceso; esto es, en los equipos que involucraban servicios auxiliares (vapor y agua de enfriamiento) simplemente se especificó la temperatura de salida de la corriente de proceso. En el esquema desarrollado se pueden diferenciar claramente los equipos, el icono de

un intercambiador redondo es un intercambiador de servicio, el icono alargado, (como un intercambiador de coraza y tubo) representa un intercambiador de proceso.

En la tabla 5.6 se muestra la comparación de los resultados obtenidos en los intercambiadores de calor de proceso, en esta tabla UA significa el producto del coeficiente de transferencia (U) y el área de transferencia (A).

Tabla 5.6 Diferencias encontradas en el Modelado de los intercambiadores de Calor

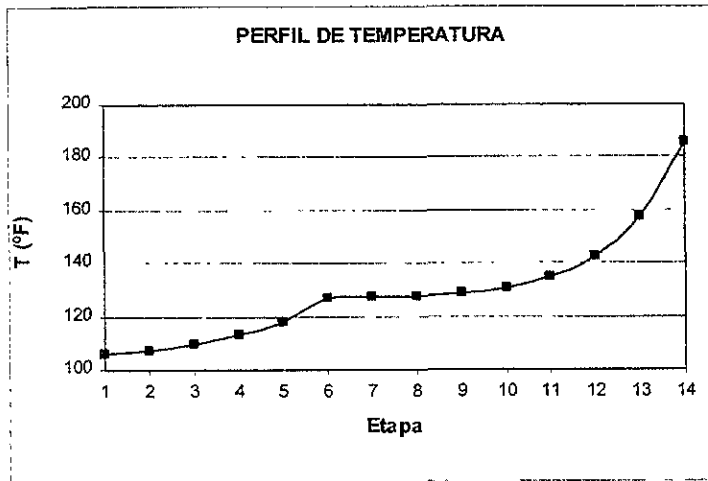
DIFERENCIA		
EQUIPO	Q	UA
EA-1	-6.0	-39.2
EA-2	-4.8	0
EA-3	7.9	0
EA-4	-16.0	0
EA-5	5.2	6.4
EA-6	-4.6	0
EA-7	4.1	0
EA-8	11.7	-0.1
EA-9	1.4	-0.1
EA-10	-56.1	0.2
EA-11	0.9	11.1
EA-12	18.1	187.4
EA-13	0.5	0
EA-14	-25.9	23.8
EA-15	-17.3	0.1
EA-16	-20.3	0
EA-17	36.2	0
EA-18	34.7	0
EA-19	47.8	0
EA-20	-94.7	0.9
EA-21	45.6	1.8
EA-22	2.9	-0.4
EA-23	86.9	-38.0
EA-24	-24.7	0
EA-25	-14.4	0
EA-26	-2.5	0

A continuación se muestran los resultados relacionados con las torres de absorción y destilación, en todos los casos el rehervidor y el condensador no se cuentan como etapas y la numeración de las etapas es del domo al fondo.

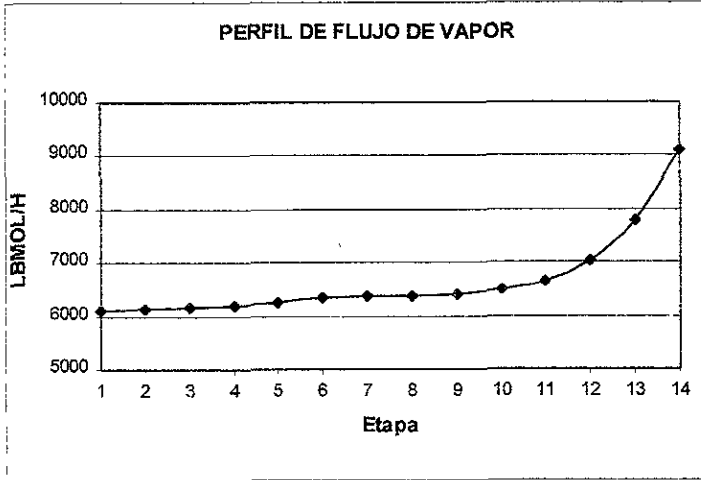
Resultados relacionados con la Torre de Apagado

La torre de Apagado (sección de apagado) es una torre de absorción localizada en la sección de apagado. Esta columna tiene 14 etapas ideales. La función de la torre es enfriar el producto de reacción de 600°F (316°C) hasta 180°F (82°C) por medio de contacto directo del gas con agua a 120°F (50°C), el agua de apagado entra en las etapas 1 y 6. En la gráfica del perfil de distribución clave ligero/clave pesado el etileno es el clave ligero y el agua es el clave pesado, las condiciones encontradas en la torre no permitían la existencia de una fase de líquido orgánico.

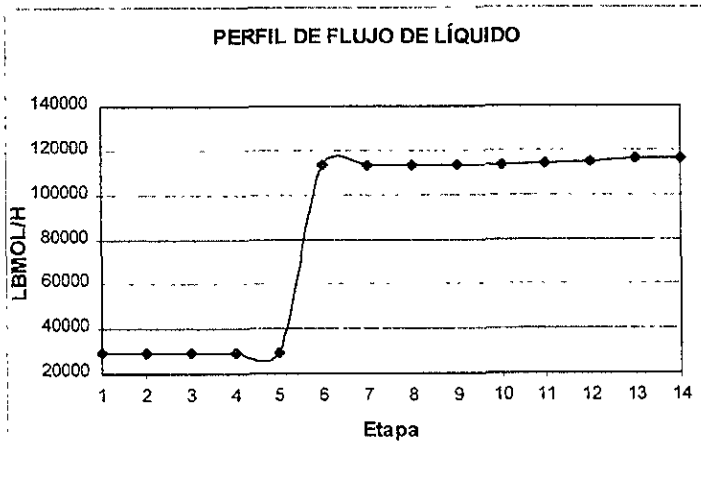
Gráfica 5.1 Perfil de temperatura de la torre de apagado (°F)



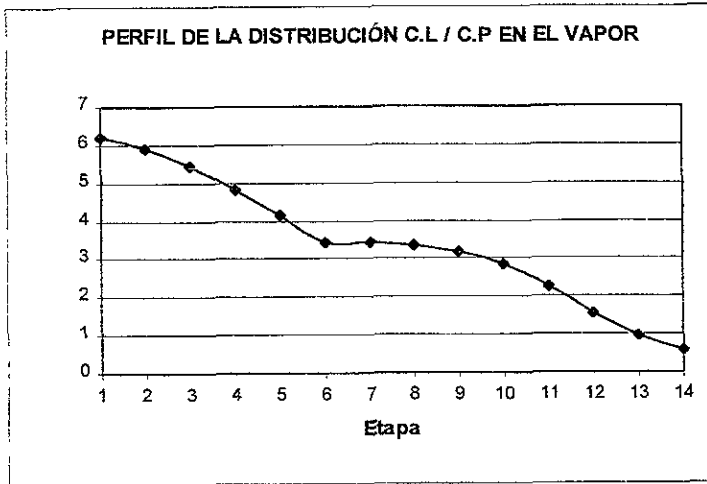
Gráfica 5.2 Perfil de Flujo de Vapor de la torre de apagado (LBMOL/H)



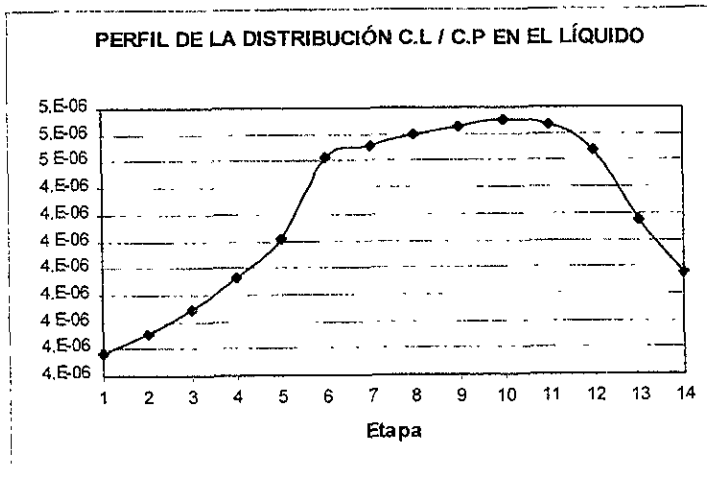
Gráfica 5.3 Perfil de Flujo de Líquido de la torre de apagado (LBMOL/H)



Gráfica 5.4 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el vapor de la Torre de Apagado (CL = Etileno, CP = Agua)



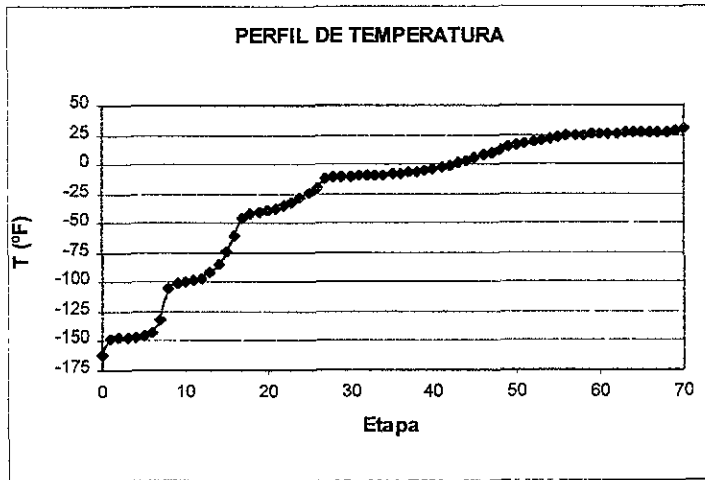
Gráfica 5.5 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el líquido de la Torre de Apagado (CL = Etileno, CP = Agua)



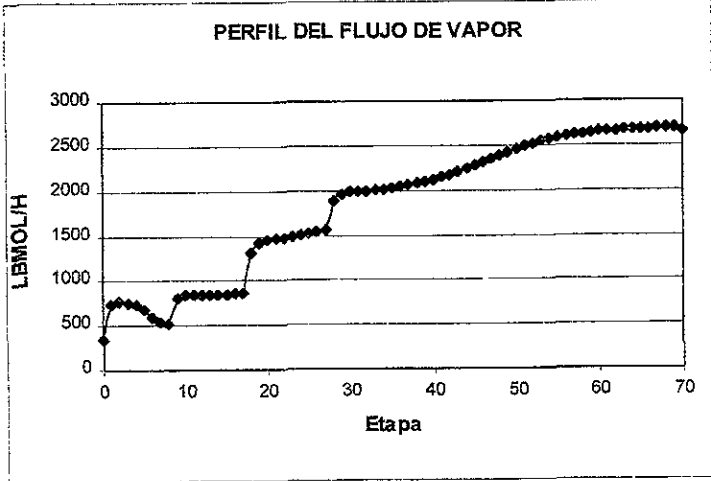
Resultados relacionados con la Torre Demetanizadora

Esta torre tiene 70 etapas ideales de equilibrio, tiene tres alimentaciones que se localizan en las etapas 8, 17 y 27, la columna se encuentra en la Sección de Demetanización y Deetanización. El producto de domo es una corriente rica en metano y el producto de fondo contiene el etileno, el etano y los pesados que serán separados en las etapas siguientes.

