

Proyecto I: Simulación de la “Sección de absorción-desorción de la Planta de producción de óxido de etileno por oxidación directa de etileno con oxígeno”

Alumno: Arvizu Cano Cristopher Profesor: Enrique Bazúa Rueda 18/09/2019

Actividad 1

1. Características principales del proceso a simular

¿Cuáles son los equipos que simularemos en la planta de óxido de etileno, que tipos de operación tenemos y por lo tanto que tipo de propiedades nos interesaran? Observando que los equipos pertinentes son las columnas de destilación donde la separación está representada por el equilibrio liquido-vapor, y las propiedades a utilizar en función de una ecuación de estado podrán ser representadas siempre y cuando tengamos buenos parámetros de interacción binaria. El modelo termodinámico candidato a utilizar es Peng-Robinson más adelante se explicará porqué.

Torre de absorción de óxido de etileno

Se analizó las temperaturas de las corrientes 304 (36°C) y 301 (101°C), la absorción de gases se favorece típicamente con temperaturas bajas y altas presiones, caso contrario si se desea desorber es necesario aumentar la temperatura y disminuir la presión. La presión de las corrientes 304 es 2150kPa y 301 es 400kPa.

Actividad 2

2. Selección del paquete termodinámico

Se seleccionó el paquete termodinámico Peng Robinson el cual tiene aplicaciones para el procesamiento de gas, refinería, petroquímica. Se emplea en mezclas no polares o ligeramente polares, por ejemplo, hidrocarburos y gases ligeros, tales como dióxido de carbono, sulfuro de hidrógeno, e hidrogeno, particularmente adecuado a altas temperaturas y regiones de alta presión. Este método de propiedad se puede usar para mezclas químicas no ideales polares, si se utilizan funciones alfa y reglas de mezcla apropiadas

Componentes seleccionados simulación de la planta de óxido de etileno

Ethylene	Oxygen	C2Oxide	CO2	H2O	Nitrogen	Argon	Methane	Ethane	EGlycol	Formaldehyde	AcetAldehyde
----------	--------	---------	-----	-----	----------	-------	---------	--------	---------	--------------	--------------

3. y 4. Simulación de la sección de absorción-desorción

En la zona de las torres (T1), tendremos soluciones bastante diluidas debido a las recirculaciones 106, 428, 528 y 320 provocan un acumulamiento ya que se reingresa agua que no sale en las corrientes de salida en las torres aumentando el nivel de componente recirculado sin necesidad de alimentar una gran cantidad.

Las dos corrientes principales son; la alimentación (106), la corriente de producción de óxido de etileno (306) una vez separada del resto de componentes, y la corriente de los gases (107) las restantes son corrientes para evitar cuestiones de contaminación y son enviadas a la planta de glicoles (302). Se llevó a cabo la simulación, a continuación, se muestra la comparación de las corrientes de salida 107 y 111.

Tabla 1. Comparación de las corrientes de salida 107 y 111

Datos proporcionados			Cálculados Hysys			%Error		
Corriente	107	111	Corriente	107	111	Corriente	107	111
Componente	kmol/h	kmol/h	Componente	kmol/h	kmol/h	Componente	107	111
Etileno	10442.86	16.82	Etileno	10442.8684	16.8115671	Etileno	8.07525E-05	0.05013595
Oxígeno	2823.2	1.6	Oxígeno	2823.22516	1.59483525	Oxígeno	0.0008914	0.3227968
Oxido de Etileno	1.34	1021.26	Oxido de Etileno	29.53	1025.74	Oxido de Etileno	2103.36	0.44
Dioxido de Carbono	709.28	7.52	Dioxido de Carbono	709.313476	7.48652369	Dioxido de Carbono	0.0047	0.4452
Agua	138.96	70214.58	Agua	173.652969	70179.4913	Agua	24.9662	0.0500
Nitrogeno	100.84	0.04	Nitrogeno	100.84076	3.92E-02	Nitrogeno	0.0008	1.9011
Argon	5460.74	3.38	Argon	5460.73658	3.38342124	Argon	6.26516E-05	0.1012
Metano	23451.16	14.12	Metano	23451.1364	14.1435778	Metano	0.00010	0.1670
Etano	1391.94	1	Etano	1391.9161	1.00390271	Etano	0.00172	0.3903
Etilenglicol	0	1067.76	Etilenglicol	2.69E-02	1.04E+03	Etilenglicol	0	3.0647
Formaldeido	0.02	7.04	Formaldeido	1.04E-02	7.04E+00	Formaldeido	48.0014	0.0210
Acetaldeido	0	0.2	Acetaldeido	4.74E-03	2.01E-01	Acetaldeido	0	0.5693
Total	44520.34	72355.32	Total	44583.257	72291.9748	Total	0.14132	0.0875
T(°C)	36	55	T(°C)	35.99	51.51	T(°C)	0.02717	6.3414
P (kPa)	1943.7	2000	P (kPa)	1943.7	2000	P (kPa)	0	0

Parámetros de interacción binaria

Las indicaciones para mejorar el modelo es tener un coeficiente de interacción agua-óxido de etileno pequeño, en mi caso el rango de mi coeficiente ajustado de manera manual quedo entre (-0.11392,-0.143), disminuyendo en una gran cantidad el óxido de etileno.

