

TRABAJO FINAL DE SIMULACIÓN DE PROCESOS

Estructura:

- 1. Portada**
- 2. Descripción breve del proceso a simular, con un diagrama de bloques y/o proceso**
- 3. Pasos en la realización de la simulación, indicando los datos, condiciones y especificaciones de entrada de las corrientes y equipos, selección de la termodinámica, componentes involucrados, entre otros, realizando para ello una interfaz gráfica.**
- 4. Resultados Obtenidos por equipo simulado**

Ejemplo.

PASO 2. Descripción breve del proceso a simular, con un diagrama de bloques y/o proceso

Planta de óxido de etileno y etilenglicoles

La planta en estudio se encuentra dividida en siete secciones principales y las secciones de servicios. La primera es la sección de reacción para producir óxido de etileno (EO). La segunda es la remoción de dióxido de carbono (CO_2) y agua, la tercera es la purificación de H_2O y EO de impurezas como CO_2 , aldehídos, etano, entre otros. En la cuarta sección se purifica el EO que es vendido a OXITENO (antiguamente ARCH) hasta un 99% de pureza con menos de 0,5% de agua. En la quinta reacciona el EO con agua para producir glicoles y se pasa por una serie de evaporadores para disminuir el contenido de agua. La sexta sección es la de purificación de mono etilenglicol (MEG) y la séptima sección se purifica el di etilenglicol (DEG) y el tri etilenglicol (TEG).

