

Diseño Plantas Para Ingenieros Químicos

Jaime Santillana Soto

Julia Salinas de Santillana

Ing. Químicos, M.S. in Chemical Engineering

Modelamiento de Procesos



Simulación: Soporte a la Creación de Procesos

- Una vez planteado un Diagrama de Flujo de Procesos (PFD) se debe analizar los mismos para lo que se requiere solucionar los balances de materia y energía, dimensionar equipos de conversión y separación para lo que se necesita resolver problemas de equilibrio de fases y ecuaciones de transporte y ecuaciones cinéticas.
- En la actualidad existen los Simuladores de Procesos que simulan y diseñan procesos en estado estacionario.
- Entre ellos se encuentran:
 - DESIGN II. Version 9.01 (Licencia Academica)
 - CHEMCAD (Licencia Academica)
 - HYSIMS.
 - ASPEN PLUS, PRO II, etc

Simuladores de Procesos

- Una vez establecido el PDF, los simuladores ahorran gran parte del proceso del diseño del caso base.

- Numerosos Simuladores:

Design II

Chemcad es mejor para calculos de diseño calcula costos de inversion en capital fijo

Hysis. Uno de los mejores simuladores actuales

Process II, Super Pro, etc.

Deshidratacion de Gas Natural

ENERGY BALANCE

Flowsheet Node	Feed(s) btu/hr	Product(s) btu/hr	Difference btu/hr
STREAM 1	-16,853,300.00	0.00	16,853,300.00
STREAM 4	0.00	-30,841,900.00	-30,841,900.00
STREAM 5	0.00	-4,143,710.00	-4,143,710.00
STREAM 8	0.00	868.29	868.29
STREAM 13	0.00	8,417.90	8,417.90
STREAM 14	0.00	-183,481.00	-183,481.00
Total Streams	-16,853,300.00	-35,159,800.00	-18,306,500.00
FLA 1 (F-1)	-16,853,300.00	-16,853,300.00	0.00
DIS 2 (Cont)	-16,933,300.00	-35,951,400.00	-19,018,100.00
DIS 3 (Rege)	-2,868,380.00	-2,020,200.00	848,180.00
HEAEXC 4 (X-4)	-6,982,270.00	-6,982,100.00	175.12
VAL 5 (V-5)	-2,868,380.00	-2,868,380.00	0.00
HEAEXC 6 (X-6)	-35,065,600.00	-35,065,600.00	-0.13
PUM 7 (P-7)	-4,113,720.00	-4,052,070.00	61,652.00
COMSPL 8 (PHAS)	23,297.00	-175,063.00	-198,359.00
VAL 9 (V-9)	-4,937,910.00	-4,937,910.00	-0.01
FLA 10 (F-10)	-4,937,910.00	-4,937,910.00	0.00
Total Equipments	-95,537,500.00	-113,844,000.00	-18,306,500.00
Enthalpy Difference Between Streams and Equipments			0.00

Heurísticos en Síntesis de Procesos



Heurísticos en Síntesis de Procesos

© Síntesis Procesos

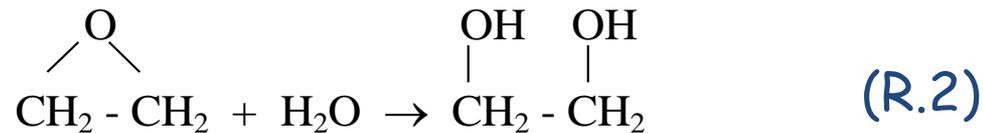
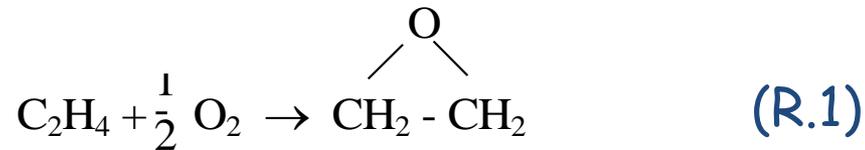
- ① Reaccion Química (elimina diferencias en tipo molecular)
 - ② Mezcla y recicló (distribuye químicos)
 - ③ Separacion (elimina diferencias en composicion)
 - ④ Cambio de Temperatura, presión y fase.
 - ⑤ Integracion Tareas (Task integration), combina tareas en operaciones unitarias
- Los Heurísticos son reglas que facilitan la seleccion y posicionamiento de operaciones unitarias en los Diagramas Proceso (PDF)
 - Son reglas empíricas y utiles pero deben ser validadas por simulaicon por ejemplo.
 - Tambien existen los métodos Algorítmicos



Materias Primas y Reacciones Químicas

Heurístico 1: Seleccione materias primas y reacciones de manera de evitar o reducir el manipuleo y almacenamiento de productos tóxicos o peligrosos

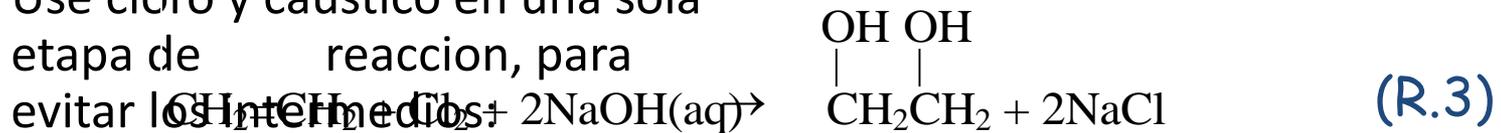
Ejemplo: Manufactura de Etilen Glycol (EG).