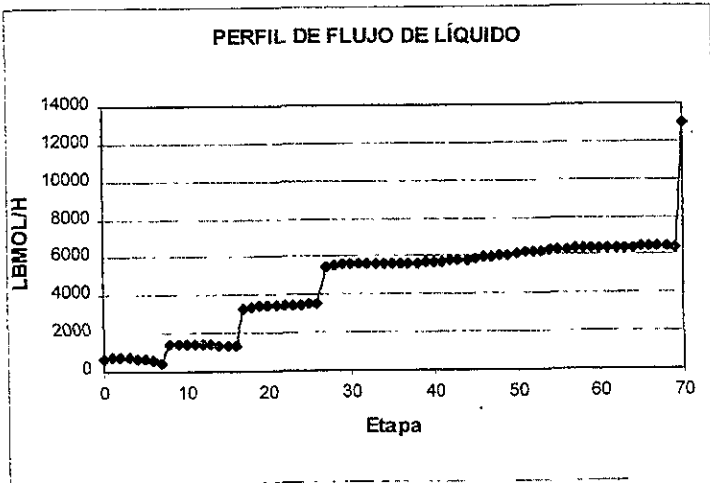
Gráfica 5.6 Perfil de temperatura de la torre Demetanizadora (°F)



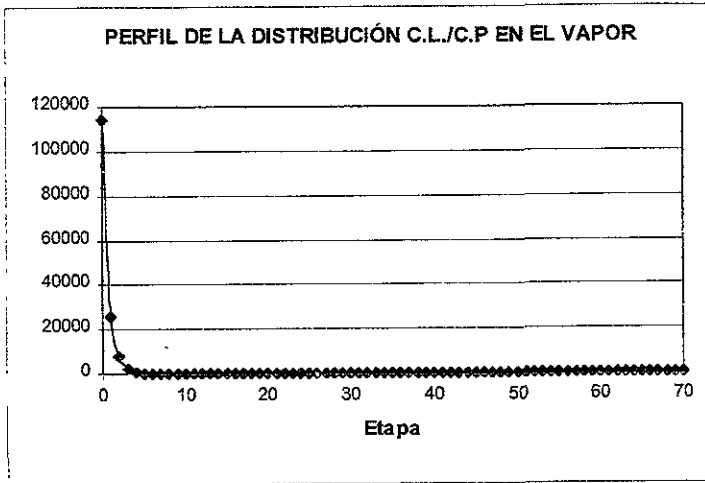
Gráfica 5.7 Perfil de Flujo de Vapor de la torre de demetanizadora (LBMOL/H)



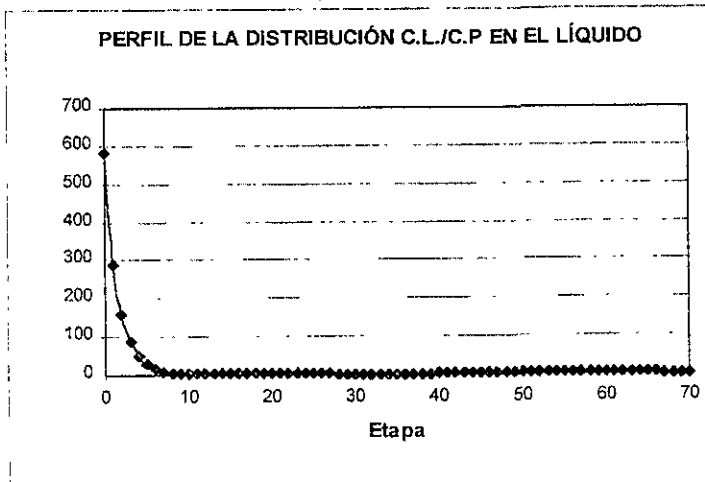
Gráfica 5.8 Perfil de Flujo de Líquido de la torre de demetanizadora (LBMOL/H)



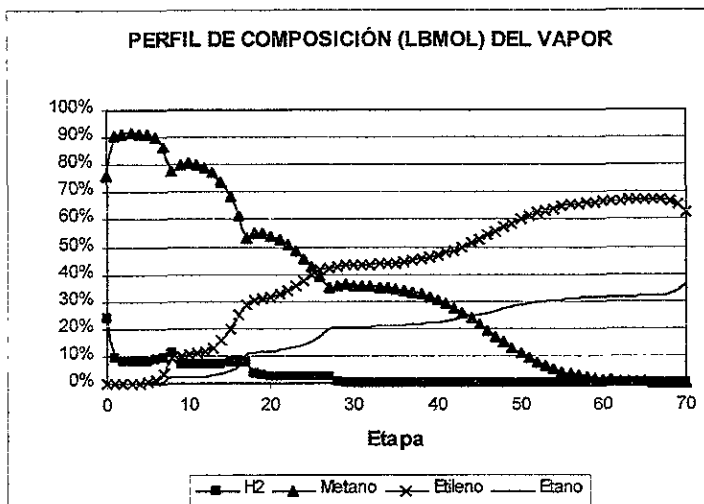
Gráfica 5.9 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el vapor de la Torre demetanizadora (C.L. = Metano, C.P=Etano)



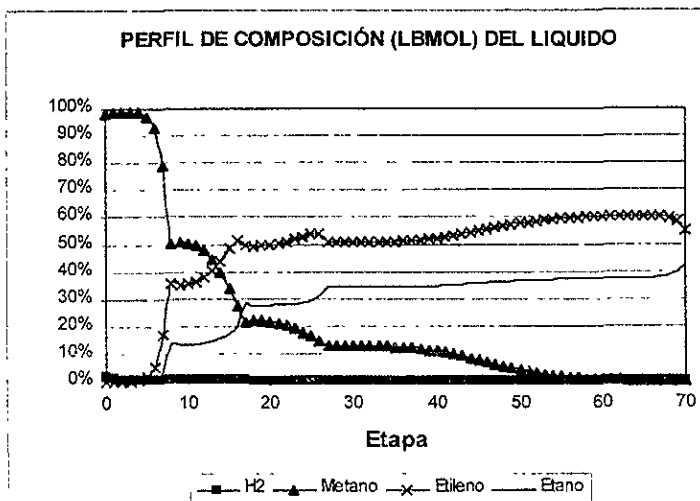
Gráfica 5.10 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el líquido de la Torre demetanizadora (C.L. = Metano, C.P=Etano)



Gráfica 5.11 Perfil de composición del Vapor de la torre de demetanizadora (fracción mol)



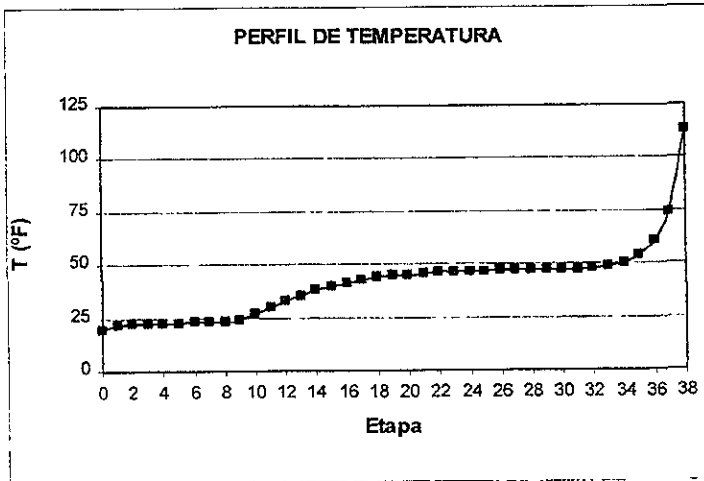
Gráfica 5.12 Perfil de composición del Líquido de la torre de demetanizadora (fracción mol)



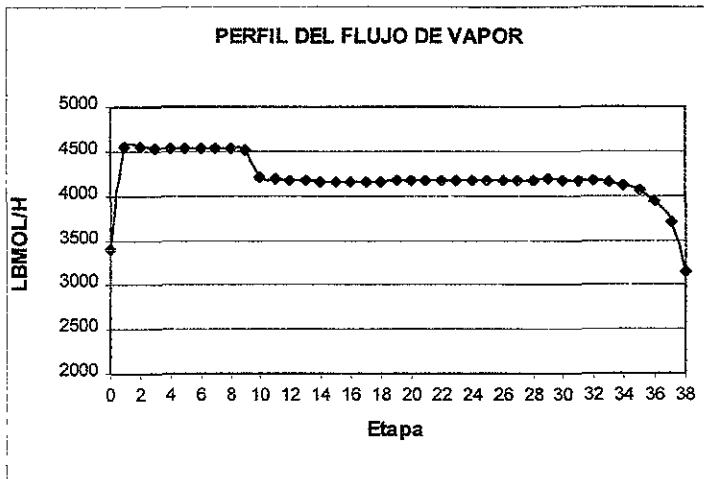
Resultados relacionados con la Torre Deetanizadora

Esta torre tiene 38 etapas y se encuentra localizada en la Sección de Demetanización y Deetanización; su función consiste en separar todos los pesados (más pesados que el etano) del Etileno y el Etano. La columna tiene una única alimentación en la etapa 9. El producto de los domos es una corriente que contiene el Etano y el Etileno que serán separados en la siguiente columna y el producto de fondos contiene los pesados que pasan al límite de baterías.

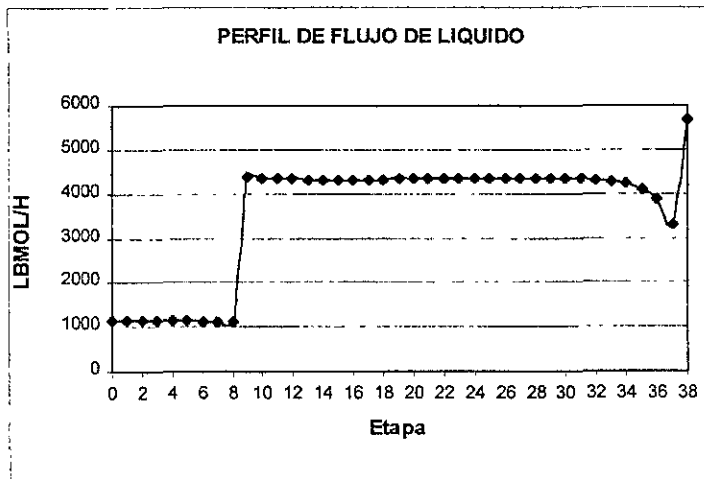
Gráfica 5.13 Perfil de Temperatura de la torre de deetanizadora (°F)



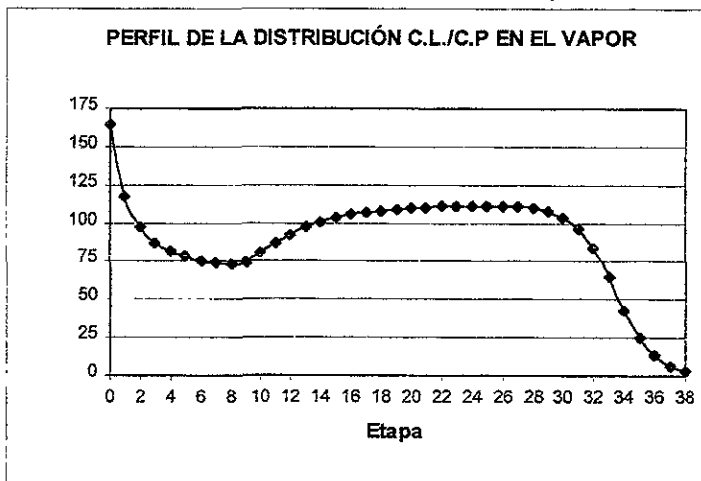
Gráfica 5.14 Perfil de Flujo de Vapor de la torre de deetanizadora (LBMOL/H)