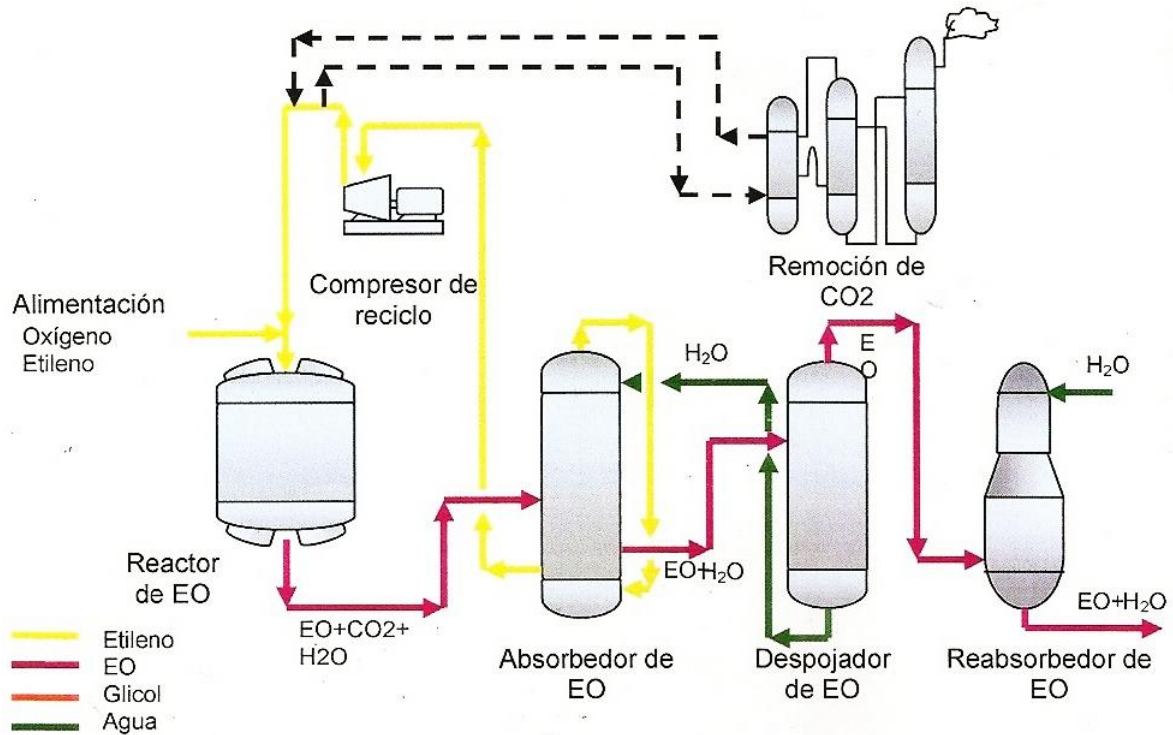


Figura 1. Diagrama ilustrativo del proceso productivo de PRALCA

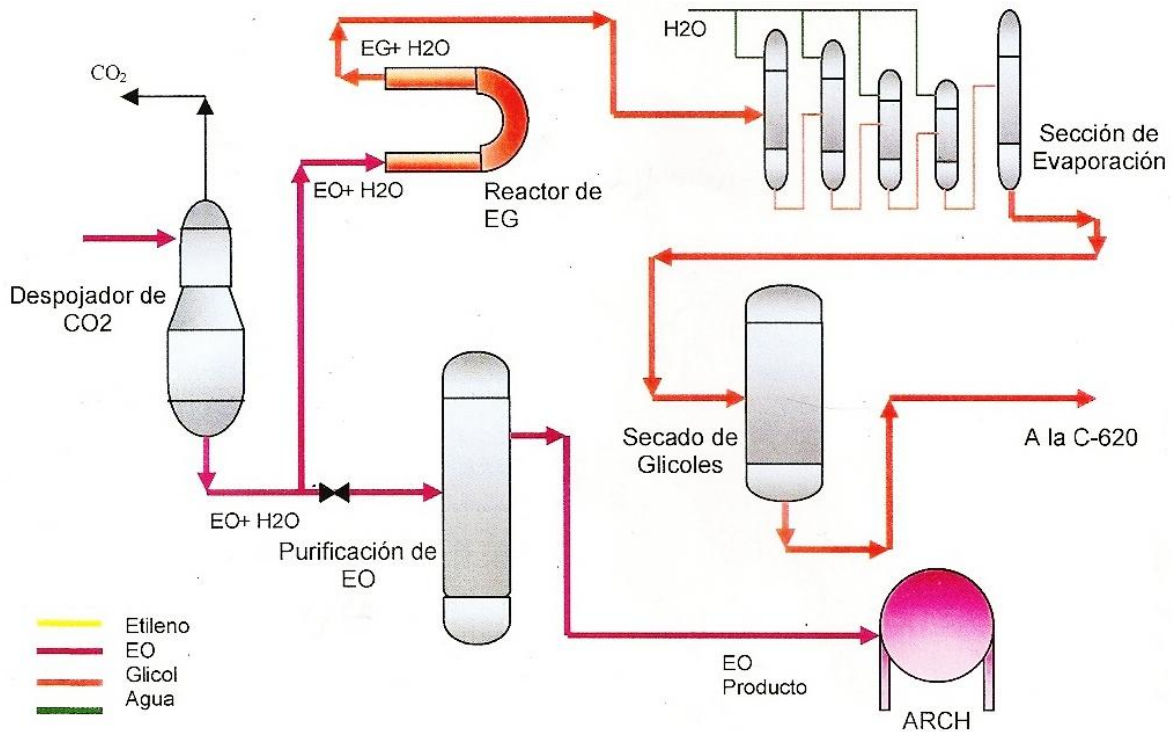


Figura 2. Diagrama ilustrativo del proceso productivo de PRALCA

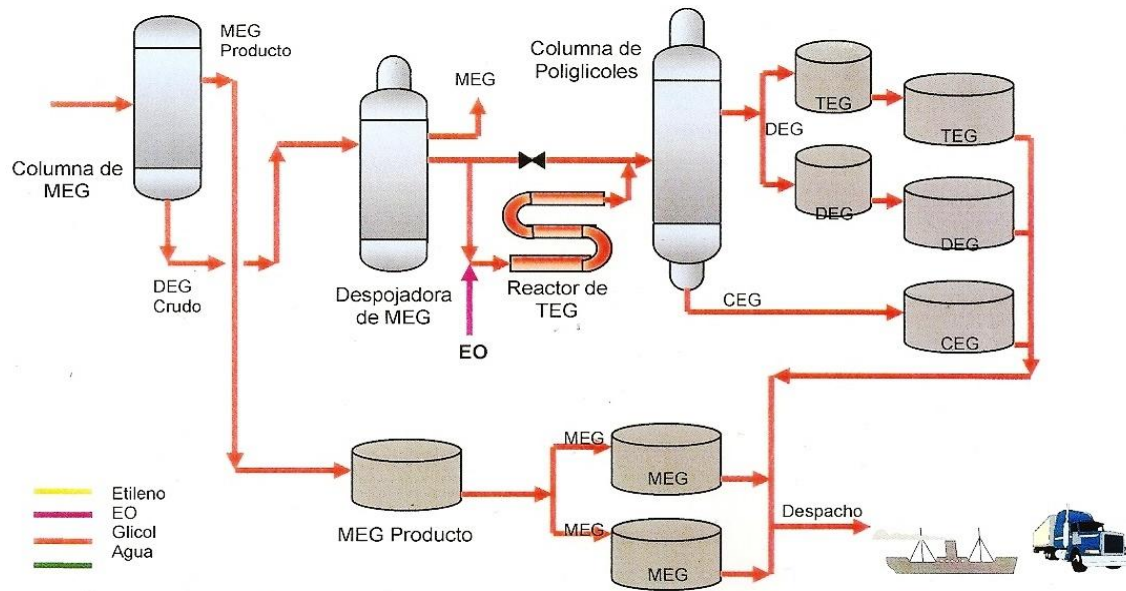
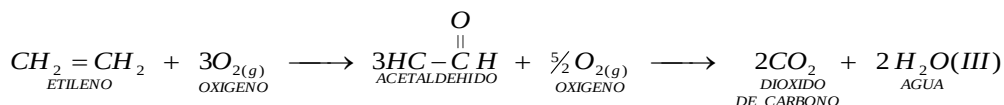
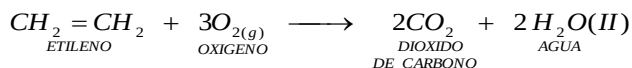