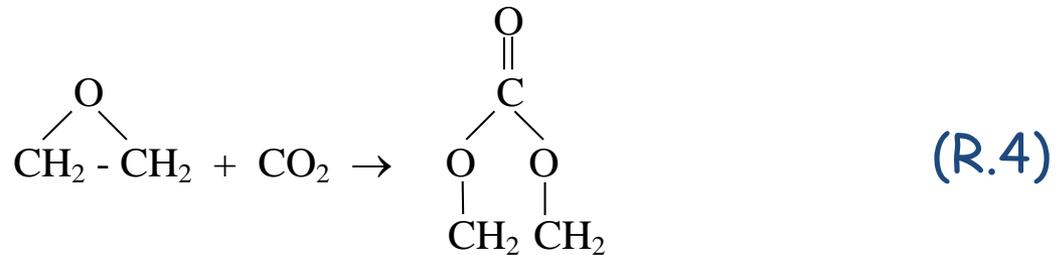
Las dos reacciones son exotérmicas, se deben controlar. Si cae agua en el tanque de óxido de etileno podría haber otro Bhopal. Se puede tener dos etapas de reacción almacenamiento intermedio.

Alternativas al proceso de 2 Etapas

- 1 Use cloro y caustico en una sola etapa de reaccion, para evitar los Intermedios



- 2 Haga reaccionar el oxido d etileno con CO2 para formar carbonato de etileno, que es un intermedio menos reactivo y puede almacenarse con seguridad, después se hidroliza, para formar el etilen glicol.



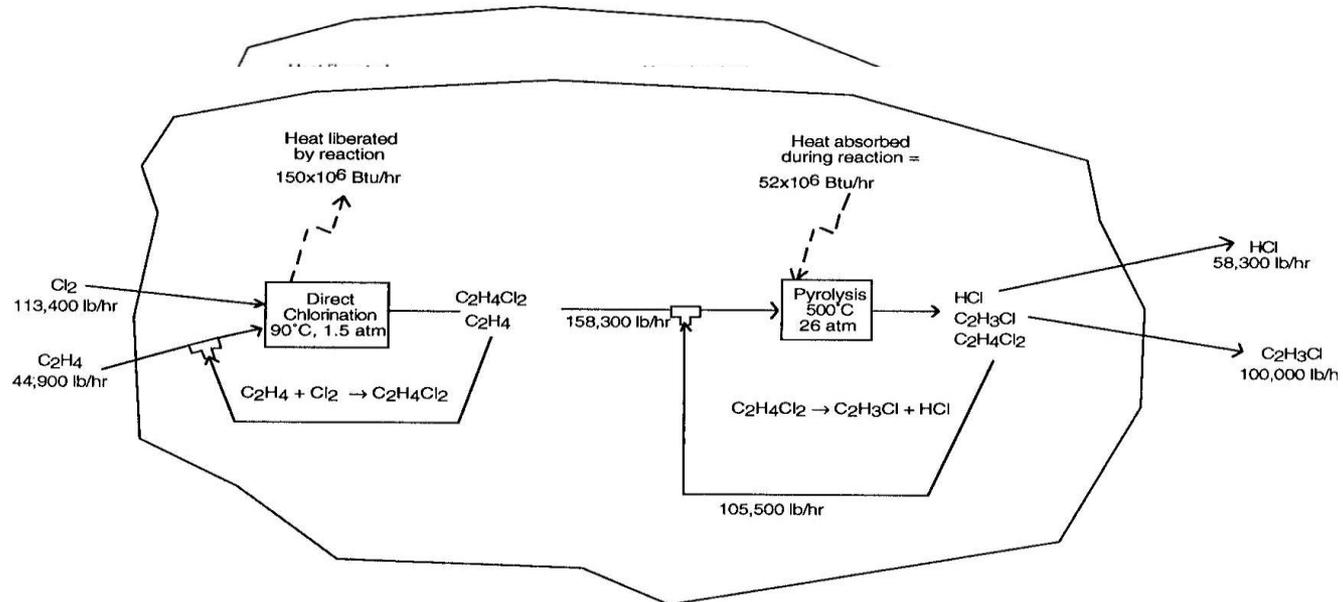


Distribución de Químicos

Heurístico 2:

Use en exceso uno de los reactantes para consumir completamente un segundo reactante valioso, tóxico o peligroso