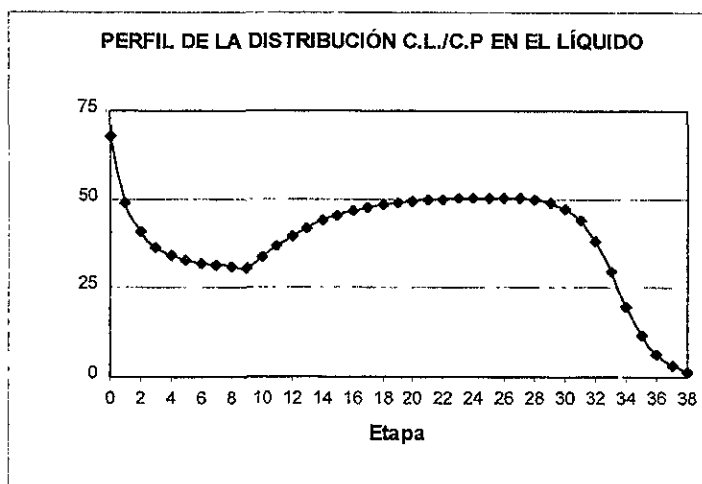
Gráfica 5.15 Perfil de Flujo de Líquido de la torre de deetanizadora (LBMOL/H)



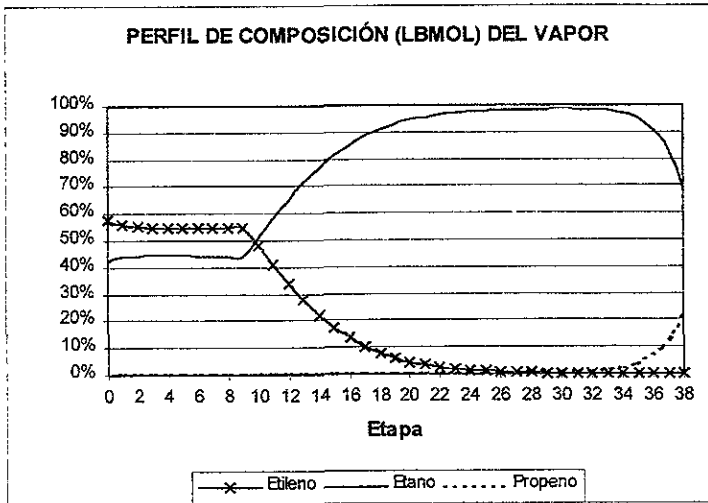
Gráfica 5.16 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el vapor de la Torre deetanizadora (CL = Etano, CP = Propeno)



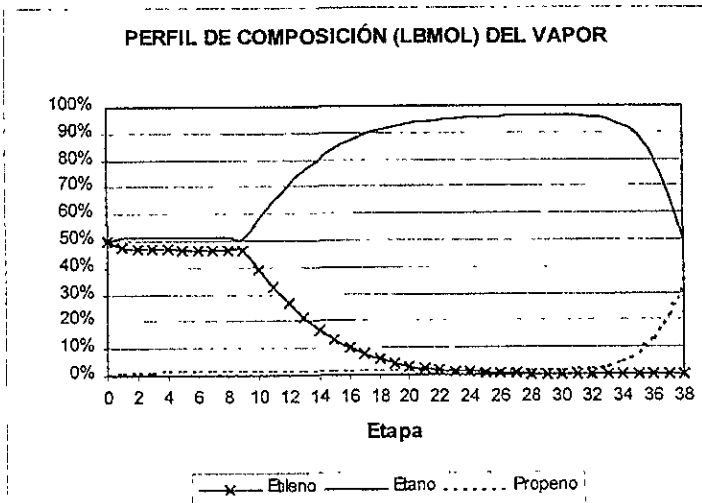
Gráfica 5.17 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el Líquido de la Torre deetanizadora (CL = Etano, CP = Propeno)



Gráfica 5.18 Perfil de composición del Vapor de la torre de deetanizadora (fracción mol)



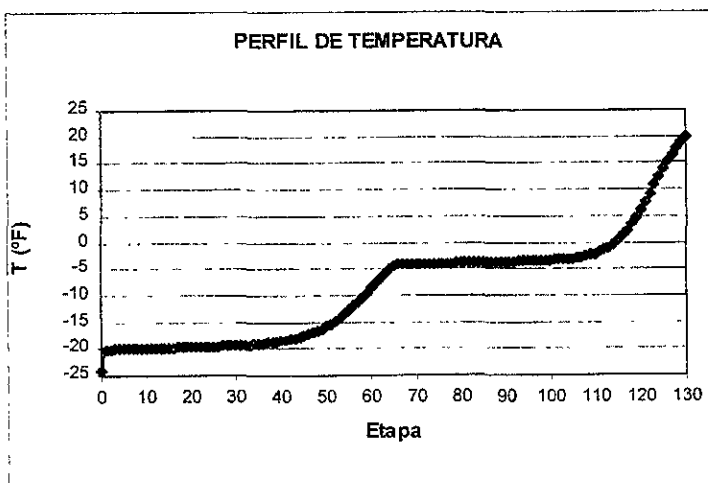
Gráfica 5.19 Perfil de composición del Líquido de la torre de deetanizadora (fracción mol)



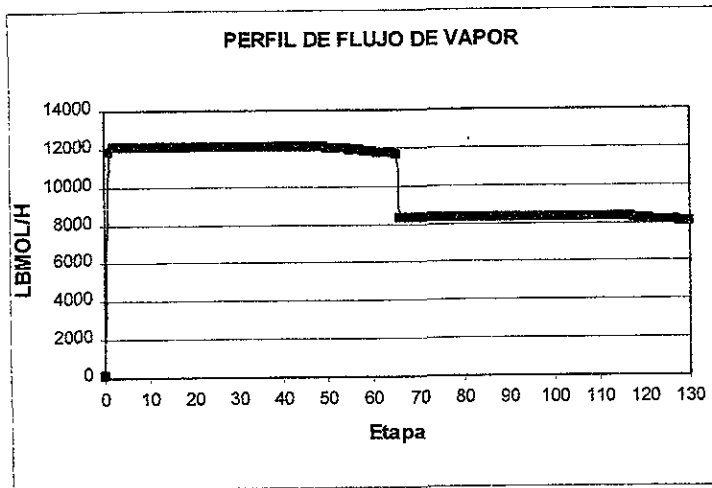
Resultados relacionados con la Torre Fraccionadora de Etileno

Esta es la torre más grande que tiene la planta, es de 130 etapas y se encuentra localizada en la Sección de Fraccionamiento de Etileno (G). Tiene tres posibles alimentaciones (etapas 65, 93, 101), para esta simulación se utilizó la primera alimentación (65). El producto se obtiene de la etapa 9 y es una corriente de líquido, se controla la composición del producto para que este tenga un 99.8%mol de Etileno. Los fondos de la torre son la corriente de etano que se recircula a los hornos de pirólisis y los domos son una corriente que se recircula a la sección de compresión (corriente de purga de pesados).

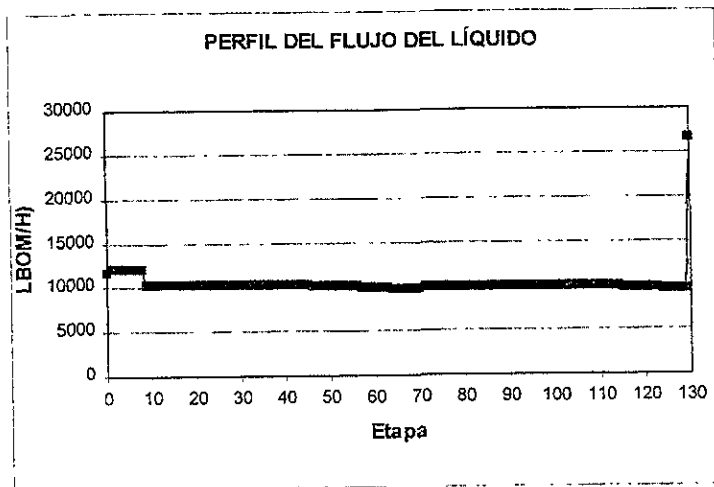
Gráfica 5.20 Perfil de Temperatura de la torre Fraccionadora de Etileno (°F)



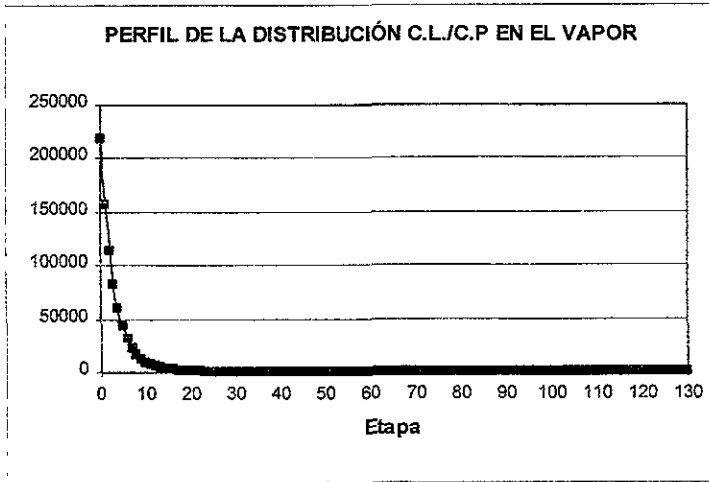
Gráfica 5.21 Perfil de Flujo de Vapor de la torre de Fraccionadora de Etileno (LBMOL/H)



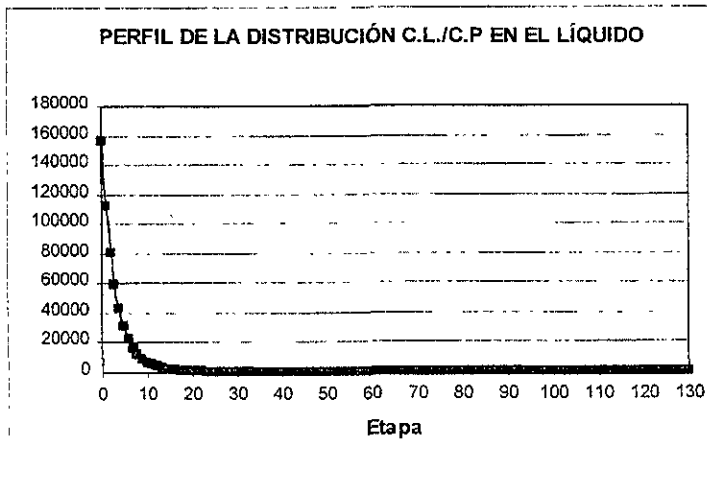
Gráfica 5.22 Perfil de Flujo de Líquido de la torre de Fraccionadora de Etileno (LBMOL/H)