Figura 3. Diagrama ilustrativo del proceso productivo de PRALCA

La primera sección (sección 100) está constituida principalmente por un reactor de EO el cual tiene 8800 tubos en los cuales se encuentra empacado el catalizador a base de plata. La mezcla de alimentación constituida por oxígeno y etileno pasa a través de dichos tubos mientras que por el lado de la carcasa fluye agua de enfriamiento con dos propósitos: retirar calor ya que la reacción es altamente exotérmica y generar vapor de alta presión que es utilizado aguas abajo en el proceso. La mezcla de reacción entra a 210 °C y deja el reactor a 240 °C.

La conversión alcanzada es de 9% y la selectividad de 79% de acuerdo al diseño. Aparte del catalizador se añaden pequeñas trazas de dicloroetano (EDC) que inhibe la reacción de combustión del etileno, favoreciendo la reacción de oxidación. Para disminuir la temperatura de inflamabilidad de la mezcla se utiliza metano como gas de relleno, el cual es inerte en la reacción. Las reacciones involucradas son:

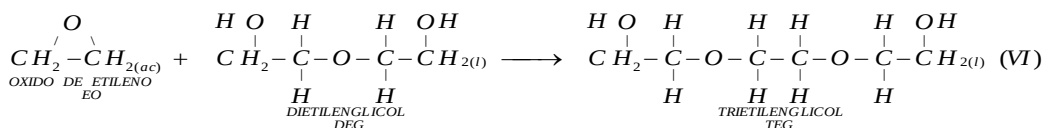
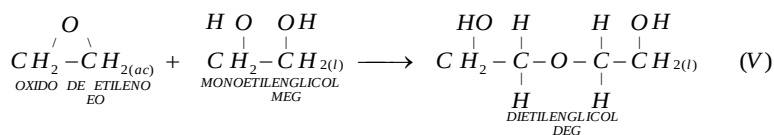
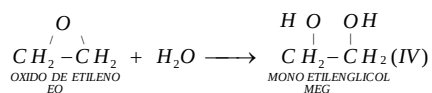


Dentro de esta sección se encuentra también una columna ab-sorbedora, en la cual el EO es absorbido con agua y de esta forma es separado de la mezcla gaseosa constituida por etileno que no reaccionó, oxígeno que no reaccionó, dióxido de carbono, metano y otras impurezas inertes de la alimentación. La mezcla gaseosa es enviada a la segunda sección (sección 200) para la remoción del dióxido de carbono y la mezcla gaseosa resultante es recirculada al reactor de EO. Por otro lado, la mezcla acuosa de EO es enviada a la tercera sección (sección 300) en donde se purifica el agua y el EO de impurezas como el dióxido de carbono, aldehídos, entre otras.

En la sección 200 se remueve dióxido de carbono desde 8% hasta 4% en la corriente de recirculación al reactor de EO, mediante la absorción de dióxido de carbono con una solución de carbonato de potasio (K_2CO_3) en una columna de platos. En una columna posterior el dióxido de carbono es regenerado y enviado a la atmósfera continuamente. En la sección 300 se encuentran tres columnas ab-sorbedoras des-sorbedoras, cuya función es eliminar las impurezas de dióxido de carbono y otros gases. El dióxido de carbono al ponerse en contacto con agua a altas temperaturas genera ácido carbónico (H_2CO_3), el cual genera problemas de corrosión en los equipos y líneas aguas abajo en el proceso, razón por la cual debe ser eliminado.

La cuarta sección (sección 400) consta de una columna de 98 platos la cual es alineada con una porción de la solución de EO para purificarlo y enviarlo a ARCH. La quinta sección (sección 500) consta principalmente de un reactor de glicoles y un tren de evaporadores. La solución de EO es alimentada al reactor de glicoles junto a agua de tal forma de obtener una relación másica 9/1 para formar MEG, DEG y TEG. Las reacciones

ocurren simultáneamente y la distribución de productos favorece al MEG que es el producto de mayor demanda. Las reacciones que tienen lugar son:



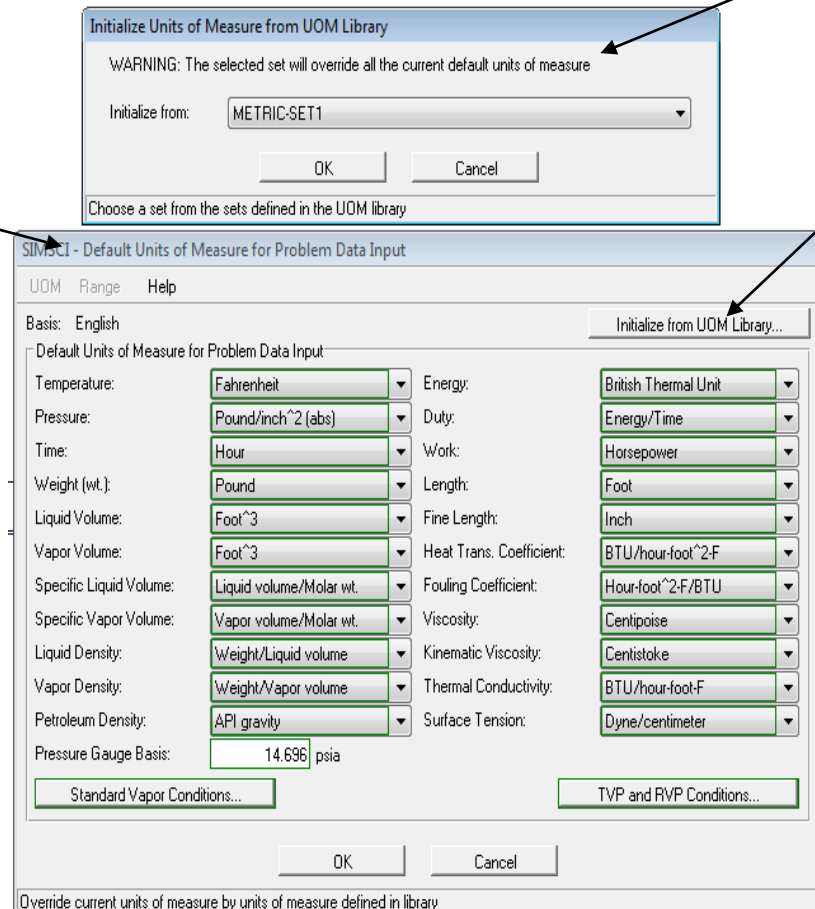
También se forma un producto más pesado denominado poli etilenglicol (PEG) con importante valor comercial. El contenido de agua es reducido posteriormente mediante un tren de evaporadores. En la sexta sección (sección 600) se encuentran tres columnas de destilación que purifican el MEG a 99% y el DEG crudo es enviado a la séptima sección (sección 700) en donde se separa el DEG del TEG y PEG en forma continúa durante 18 ó 19 días. La mezcla de TEG y PEG es almacenada en un tanque de TEG crudo y al transcurrir los 18 ó 19 días se cambia el modo de operación de la columna y durante 1 día es separado el TEG.

Paso 3. SIMULACIÓN DEL PROCESO EN ESTUDIO:

A continuación se presentan los pasos a realizar para simular el reactor flujo piston involucrado en el proceso en estudio:

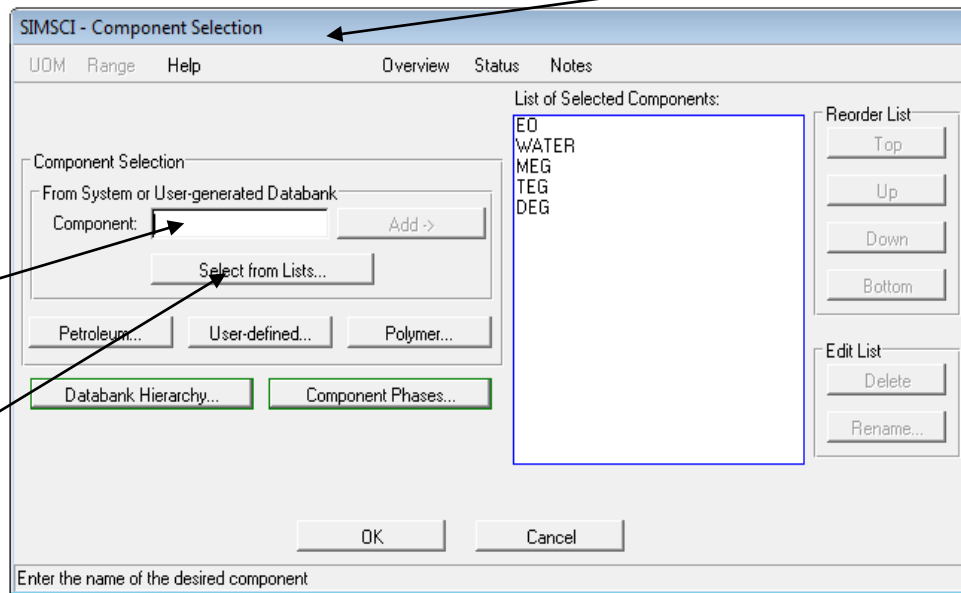
INTRODUCCIÓN DEL SISTEMA DE UNIDADES

Para la construcción de este diseño de simulación computarizada, se selecciona un sistema de unidades. Indique donde se realiza la acción correspondiente en el programa PRO II. En este caso el sistema a utilizar es el sistema métrico (Ubicado en Units of Measure)