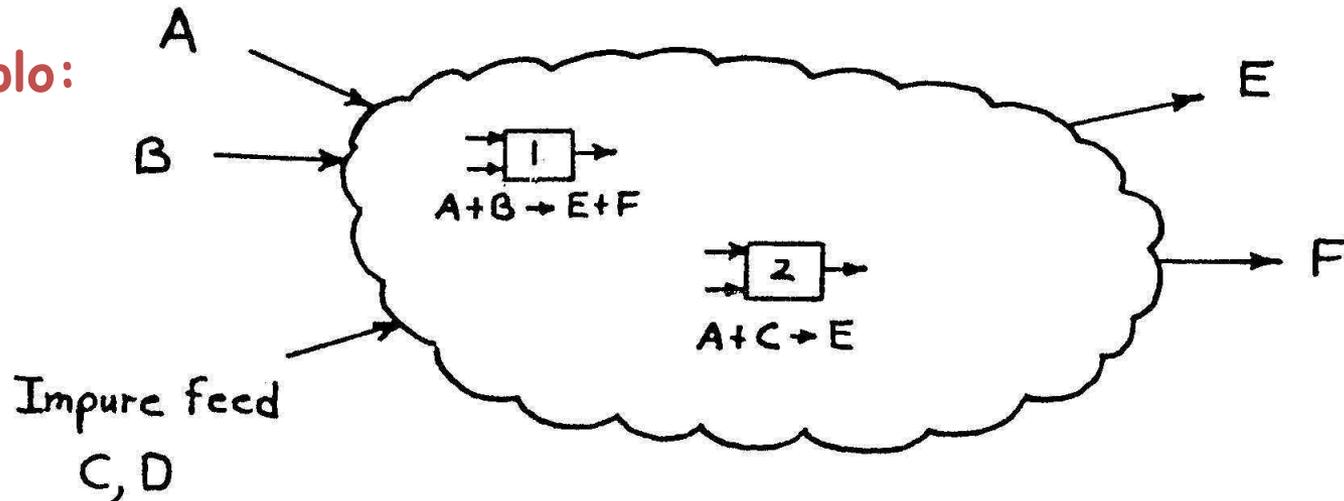
Ejemplo: Considere un exceso de etileno en la manufactura del DCE



Distribución de Químicos

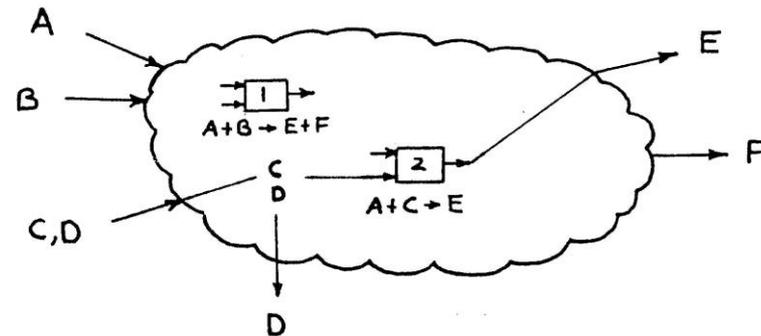
- Heurístico 3:**
- Cuando se requieren productos casi puros, elimine los inertes antes de la reacción, cuando las separaciones son fáciles o cuando el catalizador se ve afectado por el inerte.
 - No lo haga cuando deba retirar gran cantidad de calor de reacción.

Ejemplo:

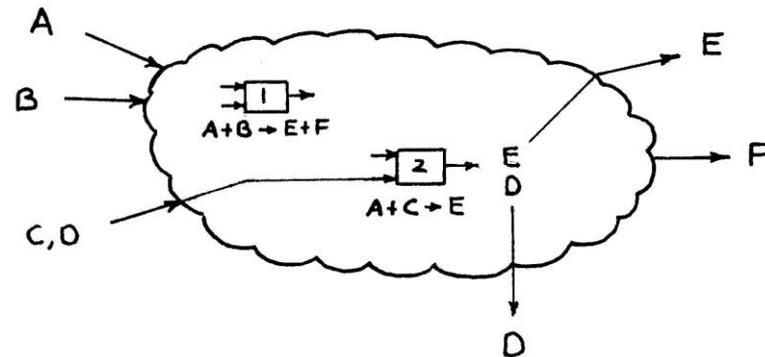


Distribución de Químicos

Decida si retira los inertes antes de la reacción



O después de la reacción...



Se debe evaluar el costo de las separaciones. Se hace evaluando las propiedades físicas en que se basan las separaciones; se requiere emplear simuladores.