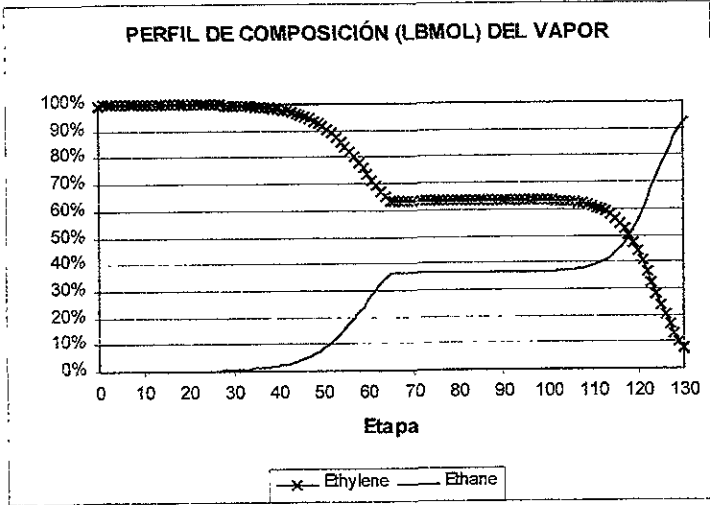
Gráfica 5.23 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el Vapor de la Torre Fraccionadora de Etileno (CL = Etileno, CP = Etano)



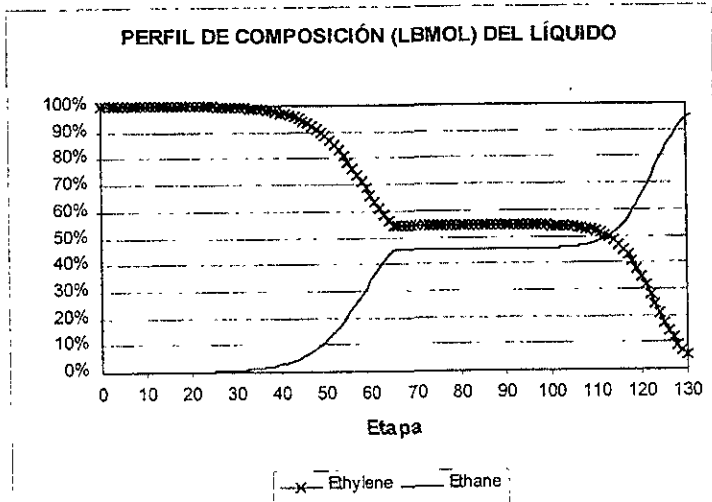
Gráfica 5.24 Perfil de distribución del Producto Clave Ligero / Clave Pesado en el Líquido de la Torre Fraccionadora de Etileno (CL = Etileno, CP = Etano)



Gráfica 5.25 Perfil de composición del Vapor de la torre de Fraccionadora de Etileno (fracción mol)



Gráfica 5.26 Perfil de composición del Líquido de la torre de Fraccionadora de Etileno (fracción mol)



CAPÍTULO VI

ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

Como hemos podido ver, se realizó la simulación de la planta con un modelo de cinética molecular para el reactor de pirólisis.

Las diferencias encontradas entre los resultados de la simulación y los datos de diseño son mínimas en las corrientes y equipos más importantes del proceso (menores al 5%); esto demuestra la calidad del esquema generado. Aunque en algunas variables se obtuvieron diferencias extraordinarias (casi del 200%), estas variables están relacionadas con los componentes minoritarios del sistema: el propeno, propadieno, acetileno y pesados.

La calidad del Esquema de Simulación depende por completo del modelo cinético usado para representar el reactor de pirólisis, el modelo utilizado (véase el apéndice B) es un modelo de cinética molecular muy simplificado que consta solamente de las reacciones principales que ocurren en la pirólisis (22 reacciones) y no toma en cuenta los procesos de transferencia de calor a lo largo del serpentín ni realiza un balance de la cantidad de movimiento. Los resultados obtenidos son satisfactorios teniendo en cuenta las consideraciones hechas al realizar el modelo.

El primer resultado que podemos analizar es la conversión de etano y propano (como podemos ver en la tabla 5.4). Se consiguió reproducir la conversión de la materia prima con una diferencia de -4%; esta diferencia es una diferencia aceptable. En la distribución de productos obtenidos tenemos que hablar de dos grupos, un primer grupo que representa el 98% de los productos formados (hidrógeno, metano, etileno y propileno) y un segundo grupo que agrupa el resto de los productos formados (acetileno, propadieno, metilacetileno, butadieno, butanos, butilenos, CO, CO₂, C5 y Pesados). En la simulación se logró reproducir la distribución de los componentes del primer grupo con una diferencia máxima de 4%; por otra parte no se logró reproducir la distribución del segundo grupo de componentes; en la mayoría de los casos se obtuvieron diferencias de varios órdenes de magnitud. Los flujos de los componentes minoritarios obtenidos en la simulación (acetileno, propadieno, metilacetileno, butilenos, C5 y pesados) presentan variaciones grandes con respecto a los datos de diseño; sin embargo,

estas variaciones son insignificantes comparadas con los flujos de los componentes principales (agua, etileno, etano, propeno e hidrógeno). Las diferencias encontradas se deben a que el esquema de reacciones utilizado es muy simple y en él faltan de tener en cuenta muchas transformaciones químicas. Las transformaciones químicas principales (las que involucran a los principales componentes) están incluidas en el esquema empleado y por ello los flujos de éstos componentes se reproducen excelentemente. Es por demás obvio decir que si utilizamos un modelo de cinética de pirólisis más completo (del orden de 150 reacciones y 50 especies químicas) lograremos reproducir los flujos de los componentes minoritarios. Al analizar los resultados del consumo energético del reactor de pirólisis (véase tabla 5.6), podemos ver que el Esquema de Simulación difiere en un -5% de los datos de diseño, esta diferencia es excelente ya que el modelo generado no consideraba pérdidas de calor ni ineficiencias en el proceso de transferencia de calor.

Los datos de las constantes de la cinética empleada en el modelo tuvieron que ajustarse para representar mejor el reactor de pirólisis de la Planta de Complejo Petroquímico Pajaritos, este ajuste se realizó solamente en el factor de frecuencia en las reacciones principales (véase el apéndice B), esta variación fue muy sutil ya que variaciones mínimas (del orden del 10%) repercutían fuertemente en la distribución de los productos obtenidos, la máxima variación que se realizó fue del 5%. Los datos de las constantes cinéticas del modelo originalmente empleado (Sundaram K.M. and Froment G.F 1976) fueron obtenidos por ajustes estadísticos que se realizaron teniendo como datos, datos de plantas existentes y resultados experimentales hechos en laboratorio. Como ya lo mencionamos en el capítulo 2, la constitución de los hornos de pirólisis repercute mucho en las transformaciones físicas, la caída de presión es un factor clave que puede hacer variar los resultados de un reactor a otro sin modificar otra variable más, era de esperarse que el modelo original no representará del todo bien los datos de diseño de la planta.

La Corrientes y los Equipos

Los resultados obtenidos en el reactor se ven reflejados en toda la planta, aquellas corrientes que se forman en su mayor parte de los componentes mayoritarios se han reproducido extraordinariamente bien, no así con las corrientes formadas principalmente por los componentes minoritarios; donde incluso, tenemos variaciones de casi el 200% (véase la tabla

5.2). Dado su poco peso que tienen en el proceso estas corrientes (son aproximadamente 6 corrientes en todo el proceso) su desviación no ha afectado al esquema generado.

Todos los equipos del proceso se simularon con diferencias mínimas; desde el reactor hasta las torres de destilación. En algunos casos los intercambiadores de calor simulados tuvieron cargas térmicas menores a las especificadas en los datos de diseño, esto se presentó específicamente en los intercambiadores que se encuentran en los sistemas de refrigeración. Las diferencias obtenidas se deben más que nada a la sensibilidad en el equilibrio líquido-vapor de las mezclas utilizadas en los sistemas de refrigeración, diferencias mínimas en la composición afectan mucho a la temperatura de ebullición de la mezcla. Es de esperarse que los resultados obtenidos con los modelos termodinámicos actuales difieran de los resultados obtenidos con modelos de hace 20 años o más. Esto nos lleva a la comparación de las temperaturas obtenidas, en el esquema se encontraron desviaciones de hasta 15°F, la comparación no se realizó en temperaturas absolutas ya que la magnitud de la temperatura en esta escala es muy grande y oculta grandes diferencias en porcentajes pequeños (una diferencia de 15°F corresponde a una diferencia del 4% aproximadamente). Estas diferencias se encontraron principalmente en los sistemas de refrigeración, sin embargo la desviación en la mayoría de los casos es de -5°F, lo cual no afectó mucho al esquema general.

Las presiones de los equipos y las corrientes se respetaron estrictamente excepto en algunos intercambiadores de calor que involucraban enfriamientos críticos en el proceso (en los sistemas de refrigeración y en la sección de enfriamiento), en estos casos se aumentó la caída de presión para disminuir la temperatura de la corriente fría y promover así una mayor transferencia de calor, estas desviaciones no afectaron al esquema en general.

En algunos intercambiadores de calor (2 equipos) se aumentó el coeficiente UA (Véase la tabla 5.5) dado que no se lograban las temperaturas requeridas en el proceso, esto se realizó debido a que las temperaturas conseguidas en ese equipo eran críticas para el proceso y tomando en cuenta que los equipos se construyeron con un factor de sobrediseño.

CAPÍTULO VII CONCLUSIONES Y COMENTARIOS

1. Las herramientas actuales de cómputo permiten al Ingeniero Químico simular plantas de proceso extraordinariamente complejas.
2. Antes de comenzar a simular es estrictamente necesario definir el modelo que se va a construir, este modelo debe de ser acorde a los objetivos planteados.
 - 2.1. Un modelo sofisticado implica mas trabajo en su desarrollo que un modelo simple; debe de quedar claro que un modelo no es mejor que otro, simplemente difieren en su concepción. El error más común que se comete es exigir resultados sofisticados a un modelo simple o pretender un bajo costo de un modelo sofisticado.
3. Un modelo de reactor de Pirólisis muy simple puede representar aceptablemente la producción de Etileno en la Planta de Etileno del Complejo Petroquímico Pajaritos. El alcance de un Esquema de Simulación de la Planta de Etileno del Complejo Petroquímico Pajaritos depende en su mayor parte del alcance del modelo del reactor.

La utilidad de los Esquemas de Simulación

El Esquema de Simulación generado en el presente trabajo, es un modelo que se forma a su vez de dos modelos: un modelo simple que representa al reactor de pirólisis y un modelo sofisticado que representa todas las secuencias de separación de los productos y adecuación de la materia prima. El presente esquema de simulación se puede mejorar y mucho, las mejoras permitirán obtener resultados más exactos y precisos o resultados que el esquema ahora no puede dar (*Dinámica del Proceso*).

El valor de un Esquema de Simulación de una Planta Química radica en las posibilidades que brinda como una herramienta más para el Ingeniero Químico, estas posibilidades van desde la solución de problemas de operación hasta la concepción de mejoras del proceso; ya sea de índole económica o de ingeniería.

El Esquema de Simulación generado en el presente trabajo tiene un uso potencial extraordinario; aunque se basa por completo en datos de diseño de la planta y la planta no opera bajo estas condiciones, es un excelente punto de partida para lograr reproducir las condiciones reales de operación. Las modificaciones que se tienen que hacer son mínimas y los beneficios que se podrían obtener son muy valiosos ya que podremos estudiar con gran certeza que es lo que ocurre en la planta y realizar estudios de optimización y de mejora del proceso.

Una de las primeras inquietudes que surgieron al analizar los resultados de la simulación de las torres, ha sido descubrir que en algunas de ellas existe un gran número de etapas (40 en la fraccionadora de etileno) donde no se dan cambios en la temperatura, cantidad y composición del líquido y el vapor; esto nos sugiere que las torres están bastante excedidas en su diseño (y por mucho). Un estudio de las torres de destilación con las condiciones reales de operación y la hidráulica dentro de la torre nos puede revelar si es posible o no, disminuir el tamaño de las torres; lo cual se traduce en una reducción en su mantenimiento y costo de operación.