Tabla 2.

Kij H₂O-OxE	-0.1362	-0.1368	-0.1372	-0.1378	-0.1382	-0.1392	-0.143	-0.1432
107 kmol/h OxE	3.13	2.70	2.47	2.20	2.06	1.81	1.43	no convergió

Los parámetros de interacción binaria desempeñan un papel importante en corrientes en las cuales deseamos que las moléculas de los componentes tengan una interacción débil, los parámetros cuando las interacciones sean mayores podremos tener parámetros pequeños e incluso negativos, esta información es de vital importancia ya que de esto dependerá que la simulación en el absorbedor sea confiable, precisa, y lo más aceptable de acuerdo al alcance de modelo termodinámico (Peng-Robison).

La columna de destilación se puede simular de dos distintas maneras, un caso se simula como columnas separadas o en su defecto con una sola columna integrada, ambos casos válidos

Se declararon las corrientes 106, 304, y las corrientes donde se conocen las presiones, siendo las caídas de presiones asignadas

Actividad 3

Tabla 3. Parámetros de interacción binaria ajustados de forma manual.

	Ethylene	Oxygen	C2Oxide	CO2	H2O	Nitrogen	Argon	Methane	Ethane	EGlycol	Formaldehyde	AcetAldehyde
Ethylene	---	0	0	6.62E-02	-0.17219999	7.22E-02	0	2.15E-02	1.23E-02	0.4799	0	0
Oxygen	0	---	0	9.75E-02	-0.1313	-1.20E-02	1.04E-02	0	0	0	0	0
C2Oxide	0	0	---	0	-0.14300001	0	0	0	0	0	0	0
CO2	6.62E-02	9.75E-02	0	---	-7.50E-02	-2.00E-02	0	0.1	0.12980001	0	0	0
H2O	-0.17219999	-0.1313	-0.14300001	-7.50E-02	---	-0.49079058	-0.1805	-0.19927	-0.1183	-0.1	-0.538999975	-0.214000002
Nitrogen	7.22E-02	-1.20E-02	0	-2.00E-02	-0.49079058	---	0	3.60E-02	5.00E-02	0	0	0
Argon	0	1.04E-02	0	0	-0.1805	0	---	2.30E-02	0	0.5	0	0
Methane	2.15E-02	0	0	0.1	-0.19927	3.60E-02	2.30E-02	---	2.24E-03	0.5	0	0
Ethane	1.23E-02	0	0	0.12980001	-0.1183	5.00E-02	0	2.24E-03	---	0.5	0	0
EGlycol	0.4799	0	0	0	-0.1	0	0.5	0.5	0.5	---	0	0
Formaldehyde	0	0	0	0	-0.53899997	0	0	0	0	0	---	0
AcetAldehyde	0	0	0	0	-0.214	0	0	0	0	0	0	---

Los valores en rojo son los parámetros ajustados para cada par de compuesto.

El coeficiente de interacción binaria es importante en la termodinámica, ya que este concepto actúa como un calibrador de las ecuaciones termodinámicas. Por ejemplo, para la elaboración de planes de desarrollo en yacimientos de gas condensado se requiere estudios composicionales usando una ecuación de estado calibrada para la evaluación de reservas de gas condensado, métodos de producción, diseño de facilidades de superficie. Esta calibración envuelve el ajuste de un grupo de los más complejos parámetros de la ecuación de estado, con el propósito de minimizar la diferencia entre los datos experimentales y los calculados mediante la ecuación de estado.