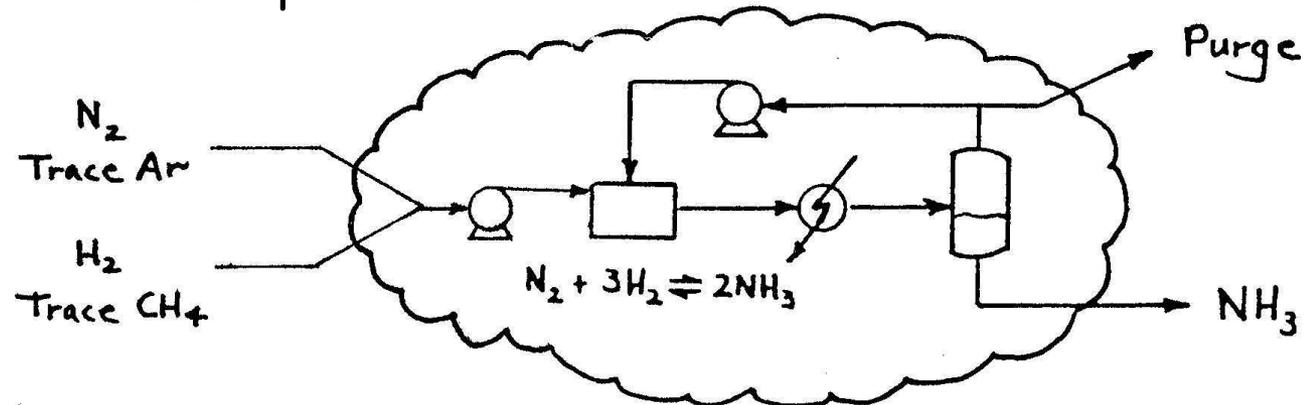
Distribución de Químicos

Heurístico 4: Coloque corrientes de purgas de vapor o líquido para dar salida a especies que

- Entran al proceso como impurezas en la carga
- Son producidas por reacciones laterales irreversibles.

Cuando las especies son trazas y/o son difíciles de separar.

Example: NH₃ Loop Sintesis.



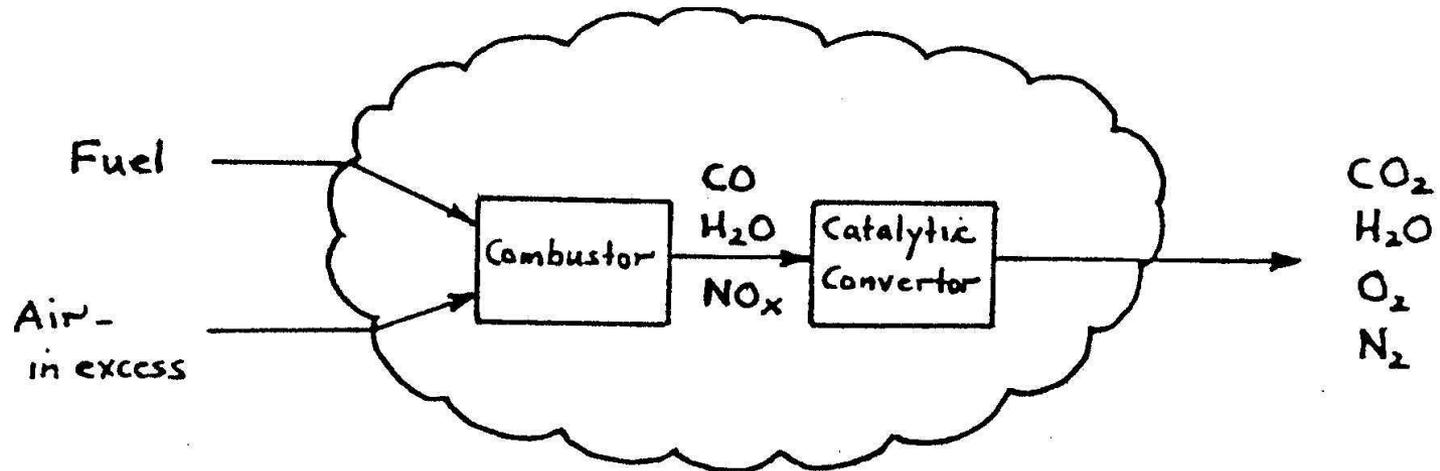
Nota: El Flujo de Purga depende de la economía

Distribución de Químicos

Heurístico 5: No purge especies valiosas o especies tóxicas o peligrosas, aun en pequeñas concentraciones.

- Use separadores para recuperar especies valiosas.
- Use reactores para eliminar especies tóxicas o peligrosas.

Ejemplo: Convertidor Catalítico en automóviles





Distribución de Químicos

Heurístico 6: Sub-productos producidos en reacciones *reversibles*, en pequeñas cantidades, normalmente ni se recuperan ni se purgan, más bien se reciclan a extinción.

A menudo pequeñas cantidades de químicos se producen en reacciones laterales. Cuando se tiene reacción irreversible, pequeñas cantidades de subproductos deben ser purgados, de lo contrario se acumularán en el proceso. Cuando la reacción es reversible, se puede lograr conversiones de equilibrio en estado estacionario reciclando productos sin retirarlo del proceso. Se dice que los sub productos indeseables se reciclan hasta la extinción.

Distribución de Químicos

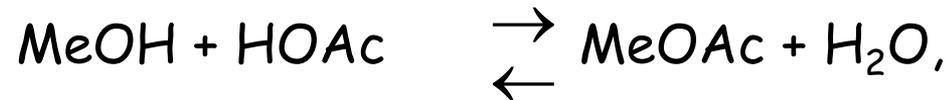
Heurístico 7: Para reacciones que compiten en serie o en paralelo, ajuste la temperatura, presión y el catalizador para obtener altos rendimientos (yields) de los productos deseados. En la distribución inicial de los químicos suponga que estas condiciones pueden ser satisfechas, obtenga data cinética y revise esta suposición antes de desarrollar el caso base.