Una muestra muy simple de los estudios que se pueden realizar con el presente esquema de simulación se muestra en el apéndice C, en este estudio vemos el efecto que tiene la temperatura de la alimentación de la torre deetanizadora sobre los servicios de calentamiento y enfriamiento requeridos si mantenemos las mismas especificaciones de los productos obtenidos.

REFERENCIAS

1. ANIQ. Anuario Estadístico de la Industria Química en México. México 1999
2. Bird R.B., et. al. Fenómenos de Transporte. Editorial Reverte. México 1992.
3. Clymans P.J. and Froment G.F. Computer-Generation of Reaction Paths and Rate Equations in the Thermal Cracking of Normal and Branched Paraffins. *Computer and Chemical Engineering* Vol 8, No. 2 , p.p. 137-142, 1984.
4. Dente M. Pierucci S., Ranzi E., Bussani G. New Improvements in Modeling Kinetic Schemes for Hydrocarbons Pyrolysis Reactors. *Chemical Engineering Science*, Vol 47, No. 9-11, p.p 2269-2634, 1992
5. Froment G.F. Kinetics and Reactor Design in the Thermal Cracking for Olefins Production. *Chemical Engineering Science*, Vol 47, No. 9-11, p.p 2163-2177, 1992
6. Froment G.F., Bischoff K.B. *Chemical Reactor Analysis and Design*. John Wiley and Sons. 1979
7. Froment G.F., et. al.. Thermal Cracking of Ethane and Ethane-Propane Mixtures. *Ind. Eng. Chem Process Des. Dev.*, Vol 15, No. 4, pp 495-504, 1976.
8. Kabadi N.V. and Danner P. R. A Modified Soave-Redlich-Kwong Equation of State for Water-Hydrocarbon Phase Equilibria. *Ind. Eng. Chem Process Des. Dev.*, Vol 24, No 3, pp 537-541, 1985.
9. Kniel L., Winter O., Stork K. *Ethylene : Keystone to the Petrochemical Industry*. Marcel Dekker, inc..New York 1980.
10. Kontopoulos J.A., Marechal F and Kalitventzeff B. Simulation and Optimization of an Ethylene Production Plant. *Computer Applications in Chemical Engineering*, p.p 159-164, 1990.

11. Levenspiel O. Ingeniería de las Reacciones Químicas. Editorial Reverté.
12. Reid R. C., et. al.. The Properties of Gases and Liquids. 4th Edition. Mc Graw-Hill International Edition 1988.
13. Smith R.W. Missen W.R. Análisis del Equilibrio en Reacciones Químicas. Teoría y Algoritmos. Editorial Limusa, México D.F 1897.
14. Sundaram K.M. and Froment G.F.. Modeling of Thermal Cracking Kinetics – I Thermal Cracking of Ethane, Propane and Their Mixtures. Chemical Engineering Science, 1977, Vol 32, pp. 601-608.
15. Sundaram K.M. and Froment G.F.. Modeling of Thermal Cracking Kinetics – II Cracking of iso-Butane and of Mixtures Ethane-Propane-n-Butane. Chemical Engineering Science, 1977, Vol 32, pp. 609-617.
16. Sundaram K.M. and Froment G.F.. Modeling of Thermal Cracking Kinetics – III Radical Mechanisms for the Pyrolysis of Simple Paraffins, Olefins and Their Mixtures. Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol 17, No. 3, 1978, p.p. 175-179.
17. Tomlin A.S. et. al.. Reduced Mechanisms for Propane Pyrolysis. Ind. Eng. Chem. Res. 1995, Vol. 34, p.p. 3749–3760.
18. Willems P.A. and Froment G.F. Kinetic Modeling of Thermal Cracking of Hydrocarbons. 1.- Calculation of Frequency Factors. Ind. Eng. Chem. Res. 1988, 27, pp 1959-1966
19. Willems P.A. and Froment G.F. Kinetic Modeling of Thermal Cracking of Hydrocarbons. 2.- Calculation of Activation Energies. Ind. Eng. Chem. Res. 1988, 27, pp. 1966-1971.
20. Xiao Y., et. al.. Understanding the Kinetics and Mechanisms of Hydrocarbon Thermal Cracking: an Ab Initio Approach. Ind. Eng. Chem. Res. 1977, 36, pp. 4033-4040.

APÉNDICE A

PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS DEL ETILENO

EL ETILENO

Propiedades físicas y químicas.

El etileno o eteno (C₂H₄) es un gas inflamable incoloro, con un tenue olor placentero. Ligeramente soluble en agua (25.6 ml/ 100g agua a 0°C) y en etanoi (360ml/100g), soluble en éter y en hidrocarburos líquidos. Sus principales propiedades físicas se muestran en la tabla A.1.

Tabla A.1 Propiedades físicas y químicas del etileno

<i>Propiedad</i>	<i>valor</i>
Mol. Wt.	28.05
mp	-169.4°C
bp	-103.8°C
Sp. Gr	0.978 /0°C
Tc	9.19 °C
Pc	5.04 MPa
Flash Point	-36.1 °C
Ignition temperature	450 °C
Vapor density (air=1)	1.8
Flamable Limits (%volume in air)	Lower 3.1 Upper 32

Grados Comerciales.

La calidad del etileno esta determinada por los requerimientos del consumidor, no existe un grado químico como tal; aunque el contenido de etileno normalmente excede el 99.9 %wt (en la tabla A 2 se muestran algunas especificaciones de calidad).

Azufre, oxígeno y acetileno son las impurezas mas indeseables y controladas especialmente cuando diferentes corrientes de etileno son mezcladas para transportar grandes cantidades de etileno. El azufre es un gran contaminante ya que envenena catalizadores, el oxígeno y el acetileno representan grandes riesgos durante ciertos procesos de almacenamiento y transportación.

Tabla A.2 Especificaciones de calidad del etileno

Componente	Método de prueba	Rango de Especificaciones (ppm)
Etileno	por diferencia	99.9 %wt (99.5 min)
Metano + etano	ASTM D 2505	50-2000
Propeno + Pesados	ASTM D 2505	7-200
Acetileno	ASTM D 2505	4-10
Hidrógeno	ASTM D 2504	.1-10
Monóxido de Carbono	ASTM D 2504	2-10
Dióxido de Carbono	ASTM D 2505	8-50
Oxígeno	ASTM D 2504	3-10
Azufre	ASTM D 3120	1-10
Agua	ASTM D 203	5-20

Almacenamiento y transportación.

Gran parte de la producción mundial del etileno es consumida localmente, requiriendo poco almacenamiento y transportación. Grandes sistemas de flujo interconectan varias plantas, proporcionando a estas un suministro muy seguro y constante durante todo el año (con un costos de transportación mínimo).

En los sistemas de tuberías, el etileno esta normalmente bajo presiones de 4-100 MPa, muy por encima de la presión crítica del etileno. La descomposición e ignición espontánea puede ocurrir bajo ciertas condiciones de operación y en presencia de impurezas como acetileno y oxígeno. Apropriadadas presiones de compresión especialmente cuando nitrógeno, oxígeno, o en la presencia de otros gases diatómicos inhiben la descomposición del etileno.

Protección ambiental.

La emisión al aire de contaminantes esta estrictamente regulada, el etileno es clasificado como un compuesto orgánico volátil, en las plantas donde se tenga como subproducto benceno se requiere un monitoreo constante para todos los equipos que manejen concentraciones de benceno superiores al 10%wt. o donde exista un riesgo potencial de emisión de benceno El agua de proceso requiere un tratamiento para poder descargarse a drenaje.

APÉNDICE B

Modelamiento del Reactor de Pirólisis

Un modelo es una representación abstracta de un fenómeno, en esta representación abstracta se realizan ciertas consideraciones para simplificar el estudio del fenómeno; estas consideraciones determinan la validez del modelo para representar el fenómeno en cuestión.

El reactor donde ocurre la pirólisis consiste en un horno que contiene tubos (serpentines) expuestos a fuego directo. La materia prima circula continuamente por estos tubos y es ahí donde se da la pirólisis. El modelamiento de los hornos de pirólisis involucra una compleja interpretación de los fenómenos de Transferencia de Calor, Dinámica de Fluidos y Cinética de las Reacciones Químicas. Realizar un modelo detallado que involucre todos estos fenómenos constituye una tarea monumental.

EL MODELAMIENTO DEL REACTOR

El reactor de pirólisis es del tipo de flujo tapón o pistón con flujo homogéneo, en un reactor de flujo pistón la composición del fluido varía a lo largo de todo el reactor. El modelo del reactor que se desarrolló para este trabajo es un modelo a estado estacionario que no considera la formación de coke a lo largo del serpentín, por lo que sus efectos en el balance de materia, energía y momento no se tomaron en cuenta, en la tabla B.1 se muestran los datos del reactor. A continuación se muestra en detalle el modelamiento del reactor.

Tabla B.1 Datos del Reactor de Pirólisis

Diámetro de los Tubos	0.1012 m
Longitud de los Tubos	96 m
Número de Tubos	40

El proceso de pirólisis lo podemos representar matemáticamente mediante las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias, bajo las condiciones de operación en estado estacionario.

1. Balance de Materia

En un reactor de flujo pistón la composición del fluido varía con la coordenada de posición en la dirección del flujo (z). El balance de materia para un componente de reacción ha de referirse a un elemento diferencial de volumen dV (Fig. B.1). Así para el reactivo A tenemos el balance siguiente:

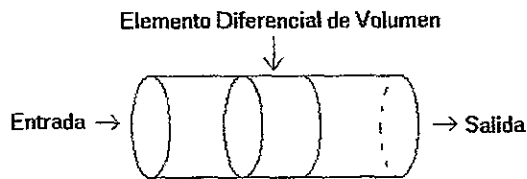


Fig. B.1 Reactor de Pirólisis

$$\text{Entrada} = \text{Salida} + \text{Desaparición por Reacción} + \text{Acumulación} \dots(1)$$

Sea F_A = Moles de Entrada de A al elemento diferencial.

$F_A + dF_A$ = Moles de Salida de A del elemento diferencial.

$(-r_A) \cdot dV$ = Moles de A que desaparecen por reacción en el elemento diferencial.

Dado que el sistema se encuentra en estado estacionario, no existe acumulación en el sistema.

$$\text{Acumulación} = 0$$

Introduciendo los elementos anteriores en la ecuación 1 tenemos lo siguiente:

$$F_A = (F_A + dF_A) + (-r_A) \cdot dV + 0 \dots(2)$$

Simplificando términos...

$$dF_A = -(-r_A) \cdot dV \dots(3)$$

Considerando que el reactor está compuesto de tubos cilíndricos de radio constante y despreciando el efecto de los retornos en la sección transversal del reactor tenemos...

$$dV = A_t \cdot dz \dots (4)$$

Donde A_t es el área de la sección transversal del reactor.

Sustituyendo la ecuación 4 en la ecuación 3 tenemos la variación del flujo del componente A, a lo largo del reactor.

$$dF_A = (-r_A) \cdot A_t \cdot dz \dots (5)$$

Acomodando los términos tenemos...

$$\frac{dF_A}{dz} = r_A \cdot A_t \dots (6)$$

Si tenemos un sistema formado por varias reacciones donde participan varios componentes como reactivos y productos podemos expresar la variación del flujo de cada componente a lo largo del reactor de la siguiente manera...

$$\frac{dF_j}{dz} = \left(\sum_{i=1}^{nr} \alpha_{ij} \cdot r_i \right) \cdot A_t \dots (7)$$

Donde

A_t : Área transversal interna del reactor.

nr : Número de reacciones.