Comparación y análisis de los resultados obtenidos en la solución

- ✓ Absorción de óxido de etileno en la Columna T1 (Flujo molar en corriente 111)
- ✓ Desorción de óxido de etileno en la Columna T4 (Flujo molar en corriente 306)
- ✓ Flujo molar de óxido de etileno en la recirculación (corriente 304)
- ✓ Absorción de gases en la Columna T1, o sea, su flujo en la corriente 111
- ✓ Perfil de composiciones en la Columna T4
- ✓ Perfil de flujos de líquido y vapor en la Columna T4

Tabla 4. Comparación corriente 107

107	DATO	HYSYS	%ERROR
Corriente	107	107	107
Componente	kmol/h	kmol/h	
Etileno	10442.86	10442.8619	0.00002%
Oxigeno	2823.2	2823.23366	0.00119%
Oxido de Etileno	1.34	1.43	6.534%
Dioxido de Carbono	709.28	709.366241	0.012%
Agua	138.96	173.638144	25%
Nitrogeno	100.84	100.841025	0.001016%
Argon	5460.74	5460.73861	0.000025%
Metano	23451.16	23451.1414	0.000079%
Etano	1391.94	1391.9166	0.001681%
Etilenglicol	0	2.59E-02	-
Formaldeido	0.02	1.02E-02	49%
Acetaldeido	0	9.06E-04	-
Total	44520.34	44583.257	0.141%
T(°C)	36	35.99	0.027%
P (kPa)	1943.7	1943.7	0.000%

Ajustando los parámetros de interacción óxido de etileno-agua el error disminuye, ver tabla 1.

Tabla 5. Comparación corriente 306

306	DATO	HYSYS	%ERROR
Corriente	306	306	306
Componente	kmol/h	kmol/h	
Etileno	16.82	16.7676123	0.31%
Oxigeno	1.6	1.5789471	1.32%
Oxido de Etileno	1017.15	1009.67	0.736%
Dioxido de Carbono	7.52	7.4292281	1.21%
Agua	209.77	191.056208	8.92%
Nitrogeno	0.03	3.90E-02	29.96%
Argon	3.38	3.36571744	0.42%
Metano	14.12	14.0755518	0.31%
Etano	0.99	0.99949137	0.96%
Etilenglicol	0	2.39E-03	-
Formaldeido		4.26E-03	-
Acetaldeido	0.21	0.19973415	4.89%
Total	1271.59	1245.18574	2.08%
T(°C)	57	60.66	6.42%
P (kPa)	130	130	0.00%

El mayor error se tiene en el nitrógeno.

Tabla 6. Comparación corriente 304

304	DATO	HYSYS	%ERROR
Corriente	304	304	304
Componente	kmol/h	kmol/h	
Etileno			
Oxigeno			
Oxido de Etileno	0.35	1.9009	443.12%
Dioxido de Carbono			
Agua	69880.78	69956.1022	0.11%
Nitrogeno			
Argon			
Metano			
Etano			
Etilenglicol	1067.72	990.203869	7.26%
Formaldeido	6.95	6.90862393	0.60%
Acetaldeido			
Total	70955.8	70955.1156	0.00%
T(°C)	36	36.00	0.00%
P (kPa)	2150	2150	0.00%

Existe un error considerable en OxE comparada con los datos proporcionados, aunque en general el desempeño es el esperado.

Tabla 7. Comparación corriente 111

111	DATO	HYSYS	%ERROR
Corriente	111	111	111
Componente	kmol/h	kmol/h	
Etileno	16.82	16.8181157	0.01%
Oxigeno	1.6	1.58634186	0.85%
Oxido de Etileno	1021.26	1022.71	0.142%
Dioxido de Carbono	7.52	7.43375929	1.15%
Agua	70214.58	70255.2241	0.06%
Nitrogeno	0.04	3.90E-02	2.56%
Argon	3.38	3.38139112	0.04%
Metano	14.12	14.1385875	0.13%
Etano	1	1.00340176	0.34%
Etilenglicol	1067.76	990.177987	7.27%
Formaldeido	7.04	6.99845944	0.59%
Acetaldeido	0.2	0.20014063	0.07%
Total	72355.32	72291.9748	0.09%
T(°C)	55	51.51	6.34%
P (kPa)	2000	2000	0.00%

Hysys predice adecuadamente la columna T1.

Actividad 4

Coefficientes de interacción binaria ajustados utilizando Aspen COMTHERMO de Hysys.

Utilizando un programa de optimización basado en una estrategia de mínimos cuadrados en donde el objetivo es encontrar los parámetros binarios del modelo que minimicen la suma de P , la suma de “ y ” dividido entre el error experimental para normalizar los valores.

Observaciones generales sobre los resultados:

- ✓ Los datos no están prediciendo equilibrio líquido-líquido
- ✓ Se predice líquido-vapor
- ✓ No es un azeótropo ya que no tenemos un máximo ni un mínimo
- ✓ El cálculo realizado utilizando como modelo un parámetro no sirven para representar los datos experimentales o solo los representa en zonas de menores concentraciones.
- ✓ El modelo de un solo parámetro solo se podrá representar la sección de la planta de óxido de etileno en solución diluida mientras que las zonas de mayor concentración estas representadas muy mal.
- ✓ Se requerirá un modelo de dos parámetros
- ✓ Si se quisiera simular toda la planta se necesitaría utilizar el modelo NRTL de coeficientes de actividad o bien una ecuación de estado, pero con una regla de mezclado.