Distribución de Químicos

Heurístico 8: Para reacciones reversibles especialmente, considere realizarlas en un dispositivo de separación capaz de retirar los productos de manera de llevar las reacciones hacia la derecha. Estos sistemas de reacción separación dan una distribución de químicos muy diferente.

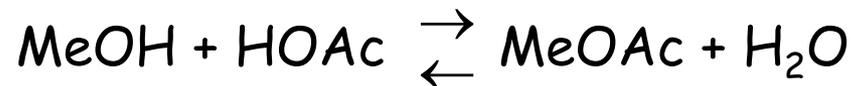
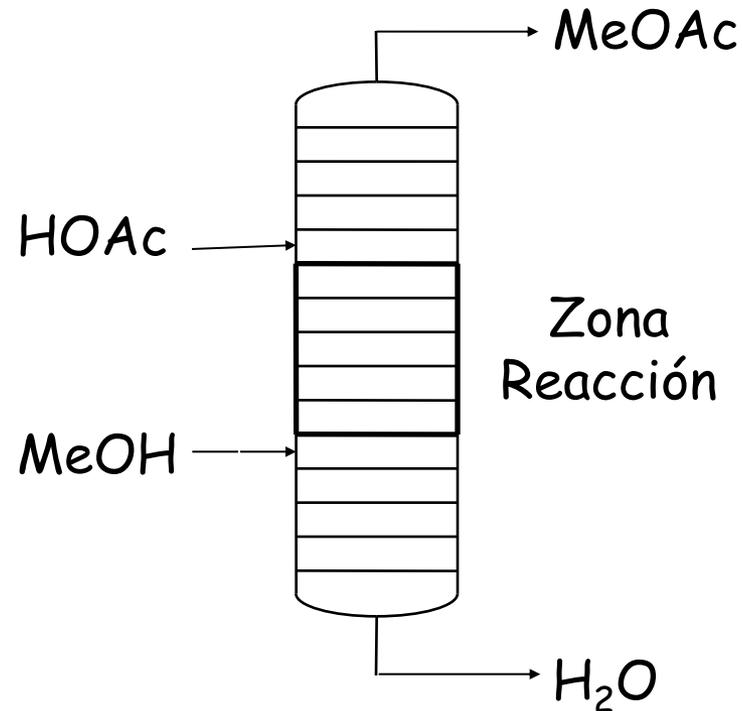
Ejemplo: Manufactura de Acetato de Etilo por Destilación Reactiva.

Conventionalmente la reacción sería:



A lo que seguiría una secuencia de columnas de destilación..

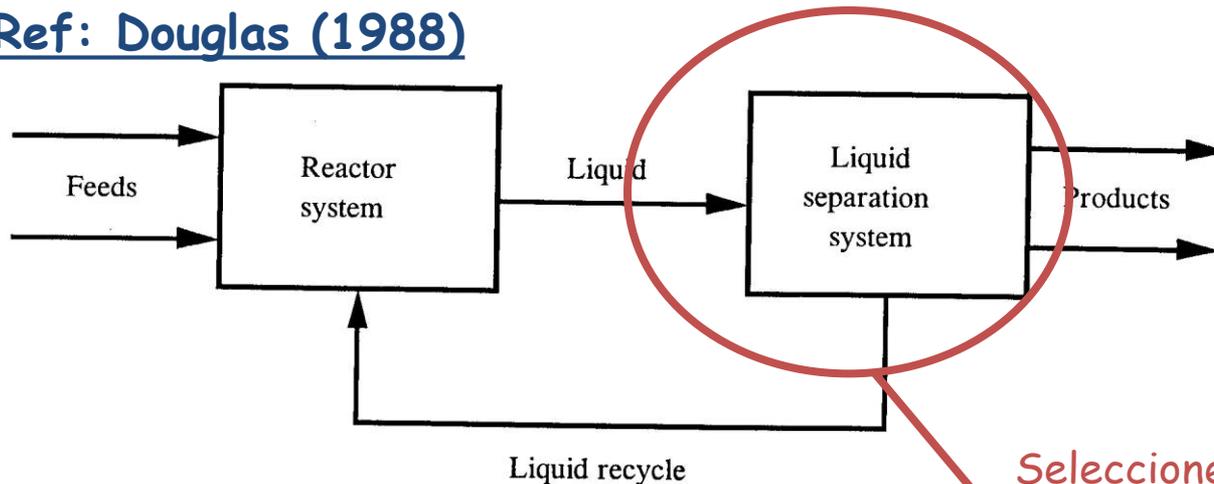
Manufactura de MeOAc por medio de Destilación Reactiva



Separaciones

Heurístico 9: Separe mezclas líquidas usando torres de destilación y de stripping, y extractores líquido-líquido, entre otras operaciones similares.