α_{ij} : Matriz estequiométrica (coeficiente estequiométrico del componente j en la reacción i).

F_j : Flujo molar del componente j.

z : Longitud del reactor.

r_i : Velocidad de la reacción i

La concentración del componente j la representamos de la siguiente manera...

$$C_j = \frac{F_j}{\sum_{j=1}^{nc} F_j} \cdot \frac{P}{R \cdot T} \dots (8)$$

Donde:

F_j : Flujo del componente j

nc : Número de componentes.

P : Presión absoluta del sistema

R: Constante Universal de los Gases.
T: Temperatura absoluta.

La velocidad de la reacción r_i la hemos representado de dos maneras diferentes, mas adelante se muestran los dos esquemas de reacciones empleados.

2. Balance de Energía

El reactor es un sistema no adiabático donde se suministra energía por mecanismo de radiación. Las reacciones químicas de la pirólisis son endotérmicas y además se requiere elevar la temperatura de la corriente para tener así una mejor conversión. La materia prima corre por serpentines verticales que van entre paredes de material refractario donde están localizados varios quemadores que se alimentan de gas combustible y generan una flama más o menos constante ya que el control de temperatura del producto final se lleva a cabo precisamente regulando la cantidad de gas combustible que va a los quemadores

El balance de energía en un segmento del reactor se puede escribir de la siguiente manera:

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{nc} F_j \cdot C_{p_j}} \cdot \left[Q(z) \cdot A_i + A_i \cdot \sum_{i=1}^{nr} (-\Delta H_i) \cdot r_i \right] \dots (9)$$

donde

T: Temperatura del tubo.

z: Longitud del tubo.

nc : Número de componentes.

nr: Número de reacciones.

F_j : Flujo del componente j.

C_{p_j} : Capacidad calorífica del componente j.

$Q(z)$: Flujo de calor hacia el interior del reactor basado en el área interna del tubo.

ΔH_i : Calor de la reacción i.

Para realizar el balance de energía se requiere tener el perfil de flux de calor a lo largo del reactor y como no se contaba con esta información se consideró que la temperatura del tubo aumenta linealmente a lo largo del reactor. La temperatura final está definida por las condiciones de diseño. Por lo tanto...

$$\frac{dT}{dz} = cte. \dots(10)$$

El balance de energía se resume a calcular la cantidad de calor necesaria para calentar los reactivos a una temperatura dada y el calor de reacción requerido para que se de la transformación química tomando en cuenta la conversión obtenida en el elemento de volumen de control.

3. El Balance de Momento

Usando la ecuación de Bernoulli, el balance de momento se puede reducir a una ecuación de caída de presión a través del reactor tubular (Ref. 6)

$$\frac{dP}{dz} = \frac{\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{Mm} \right) + \frac{1}{Mm} \left(\frac{1}{T} \cdot \frac{dT}{dz} + Fr \right)}{\frac{1}{Mm \cdot P} \cdot \frac{P}{\alpha \cdot G^2 \cdot R \cdot T}} \dots(11)$$

con:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{Mm} \right) = \frac{d \left(\frac{\sum_{j=1}^{nc} F_j}{G \cdot A_t} \right)}{dz} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \left(\frac{dF_j}{dz} \right)}{G \cdot A_t} \dots(12)$$

donde

Mm: Peso molecular promedio.

nc: Número de componentes

G: Velocidad del flujo másico.

Fr: Pérdida de presión debido a las fricciones.

α : Factor de conversión.

Para realizar este balance se requiere la configuración del arreglo de tubos y el perfil de temperatura a lo largo de estos (un perfil confiable); como no se cuenta con esta información se consideró que la caída de presión a lo largo del reactor es lineal por lo que:

$$\frac{dP}{dz} = cte \dots(13)$$

El valor de la caída de presión se tomó a partir de los datos de diseño ($\Delta P = 15$ psi).

LA CINÉTICA DE LA PIRÓLISIS

La parte central del modelamiento del horno de pirólisis es el modelo cinético empleado para representar las transformaciones químicas que se presentan. Como se indicó en la estrategia para generar el esquema de simulación se emplearon dos modelos de la cinética de la Pirólisis; un modelo de conversión fija y un modelo de cinética molecular.

4. Modelo de la Cinética de Pirólisis de Conversión Fija

Este modelo se desarrolló con los datos de diseño de la planta. Se propuso un esquema de reacción que involucrara el mínimo número de reacciones para determinar el sistema (Ref. 13), dado que el azufre (H_2S) solo actúa como catalizador en la reacción (inhibidor de reacciones secundarias) este compuesto no forma parte del modelo.

Tabla B2 : Esquema de Reacción de Conversión Fija

Núm.	Reacción	Conversión (%)
1	$Etano \rightarrow Acetileno + 2H_2$	0.0028
2	$Etano \rightarrow Etileno + H_2$	52.5475
3	$2Etano \rightarrow Butadieno + 3H_2$	1.7012
4	$2Etano \rightarrow Buteno + 2H_2$	0.1137
5	$2Etano \rightarrow Butano + H_2$	0.12515
6	$Etano + 4H_2O \rightarrow 2CO_2 + 7H_2$	0.041
7	$Etano + 2H_2O \rightarrow 2CO + 5H_2$	0.045
8	$Etano + H_2 \rightarrow 2Metano$	4.7523
9	$Pr opano \rightarrow Pr opadiene + 2H_2$	1.1605
10	$Pr opano \rightarrow MetilAcetileno + 2H_2$	1.6441
11	$Pr opano \rightarrow Pr opileno + H_2$	45.7446
12	$Pr opano + Etano \rightarrow n - Pentano + H_2$	8.9941
13	$2 Pr opano \rightarrow Benceno + 5H_2$	17 9883
14	$Pr opano \rightarrow Acetileno + Metano + H_2$	10.5415

Nota: 1.- Las conversión de las reacciones 1-8 están en base al etano, el resto de las reacciones están en base a la conversión de propano.

2 - Las reacciones que involucran butanos deben tomarse como una reacción para cada butano y la que involucra butenos debe tomarse como una reacción para cada buteno (2 y 3 reacciones respectivamente).

El sistema esta formado por tres elementos (C, H, O) y 17 compuestos; por lo tanto se requieren 14 reacciones para definir completamente al sistema; aunque se podrían utilizar más reacciones para generar un esquema más apegado a los esquemas de reacción molecular, esto no le da mayor utilidad al modelo (las reacciones que se añadan serán combinaciones lineales de las 14 reacciones que proponemos). En la tabla B.2 se muestran las reacciones propuestas.

Este modelo fue obtenido por medio de un ajuste de las conversiones de las reacciones involucradas teniendo como objetivo reproducir los flujos indicados en el diseño del reactor. Las conversiones propuestas ajustaron perfectamente la composición del producto final (una diferencia máxima con los datos de diseño del 1%; para los flujos de cada componente).

5. Modelo de la Cinética de Pirólisis Molecular

El modelo de la cinética de Pirólisis molecular empleado en el esquema de simulación es el propuesto por Froment y Sundaran en 1977 (Ref 14,15). Este modelo fue obtenido a partir de datos experimentales de cracking de etano, propano, butano y sus mezclas. El esquema molecular es postulado pretendiendo estar lo más cerca posible a los verdaderos mecanismos de pirólisis: Mecanismos de Radicales Libres.

Para generar el esquema los autores emplearon mecanismos de reacción a base de radicales libres y principios termodinámicos, los parámetros asociados fueron obtenidos por medio de regresiones no lineales utilizando el método de Maquardt para minimizar la función objetivo establecida, de entre varios esquemas propuestos el presente esquema fue seleccionado basandose en criterios físicos y pruebas estadísticas.

El esquema de reacción está compuesto por 22 reacciones (véase tabla B.3). La cinética de todas las reacciones es de primer orden y solo involucra a los reactivos, en el caso de las reacciones reversibles se empleo el concepto de la constante de equilibrio para determinar la velocidad de la reacción inversa. La cinética de las reacciones tiene un comportamiento con la temperatura que se ajusta a la ecuación de Arrhenius (ecuación 14).

$$k = A \cdot e^{\left(\frac{E}{kT}\right)} \dots (14)$$

En la tabla B.3 se muestran los valores del factor de frecuencia y la energía de activación de todas las reacciones.

La reacción $2\text{Etano} \rightarrow \text{Propano} + \text{Metano}$ tiene la siguiente ecuación cinética:

$$-r_{\text{Etano}} = k_1 C_{\text{Etano}} \dots (15)$$

La reacción $\text{Etano} \leftrightarrow \text{Etileno} + \text{H}_2$ tiene la siguiente ecuación cinética:

$$-r_{\text{Etano}} = k_1 \cdot C_{\text{Etano}} - k_2 \cdot C_{\text{Etileno}} \cdot C_{\text{H}_2} \dots (16)$$

A la temperatura T, en el equilibrio, la velocidad neta de consumo de etano es nula por lo que...

$$k_1 \cdot C_{\text{Etano}} = k_2 \cdot C_{\text{Etileno}} \cdot C_{\text{H}_2} \dots (17)$$

Acomodando los términos podemos ver que...

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{\text{Etileno}} \cdot C_{\text{H}_2}}{C_{\text{Etano}}} = K_{\text{Eq}} \dots (18)$$

Este valor constante es la constante de equilibrio de la reacción (K_{eq}) a la temperatura T; entonces la velocidad de consumo de Etano la podemos expresar de la siguiente forma...

$$-r_{\text{Etano}} = k \cdot \left[C_{\text{Etano}} - \frac{1}{K_{\text{Eq}}} \cdot C_{\text{Etileno}} \cdot C_{\text{H}_2} \right] \dots (19)$$

La constante de equilibrio se ha expresado en función de la temperatura de la siguiente forma:

$$\ln(K_{\text{eq}}) = A + B/T + C \cdot T \dots (20)$$

En la tabla B.3 se muestran los coeficientes de esta ecuación para aquellas reacciones que son reversibles.