INTRODUCCIÓN DE LOS COMPUESTOS

En la base de datos de compuestos del simulador PRO II se seleccionaron los componentes del proceso: óxido de etileno, agua, mono etilenglicol, di etilenglicol y tri etilenglicol, ya que son los componentes involucrados en las reacciones que se llevan a cabo en el reactor de tubo pistón. Indique donde se realizan las acciones correspondientes en el programa PRO II. (**Sección: Component Selection**)



Component Selection - List/Search

UDM Range Help

Component Family:

- Most Commonly Used
- Hydrocarbon Lightends
- All Components - PROCESS Bank
- All Components - SIMSCI Bank
- Acids
- Additional Electrolyte Components

Sort/Search by:

- ☒ Full Name
- ☐ SIMSCI Name/Alias
- ☐ Chemical Formula

Match:

- ☒ Initial String
- ☐ Embedded Substring

Search String: Search

Component Full Name:

SIMSCI Name/Alias:

Formula:

Add Components Remove Components

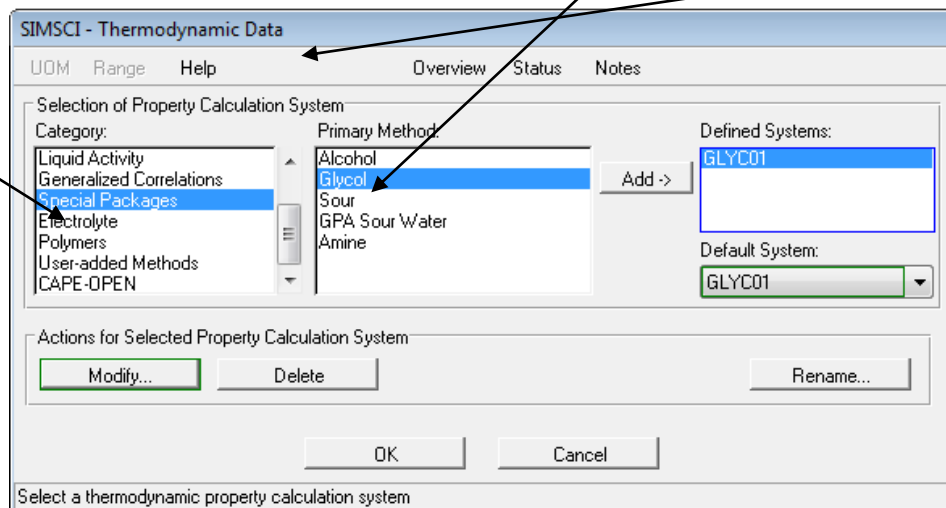
Additions to Component List:

OK Cancel

Exit the window after saving all data

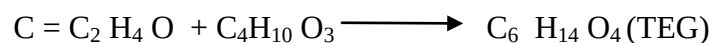
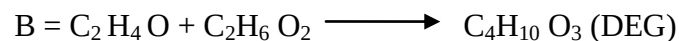
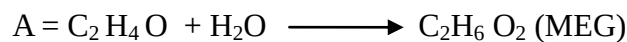
MODELO TERMODINÁMICO UTILIZADO

Entre los modelos termodinámicos se seleccionó el paquete especial denominado glicoles, para el cálculo de las propiedades termodinámicas de los compuestos involucrados. Indique donde se realiza la acción correspondiente en el programa PRO II. (Sección: Thermodynamic Data)



REACCIONES INVOLUCRADAS

En la ventana de reacciones del simulador, se introdujeron las reacciones necesarias y sus coeficientes estequiométricos respectivos, observando que el óxido de etileno participa en cada una de las reacciones. Se puede asumir inicialmente que este es el reactivo límite y establecer que las reacciones son de primer orden con respecto a cada componente. Indique donde se realizan las acciones correspondientes en el programa PRO II. (Sección: Reacción Data)



SIMSCI - Reaction Data

UOM Range Help Overview Status

	Reaction Set Name	Description	
Cut			
Insert	1 REACCION		Enter Data...
Reset	2		Enter Data...
	3		Enter Data...
	4		Enter Data...
	5		Enter Data...

OK Cancel

Enter a unique name for the reaction set

Reaction Data - Reaction Definitions

UOM Range Help

Reaction Set: REACCION

Description:

Kinetic Rate Calculation

Calculation Method: Power Law Procedure Name:

Data Entry Legend
Heat of Reaction - H...
Equilibrium Data - E...
Kinetic Data - K...