Ref: Douglas (1988)

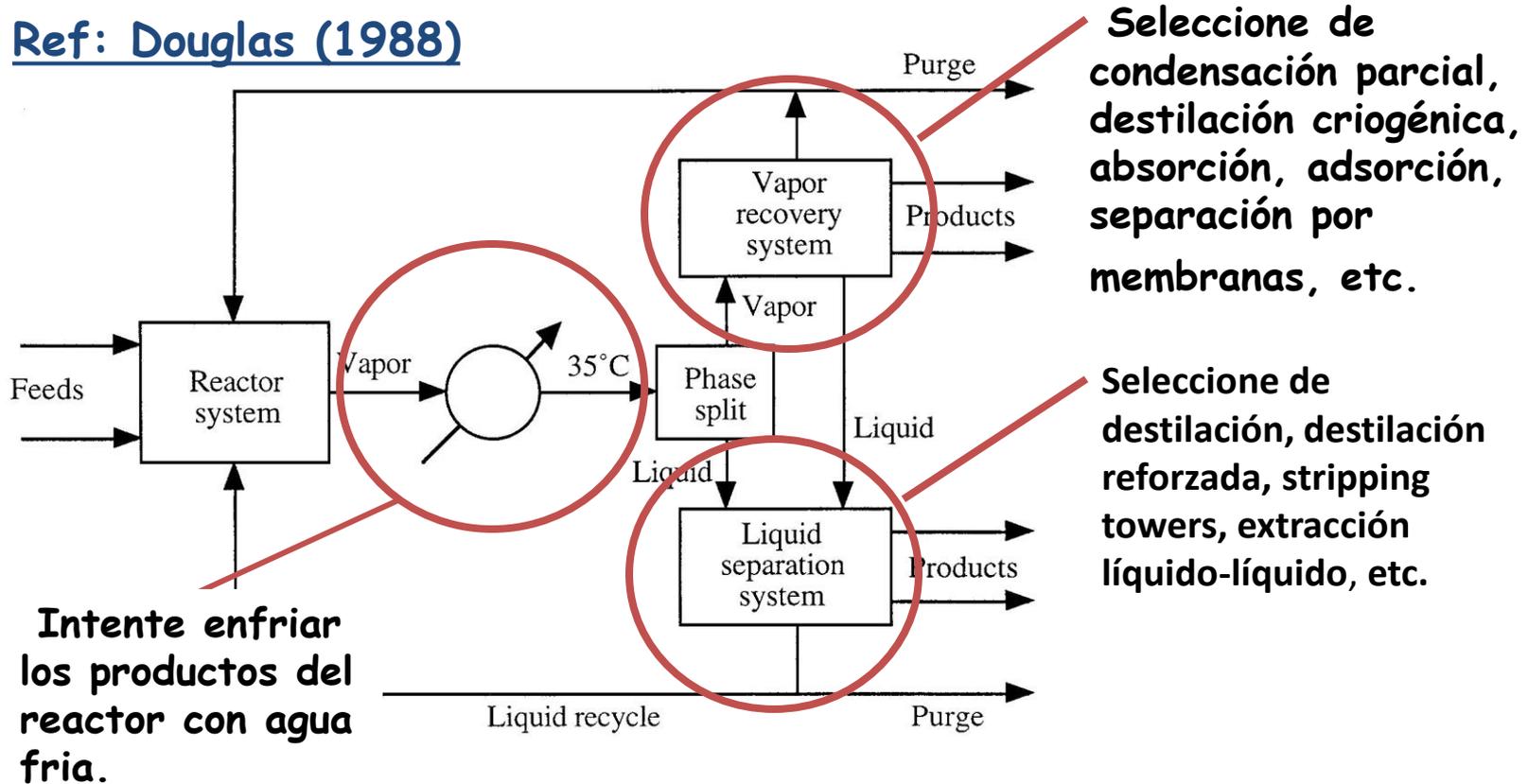


Seleccione de destilación reforzada, stripping, extracción líquido, etc. de destilación torres de towers, líquido-

Separaciones

Heurístico 10 Intente condensar mezclas de vapor con agua fría; luego emplee el **Heurístico 9**.