Tabla B.3 Esquema de Reacción de Cinética Molecular (Parte 1 de 2)

	Reacción	Constantes de la Ecuación de Arrhenius	Parámetros de la constante K de equilibrio
1	Etano \leftrightarrow Etileno + H_2 $C_2H_6 \leftrightarrow C_2H_4 + H_2$	$A = 4.652 \times 10^{13} \text{ 1/s}$ $E_A = 65.21 \text{ kcal/mol}$	$A = 11.4014$ $B = -1.6571 \times 10^4$ $C = -2.9928 \times 10^{-4}$
2	Propileno \leftrightarrow Acetileno + Metano $C_3H_6 \leftrightarrow C_2H_2 + CH_4$	$A = 3.794 \times 10^{11} \text{ 1/s}$ $E_A = 59.39 \text{ kcal/mol}$	$A = 1.0731 \times 10^1$ $B = -1.5563 \times 10^4$ $C = -4.8083 \times 10^{-4}$
3	Acetileno + Etileno \rightarrow Butadieno $C_2H_2 + C_2H_4 \rightarrow C_4H_6$	$A = 1.026 \times 10^{12} \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\text{/s}$ $E_A = 41.26 \text{ kcal/mol}$	
4	2Etano \rightarrow Propano + Metano $2C_2H_6 \rightarrow C_3H_8 + CH_4$	$A = 3.75 \times 10^{12} \text{ 1/s}$ $E_A = 65.25 \text{ kcal/mol}$	
5	Etileno + Etano \rightarrow Propileno + Metano $C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow C_3H_6 + CH_4$	$A = 7.083 \times 10^{13} \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\text{/s}$ $E_A = 65.25 \text{ kcal/mol}$	
6	Propane \rightarrow Propileno + H_2 $C_3H_8 \leftrightarrow C_3H_6 + H_2$	$A = 5.888 \times 10^{10} \text{ 1/s}$ $E_A = 51.29 \text{ kcal/mol}$	$A = 1.8655 \times 10^1$ $B = -1.8407 \times 10^4$ $C = -3.5277 \times 10^{-3}$
7	Propane \rightarrow Etileno + Metano $C_3H_8 \rightarrow C_2H_4 + CH_4$	$A = 4.692 \times 10^{10} \text{ 1/s}$ $E_A = 50.60 \text{ kcal/mol}$	
8	Propane + Etileno \rightarrow Etano + Propileno $C_3H_8 + C_2H_4 \rightarrow C_2H_6 + C_3H_6$	$A = 2.536 \times 10^{13} \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\text{/s}$ $E_A = 59.06 \text{ kcal/mol}$	
9	2Propileno \rightarrow 3Etileno $2C_3H_6 \rightarrow 3C_2H_4$	$A = 1.514 \times 10^{11} \text{ 1/s}$ $E_A = 55.80 \text{ kcal/mol}$	
10	2Propileno + 1.5 $H_2 \rightarrow \frac{1}{2}$ Benceno + 3Metano $2C_3H_6 + 1.5H_2 \rightarrow 0.5C_6H_6 + 3CH_4$	$A = 1.423 \times 10^9 \text{ 1/s}$ $E_A = 45.50 \text{ kcal/mol}$	
11	Propileno + Etano \rightarrow 1-Buteno + Metano $C_3H_6 + C_2H_6 \rightarrow C_4H_8 + CH_4$	$A = 1.0 \times 10^{14} \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\text{/s}$ $E_A = 60.01 \text{ kcal/mol}$	
12	n-Butano \rightarrow Propileno + Metano $C_4H_{10} \rightarrow C_3H_6 + CH_4$	$A = 7.0 \times 10^{13} \text{ 1/s}$ $E_A = 59.64 \text{ kcal/mol}$	
13	n-Butano \rightarrow 2Etileno + H_2 $C_4H_{10} \rightarrow 2C_2H_4 + H_2$	$A = 7.0 \times 10^{14} \text{ 1/s}$ $E_A = 70.68 \text{ kcal/mol}$	

Nota: 1.- La reacción 10 es de primer orden solo con respecto al propileno, se agregó el hidrógeno para ajustar correctamente el balance de materia (en el trabajo de Sundaran y Froment no se incluye el hidrógeno).

Tabla B.3 Esquema de Reacción de Cinética Molecular (Parte 2 de 2)

	Reacción	Constantes de la Ecuación de Arrhenius	Parámetros de la constante K de equilibrio
14	n - Butano \rightarrow Etileno + Etano $C_4H_{10} \rightarrow C_2H_4 + C_2H_6$	$A = 4.099 \times 10^{12} \text{ 1/s}$ $E_A = 61.31 \text{ kcal/mol}$	
15	n - Butano \leftrightarrow 1 - Buteno + H_2 $C_4H_{10} \leftrightarrow C_4H_8 + H_2$	$A = 1.637 \times 10^{12} \text{ 1/s}$ $E_A = 62.36 \text{ kcal/mol}$	$A = 1.14284 \times 10^1$ $B = -1.5128 \times 10^4$
16	1 - Buteno $\rightarrow \frac{2}{3}$ Benceno + $2H_2$ $C_4H_8 \rightarrow 0.666C_6H_6 + 2H_2$	$A = 7.685 \times 10^6 \text{ 1/s}$ $E_A = 29.84 \text{ kcal/mol}$	
17	iso - Butano \leftrightarrow iso - Buteno + H_2 $C_4H_{10} \leftrightarrow C_4H_8 + H_2$	$A = 3.046 \times 10^{11} \text{ 1/s}$ $E_A = 54.40 \text{ kcal/mol}$	$A = 1.16172 \times 10^1$ $B = 1.3844 \times 10^4$
18	iso - Butano \rightarrow Propileno + Metano $C_4H_{10} \rightarrow C_3H_6 + CH_4$	$A = 5.0 \times 10^{11} \text{ 1/s}$ $E_A = 54.43 \text{ kcal/mol}$	
19	iso - Butano + Etileno \rightarrow 2 - Buteno + Etano $C_4H_{10} + C_2H_4 \rightarrow C_4H_8 + C_2H_6$	$A = 7.32 \times 10^8 \text{ L.mol/s}$ $E_A = 30 \text{ 24 kcal/mol}$	
20	iso - Buteno \rightarrow M - Acetileno + Metano $C_4H_8 \rightarrow C_3H_4 + CH_4$	$A = 6.374 \times 10^{15} \text{ 1/s}$ $E_A = 74 \text{ kcal/mol}$	
21	2 - Buteno $\rightarrow \frac{2}{3}$ Benceno + $2H_2$ $C_4H_8 \rightarrow 0.666C_6H_6 + 2H_2$	$A = 2.559 \times 10^7 \text{ 1/s}$ $E_A = 32.54 \text{ kcal/mol}$	
22	M - Acetileno $\rightarrow \frac{1}{2}$ Benceno + $\frac{1}{2} H_2$ $C_3H_4 \rightarrow 0.5C_6H_6 + 0.5H_2$	$A = 3 \text{ 504} \times 10^4 \text{ 1/s}$ $E_A = 14.5 \text{ kcal/mol}$	

EL MÉTODO DE SOLUCIÓN

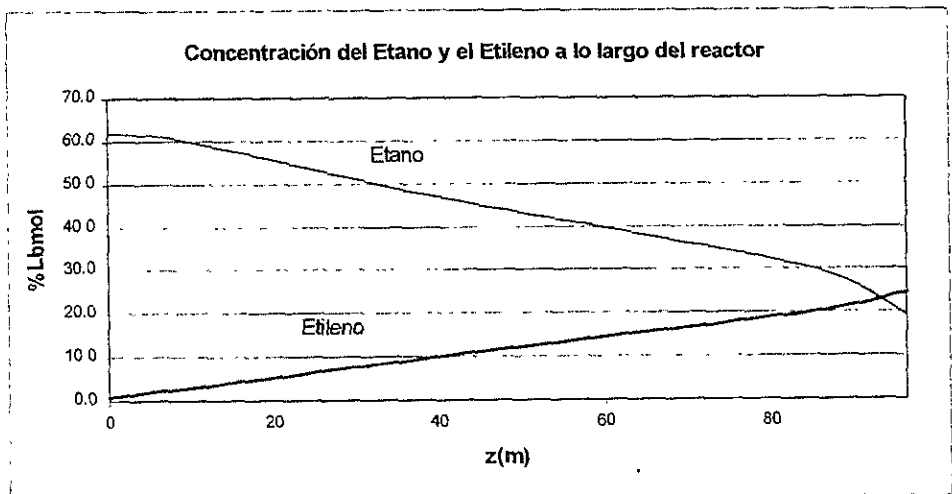
Este modelo del reactor de pirólisis se resolvió utilizando las herramientas propias del simulador, se dividió el reactor en segmentos de 10 cm (volumen de control), se fijó la caída de presión, se indicó la temperatura final del producto y se indicó el esquema de reacción. El simulador calculó la distribución de productos obtenida y la cantidad de energía necesaria.

RESULTADOS OBTENIDOS

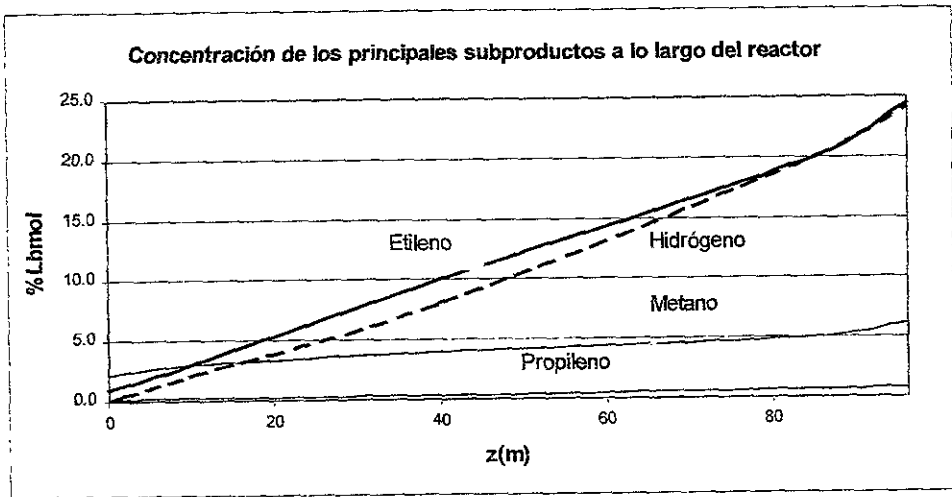
Como se muestra en el capítulo V, se reprodujeron los datos de diseño del reactor y se modificaron un poco los factores de frecuencia de las reacciones principales para lograr una mejor representación del sistema (reacciones 1, 4, 5, 6 y 7). Se modificaron los factores de frecuencia por que se encontró que en esquemas de pirólisis propuestos en la literatura, estos varían mucho de esquema en esquema y no así la energía de activación.

La modificación realizada nos permitió reproducir la distribución de los productos, el balance de materia y el balance de energía con una diferencia máxima de 5%, los detalles de los resultados se muestran en las tablas 5.3, 5.4 y 5.5; más detalles acerca de los resultados se muestran en el capítulo VI. A continuación se muestra el perfil de composiciones obtenidas a lo largo del reactor.

Gráfica B.1 Concentración del Etano y el Etileno a lo largo del reactor.



Gráfica B.2 Concentración de los principales subproductos a lo largo del reactor



ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El modelo desarrollado para representar el reactor de pirólisis es un modelo muy sencillo que simplemente reproduce las condiciones de diseño del reactor ya que está basado en dos suposiciones muy importantes:

- Suponer un perfil de temperatura lineal
- Suponer la caída de presión

Estas suposiciones limitan mucho la utilidad del modelo; sin embargo, el generar un modelo robusto estaba fuera de los objetivos del presente trabajo y el presente modelo puede reproducir los datos de diseño aceptablemente. El presente trabajo se puede mejorar haciendo más robusto el modelo del reactor, las mejores serían en el siguiente orden...

1. Calcular un Perfil de Temperatura (utilizando un perfil de flux de calor).
2. Calcular la caída de presión.
3. Utilizar un modelo de radicales libres para la cinética de Pirólisis.