	Name	Definition			
Cut					
Insert	1 MEG	Reactants = Products	H...	E...	K...
Reset	2 DEG	Reactants = Products	H...	E...	K...
	3 TEG	Reactants = Products	H...	E...	K...
	4	Reactants = Products	H...	E...	K...
	5	Reactants = Products	H...	E...	K...
	6	Reactants = Products	H...	E...	K...

OK Cancel

Enter a unique name for the reaction

Reaction Data - Reaction Components

UOM Range Help

Reaction Name: DEG

Reactant Stoichiometry

EO	C2H4O	
WATER	H2O	
MEG	C2H6O2	
TEG	C6H14O4	
DEG	C4H10O3	

Product Stoichiometry

EO	C2H4O	
WATER	H2O	
MEG	C2H6O2	
TEG	C6H14O4	
DEG	C4H10O3	

Stoichiometric Balance:
Reactant Sum: ??? **does not equal** Product Sum: ??? within 0.1% relative tolerance.

Reaction Definition

☒ Use Formula

☐ Use Name

OK Cancel

Enter the reactant stoichiometric coefficient

Reaction Data - Reaction Definitions

UOM Range Help

Reaction Set: REACCION

Description:

Data Entry Legend
Heat of Reaction - H...
Equilibrium Data - E...
Kinetic Data - K...

Kinetic Rate Calculation
Calculation Method: Power Law Procedure Name:

Cut	Name	Definition	H...	E...	K...
Insert					
Reset	1	MEG	C2H4O + H2O = C2H6O2	H...	E... K...
	2	DEG	C2H4O + H2O = C4H10O3	H...	E... K...
	3	TEG	C2H4O + C4H10O3 = C6H14O4	H...	E... K...
	4		Reactants = Products	H...	E... K...
	5		Reactants = Products	H...	E... K...
	6		Reactants = Products	H...	E... K...

OK Cancel

Select to define reaction stoichiometry

Reaction Data - Kinetic Reaction Data

UOM Range Help

Reaction Set: REACCION Reaction Name: MEG

Reaction: C2H4O + H2O = C2H6O2

☒ Define Kinetic Data

Kinetic Data

Power Law: **Rate = A . exp [-E/RT] . Tⁿ . Π [Activity]^{Order}**

Pre-exponential Factor (A): 1.0000

Activation Energy (E): x10³ BTU/lb-mol

Temperature Exponent (n): 0.00000

Units:

Temperature: E

Weight: lb

Volume: ft³

Pressure: psia

Time: hr

Reaction Order and Activity Basis:

Default Phase: Liquid

Liquid Activity Basis: Molar Concentration

Vapor Activity Basis: Molar Concentration

Reaction Order & Activity Phase...

OK Cancel

Check to define kinetic data

Nota: Indiquen los valores que ingresarán en una tabla. Podrían colocar una tabla resumen por equipo.

Reaction Data - Reaction Order and Activity Phase

UOM Range Help

Reaction Set: REACCION

Reaction Name: MEG

Reaction: C2H4O + H2O = C2H6O2

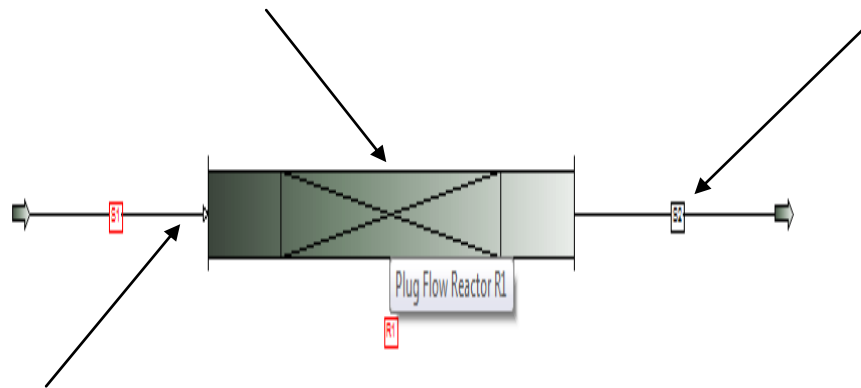
Component	Reaction Order	Activity Phase
EO	1.0000	Liquid
WATER	1.0000	Liquid
MEG	0.00000	Liquid

OK Cancel

Exit the window after saving all data

CONSTRUCCIÓN DEL DISEÑO DE SIMULACIÓN

Para la construcción del diseño de simulación de la planta, se seleccionó el reactor de flujo pistón de la paleta de operaciones unitarias del programa (PFD), para luego conectar la corriente de entrada y de salida al mismo, como se muestra en la figura del simulador PRO II. Indique donde se realizan las acciones correspondientes en el programa PRO II.