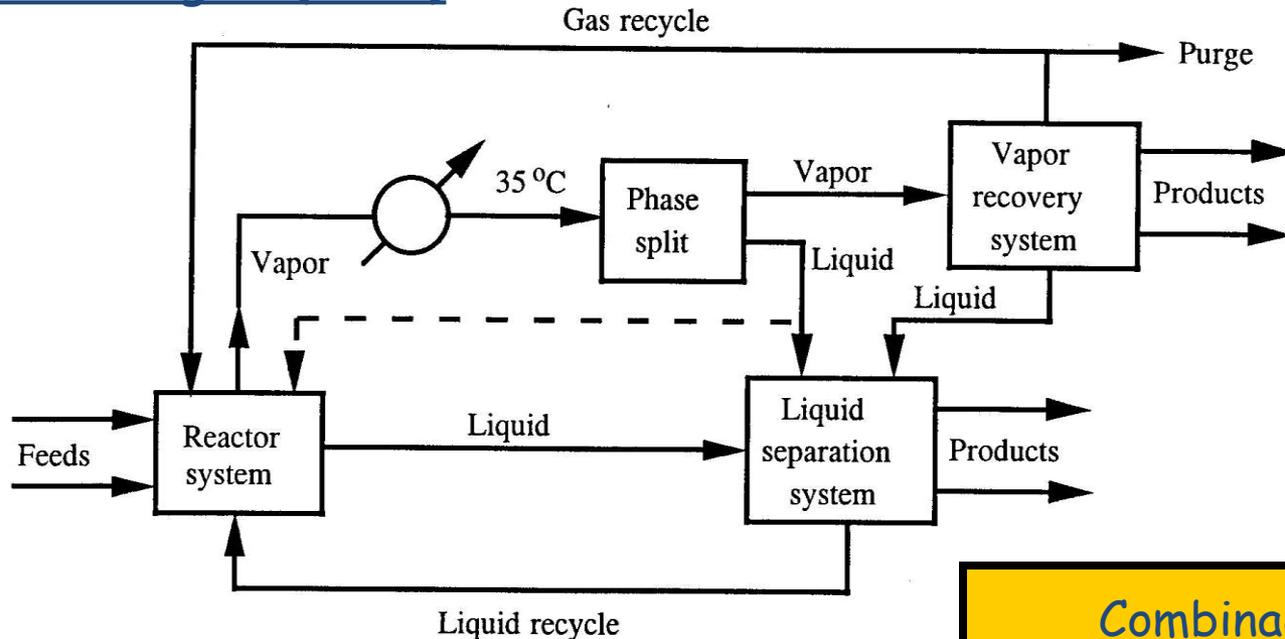
Ref: Douglas (1988)



Separaciones

Heurístico 11: Separe mezclas de vapores usando condensadores parciales, destilación criogénica., torres de absorción, adsorbedores, y/o procesos por membranas.

Ref: Douglas (1988)



Combinacion de los flowsheets previos

Transferencia de Calor en Reactores

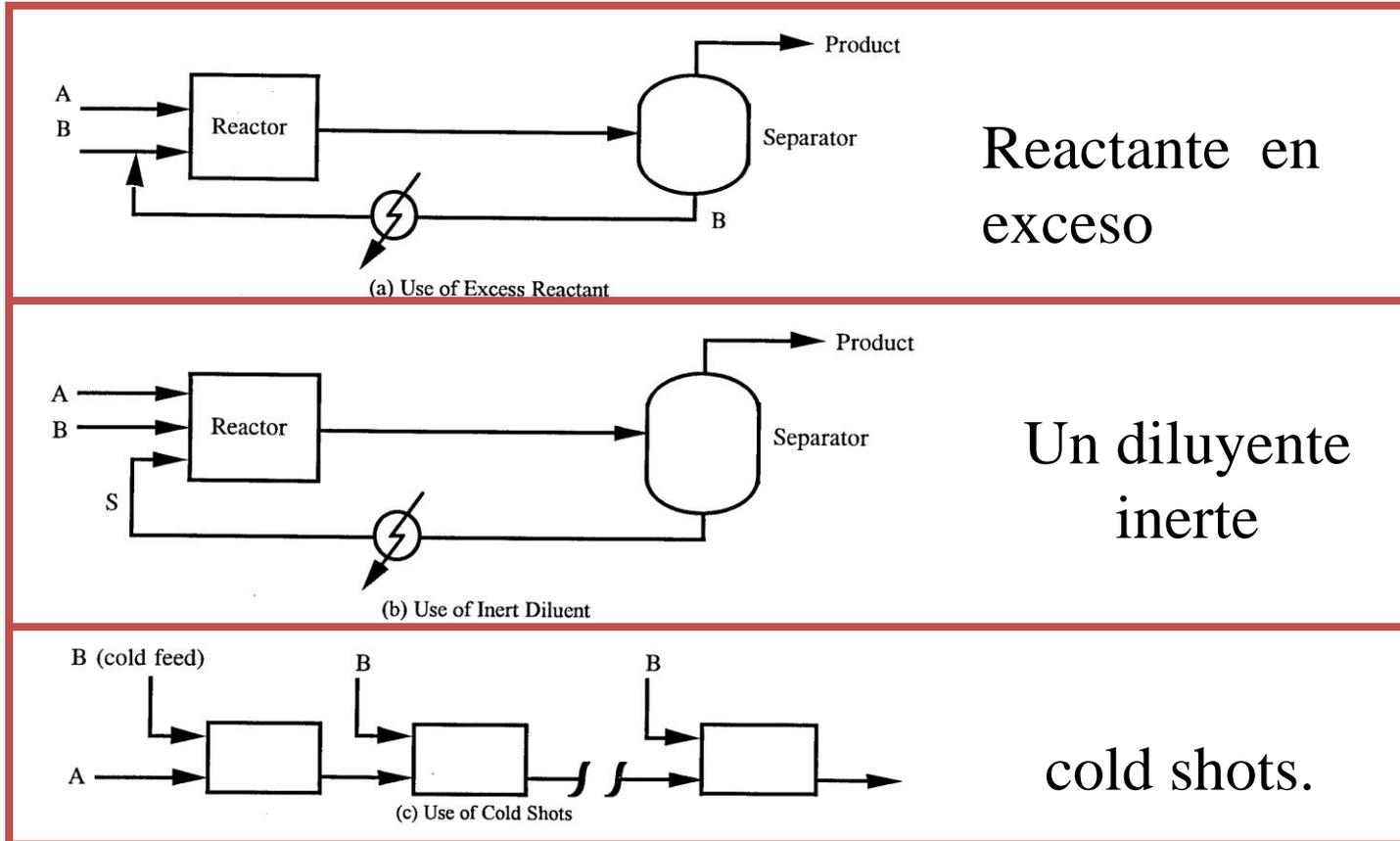
Técnicas modernas discuten la transferencia de calor en reactores en el contexto de Integración de calor y potencia, sin embargo se discute aquí por que influyen la distribución de químicos. Empezaremos con **Reactores Exotermicos**.