Los servicios requeridos se muestran en la tabla C.2

Tabla C.2 Servicios requeridos en la columna deetanizadora

Servicio de Condensador (MMBtu/h) :	3.99
Servicio de Rehervidor (MMBtu/h):	14.95

En este breve estudio paramétrico mostraremos el efecto que tiene la variación de la temperatura de la corriente de alimentación en los servicios de condensador y rehervidor si mantenemos las siguientes variables:

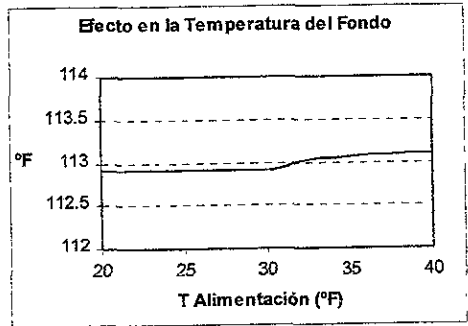
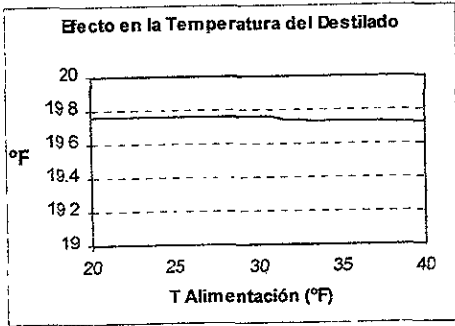
- Calidad de productos obtenidos (flujo y composición).
- Presión en las etapas de la columna.

Para realizar la simulación se utilizó el esquema de simulación generado; esto es, se usaron las mismas especificaciones de cálculo y se tuvo como punto de partida los datos obtenidos por el simulador al representar las condiciones de diseño.

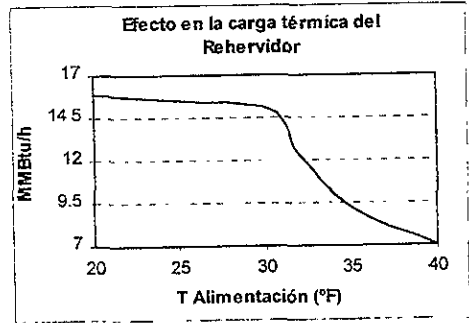
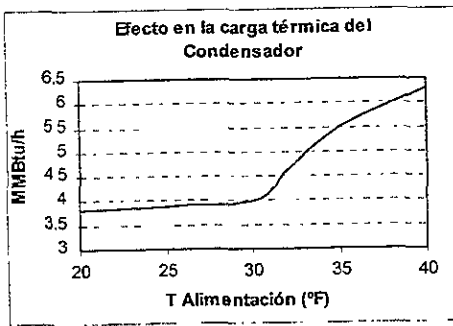
RESULTADOS OBTENIDOS

Se procedió a variar la temperatura de la corriente de alimentación en el intervalo 20-40°F. Se especificó la calidad de los productos obtenidos (la recuperación de etano en el destilado y propileno en los fondos) y se determinó la demanda de servicios de calentamiento y enfriamiento (rehervidor y condensador). A continuación se muestran gráficamente los resultados obtenidos

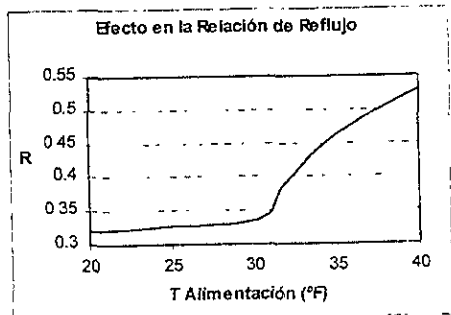
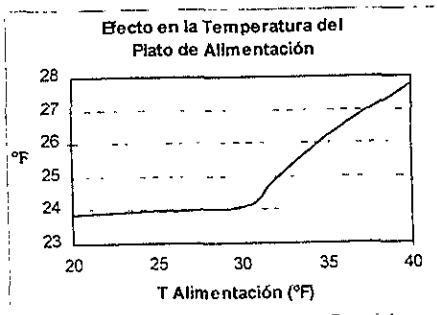
Serie de Gráficas C.1 Efectos en la temperatura de los productos.



Serie de Gráficas C.2 Efectos en las cargas térmicas de los servicios.



Serie de Gráficas C.3 Efectos en la temperatura del plato 9 y la relación de reflujo.



APÉNDICE C

Breve Estudio Paramétrico

El valor de un esquema de simulación de una planta química está determinado por lo que podemos hacer con él. A continuación se muestra un breve estudio paramétrico cuyo objetivo es mostrar de una manera simple la utilidad del esquema de simulación generado.

BASES DEL ESTUDIO

La torre deetanizadora es una columna de destilación de 38 etapas, con un rehervidor parcial y un condensador parcial. La alimentación se encuentra en fase líquida y entra en la etapa 9, la función de esta torre es separa la alimentación en dos corrientes; una rica en etileno y etano (el destilado) y otra que contiene los productos pesados (en los fondos). En la tabla C.1 se muestran las características de estas corrientes.

Tabla C.1 Características de la Alimentación y los Productos formados.

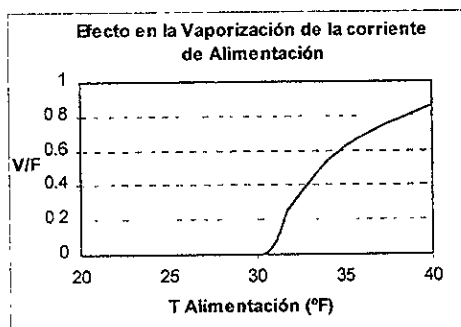
	Nombre	Alimentación	Fondos	Destilado
	FLUJO (LbMOL/HR)	3561.785384	162.001727	3399.77982
	T (F)	30.3	112.9	19.8
	P (PSIG)	445.0	395.0	385.0
	Componente (LbMOL/HR)			
1	Hidrógeno	0.0	0.0	0.0
2	Metano	0.6	0.0	0.6
3	Acetileno	0.0	0.0	0.0
4	Etileno	1960.3	0.0	1960.3
5	Etano	1493.9	65.3	1428.5
6	Propadieno	0.0	0.0	0.0
7	Metilacetileno	0.0	0.0	0.0
8	Propileno	54.6	45.9	8.7
9	Propano	15.3	13.6	1.6
10	Butadieno	2.4	2.4	0.0
11	Butilenos	9.2	9.2	-
12	Butanos	0.0	0.0	-
13	C5 y Pesados	25.6	25.6	-

ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

Como hemos podido ver, al variar la temperatura de alimentación a la torre de destilación; la temperatura de los productos (destilado y fondos) varía de una manera muy clara: el Destilado disminuye de temperatura y el fondo aumenta de temperatura ambos a partir de cierto punto.

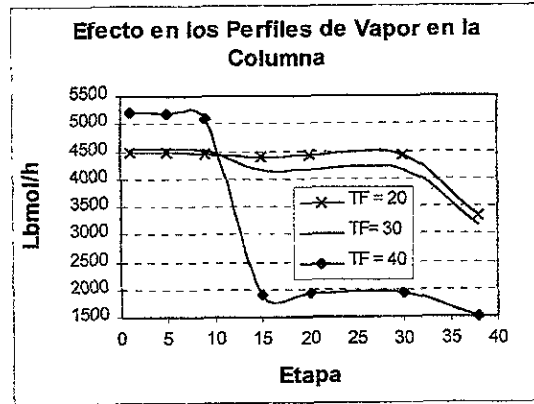
Por otra parte, podemos ver que al aumentar la temperatura de la corriente de alimentación a la torre, aumenta el calor del condensador y disminuye el calor del rehedidor; esta variación no es constante; es sutil en el intervalo 20-32°F y drástica en el intervalo 32-40°F. Para comprender este comportamiento es necesario determinar como afecta el aumento de la temperatura de la corriente de alimentación a la vaporización de la misma corriente. En la gráfica C.4 podemos ver que la corriente comienza a vaporizarse precisamente a la temperatura de 32°F.

Gráficas C.4 Efecto de la temperatura de alimentación en la vaporización de la corriente.

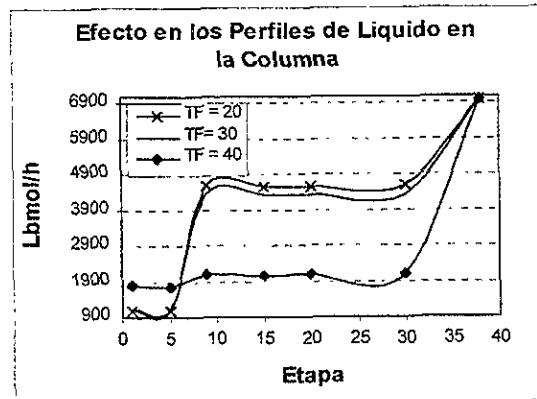


Al introducir vapor en la alimentación de la torre, aumentamos la cantidad de energía que introducimos al sistema y por otra parte modificamos los flujos de líquido y vapor a través de toda la torre (véase la gráfica C.5); se aumenta el flujo de vapor en las etapas superiores y se disminuye en las etapas posteriores (a la alimentación); esta variación afecta directamente a la relación de reflujo que maneja la torre; puede verse que esta variable tiene un comportamiento idéntico a la vaporización de la alimentación.

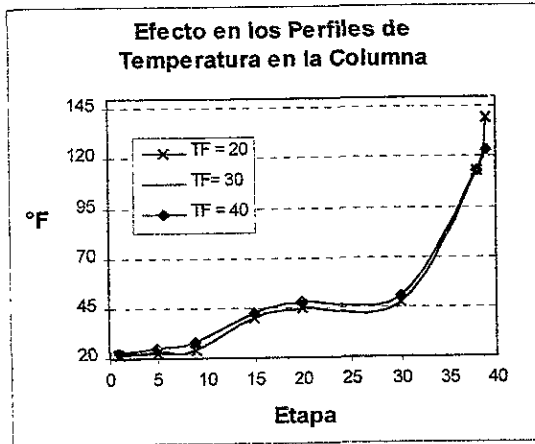
Gráficas C.5 Efecto en el perfil de vapor dentro de la columna (TF: Temperatura de la Alimentación).



Gráficas C.6 Efecto en el perfil de liquido dentro de la columna (TF: Temperatura de la Alimentación).



Gráficas C.7 Efecto en el perfil de Temperatura dentro de la columna (TF: Temperatura de la Alimentación).



CONCLUSIONES

El presente estudio ha sido un breve estudio paramétrico cuyo único objetivo es demostrar la utilidad del Esquema de Simulación generado en el presente trabajo. Para realizar un estudio paramétrico más sólido tendríamos que analizar la variación de flujos y composiciones a lo largo de toda la torre y si se tiene por objetivo generar una propuesta de operación se tendría que estudiar el impacto de las modificaciones propuestas sobre los sistemas de refrigeración y demás secciones de la planta.

En este breve estudio ha quedado claro que las consecuencias de modificar la temperatura de la corriente de alimentación a una torre de destilación, no es un asunto trivial que pueda tratarse con reglas de dedo. La destilación es una operación unitaria muy compleja que necesita abordarse con las herramientas adecuadas.

Este breve estudio es una demostración de lo que puede realizarse con un Esquema de Simulación. Si en la Planta de Etileno del Complejo Petroquímico Pajaritos se tuviera la necesidad de procesar otra materia prima muy diferente a la indicada en las condiciones de diseño (con diferencias razonables) y se quisiera determinar cuáles son las condiciones apropiadas (no precisamente óptimas), se podrían realizar pruebas en campo (in situ) para

determinarlas. Esta alternativa es muy costosa ya que mientras se consiguen los resultados deseados es necesario parar la producción y tratar los productos obtenidos que no cumplen con las especificaciones buscadas; por otra parte, el tiempo que toma realizar una prueba de este tipo puede ser incluso de varios días.

El hacer uso de un Esquema de Simulación, nos permite abordar este problema desde un punto de vista simplificado y con una rapidez sorprendente. Aunque es muy discutible el hecho de llevar a la práctica los resultados obtenidos en una simulación; esta por demás decir que tan valiosos pueden ser los resultados obtenidos.