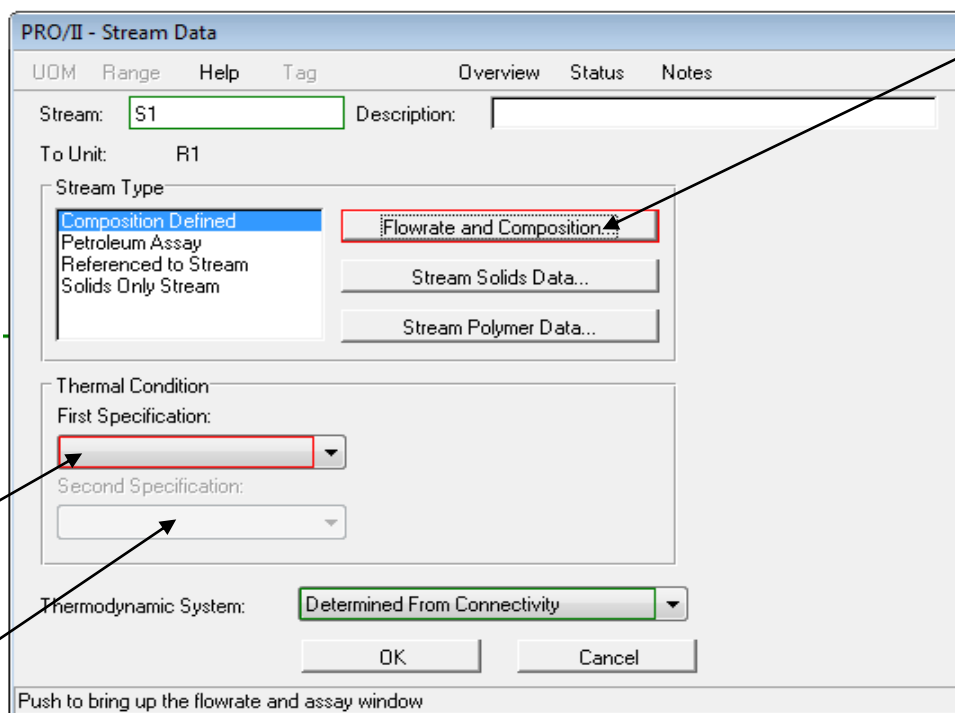


CORRIENTE DE ENTRADA

Para elaborar el diseño de simulación, se debe crear la corriente de alimentación al sistema, es por ello que se creó una corriente, definiendo parámetros de temperatura y presión, flujo y composiciones, como se especifica en la Tabla N° 2. Indique donde se realizan las acciones correspondientes en el programa PRO II.

Tabla N° 2
Información teórica de las corrientes de entrada

CORRIENTE DE ENTRADA (504)				
Temperatura	145 °C			
Presión	17,2 kg/cm2			
Componentes	FLUJO		COMPOSICIÓN	
	KG/HR	MOL/HR	WT%	MOL%
Oxido de etileno	5.991,4	136,00	9,98	4,34
Agua	5.3901,5	2992,03	89,76	95,57
Monoetilenglicol	160,9	2,59	0,27	0,08
Dietilenglicol				
Trietilenglicol				
TOTAL	60.053,8	3.130,63	100,00	100,00



PRO/II - Stream Data

UOM Range Help Tag Overview Status Notes

Stream: S1 Description:

To Unit: R1

Stream Type

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

Flowrate and Composition...

Stream Solids Data...

Stream Polymer Data...

Thermal Condition

First Specification:

Second Specification:

Thermodynamic System: Determined From Connectivity

OK Cancel

Push to bring up the flowrate and assay window

Stream Data - Flowrate and Composition

UQM Range Help Tag

Specify flowrate and composition for stream S1

Fluid Flowrate Specification

☐ Total Fluid Flowrate: lb-mol/hr

☒ Individual Component Flowrates

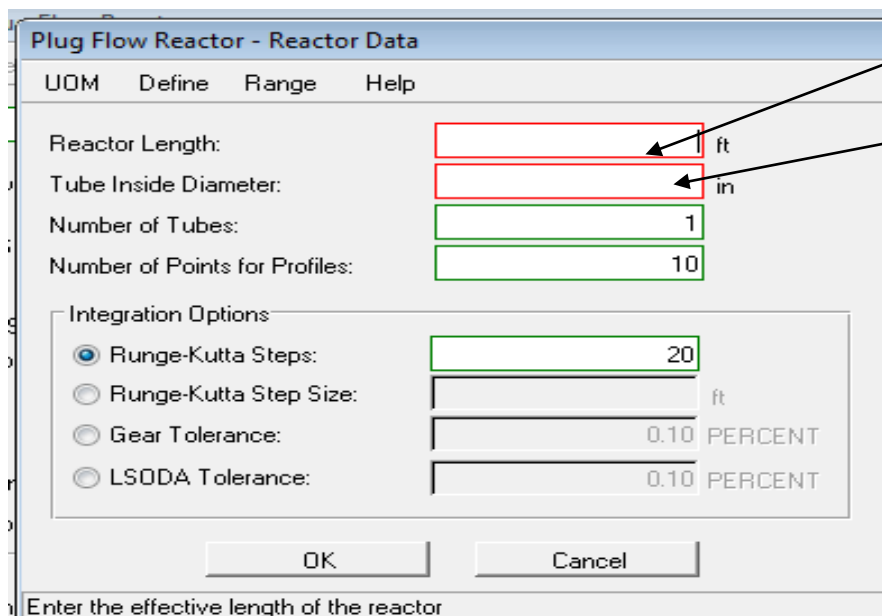
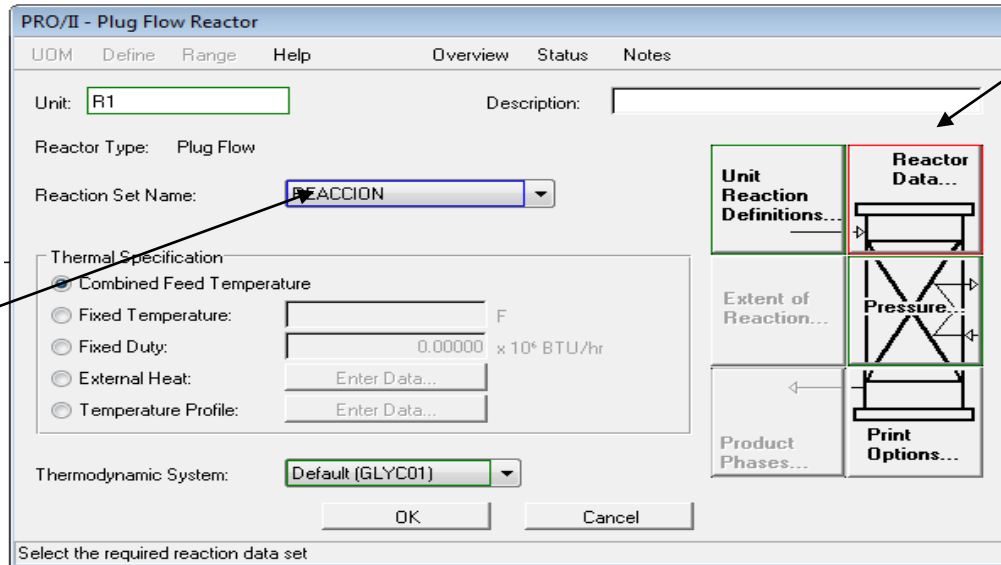
Copy	Component	Component Flowrate lb-mol/hr
Paste	EO	
	WATER	
	MEG	
	TEG	
	DEG	

Total: 0.00000 ☐ Normalize Component Flowrates
Based on Specified Fluid Flowrate

Select to supply composition as sum of individual component flowrates

UNIDAD DE OPERACIÓN: REACTOR FLUJO PISTÓN

Para definir los parámetros del reactor Flujo Pistón, pulse en la figura representativa del equipo, en el simulador PRO II. Se debe verificar y completar cada uno de los iconos. Indique donde se realizan las acciones correspondientes en el programa PRO II.



Plug Flow Reactor - Pressure

UQM Define Range Help

Reactor Type

☒ Open Pipe

☐ Packed Pipe

Pressure Specification

☒ Inlet and Outlet Pressure

☐ Pressure Profile

☐ Pressure Drop Method

☐ Packed Bed Pressure Drop

Inlet

☒ Pressure Drop Below Feed: psi

☐ Inlet Pressure: psia

Outlet

☒ Pressure Drop Below Inlet: psi

☐ Outlet Pressure: psia

Exit the window after saving all data

PRO/II - Plug Flow Reactor

UOM Define Range Help Overview Status Notes

Unit: Description:

Reactor Type: Plug Flow

Reaction Set Name:

Thermal Specification

☐ Combined Feed Temperature

☐ Fixed Temperature: F

☐ Fixed Duty: $\times 10^6$ BTU/hr

☐ External Heat:

☒ Temperature Profile:

Thermodynamic System:

OK Cancel

Push to bring up the plug flow reactor temperature profile window

Plug Flow Reactor - Temperature Profile

UOM Range Help

Location:

Cut	Location	Temperature
	ft	F
Paste	1	
Insert	2	
	3	
	4	
	5	

OK Cancel

Enter the location along the reactor length

Nota: Todas las unidades de operación deben ser especificadas mediante interfaces gráficas.

Paso 4. Resultados obtenidos de la simulación, por equipo simulado.