Heurístico 12: Para retirar calor de una reacción altamente exotérmica, considere el uso de reactante en exceso, un inerte como diluyente, y golpes fríos. Estos afectarán la distribución de los químicos por lo que deben incluirse temprano en la síntesis de procesos

Transferencia de Calor en Reactores

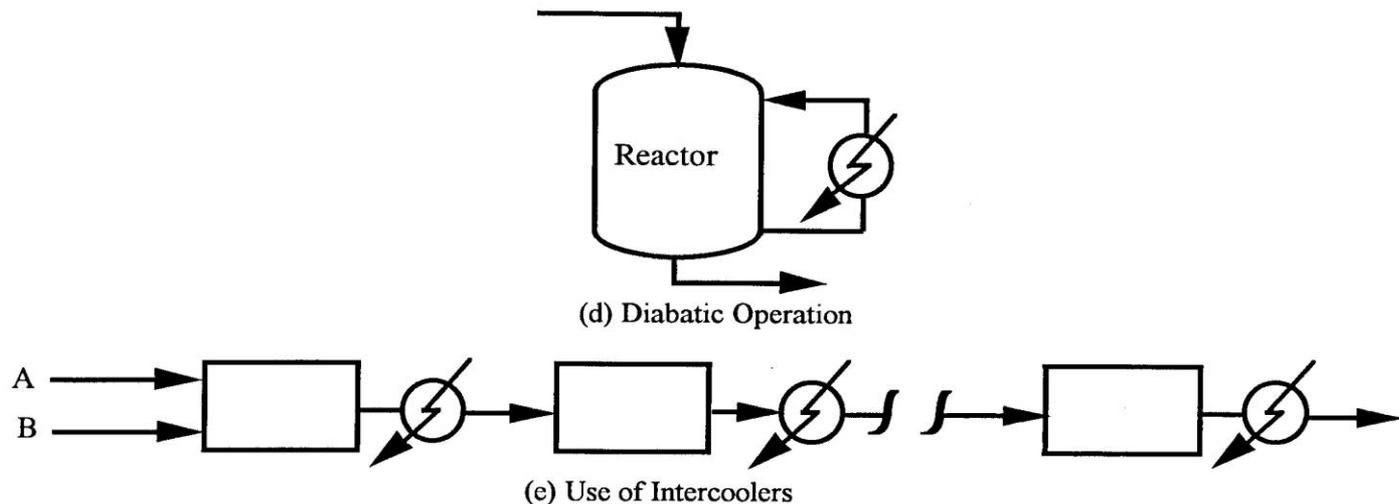
Heurístico 12:

Para remover calor de reaccion altamente exotermica considere el uso de:



Transferencia de Calor en Reactores

Heurístico 13: Para reacciones menos exotérmicas, circule los fluidos del reactor a un enfriador externo, o emplee un reactor de tanque con chaqueta de enfriamiento o emplee serpentines internos de enfriamiento. También considere el uso de interenfriadores.



Transferencia de Calor en Reactores

Reactores Endotérmicos se tratan de manera similar:

Heurístico 14: Para controlar la temperatura de una reacción altamente endotérmica, considere el uso de un exceso de reactante, el empleo de diluyentes inertes, y/o hot shots. Estos afectan la distribución de los químicos y deben insertarse temprano en la síntesis de procesos

Heurístico 15: Para reacciones menos endotérmicas, circule el fluido del reactor a un calentador externo, o use un reactor enchaquetado o emplee serpentines de calentamiento. También considere el uso de intercambiadores.

Bombeo y Compresion

Heuristico 16: Para aumentar la presion, bombee un liquido antes que compimir un gas; esto es, condense el vapor, siempre que no necesite refrigeracion (y compresion), antes de bombear.

Trabajo de bombeo o compresion es:

$$\dot{W} = \int_{P_1}^{P_2} \dot{V} dP$$

Es mas eficiente bombear un liquido que comprimir el gas.
Prefiera condensar el vapor, bombearlo, y vaporizarlo antes que comprimirlo.

Excepcion: Si la condensación requiere refrigeracion.