Descripción de lo que se realizó en clase para el ajuste de parámetros

Se ingresó la composición molar del óxido de etileno experimentales, así como la presión a temperatura constante (10°C), AL proporcionar datos a una temperatura definida esto nos dicen como varía la presión a diferentes composiciones o bien datos una presión definida como varía la temperatura a diferentes composiciones, cuando queremos un ajuste de parámetros necesitamos tener información experimental de por lo menos una variable más, si tenemos un sistema binario dos componentes dos fases, al tener dos grados de libertad se necesitara en el laboratorio, para el sistema en equilibrio, medir por lo menos tres variables, temperatura, presión, y composición, esto nos permitirá ajustar el modelo ya que los datos experimentales en el punto de burbuja dependiendo la posición, si las fuerzas de atracción entre las moléculas diferentes son débiles la presión en el sistema crece en un líquido en equilibrio, por lo que la posición de la línea de los puntos de burbuja se moverá hacia arriba, entonces la posición de esa línea de burbuja nos indicará y nos servirá para obtener los parámetros de interacción binaria.

Aspen COMTHERMO es una herramienta de ajuste de parámetros de interacción.

Type: PX Optimization Information: Objective Function: BubblePres Weight: 1 Fluid Pkg: Fluid1
 Basis: Mole Fraction Active ☒ Property Pkg: Peng-Robinson-P

Experimental Data:

Number	Point Weight	Exp Press	Exp Temp	X_EthyleneOxic	X_H2O
1.000	1.000	3.380	10.00	0.0043	0.9957
2.000	1.000	5.030	10.00	0.0086	0.9914
3.000	1.000	7.719	10.00	0.0129	0.9871
4.000	1.000	13.03	10.00	0.0231	0.9769
5.000	1.000	20.48	10.00	0.0353	0.9647
6.000	1.000	27.72	10.00	0.0496	0.9504
7.000	1.000	47.02	10.00	0.0886	0.9114
8.000	1.000	72.74	10.00	0.1796	0.8204
9.000	1.000	84.46	10.00	0.3121	0.6879
10.00	1.000	86.46	10.00	0.3959	0.6041
11.00	1.000	87.63	10.00	0.4580	0.5420
12.00	1.000	87.56	10.00	0.4880	0.5120
13.00	1.000	88.25	10.00	0.5020	0.4980
14.00	1.000	88.11	10.00	0.5287	0.4713
15.00	1.000	88.74	10.00	0.5422	0.4578
16.00	1.000	89.29	10.00	0.5911	0.4089
17.00	1.000	89.91	10.00	0.6432	0.3568
18.00	1.000	90.67	10.00	0.7002	0.2998
19.00	1.000	91.36	10.00	0.7469	0.2531
20.00	1.000	92.25	10.00	0.7977	0.2023
21.00	1.000	93.49	10.00	0.8480	0.1520
22.00	1.000	95.35	10.00	0.8971	0.1029
23.00	1.000	101.1	10.00	1.0000	0.0000
<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>

Basic Data Statistical Data Errors Plots Error Propagation Notes

X Calculated OK

Completed.

Figura 2. Datos experimentales, fracción mol OxE y presión de vapor (kPa).

La estrategia para ajustar los parámetros de interacción binaria, cuando tenemos datos a una temperatura dada, y tenemos presión experimental con una composición de líquido así como de vapor, esta colección de datos nos permitirá diseñar una estrategia para ajustar, esta estrategia de puntos de burbuja consiste en utilizar el modelo calcular puntos de burbuja y esos puntos de burbuja que se calculen se van a contrastar con los datos experimentales, se darán como datos de entrada en el modelo la temperatura así como la fracción mol, una vez definido el sistema se resolverá el sistema y se calculara la presión y la composición del vapor, p_1 y p_2 calculada, para cada uno de los puntos. Teniendo así la presión calculada y experimental a la composición, ahora se buscará que la presión calculada se parezca a la presión experimental, en este punto se verá si un modelo de un parámetro es suficiente o se

requerirá un modelo de dos parámetros, dependiendo de cómo se comporte la presión calculada con respecto a la presión experimental, en una gráfica P vs fracción mol del líquido en donde se represente los datos experimentales. Al jugar con los parámetros de interacción se tratará de que la línea pase por la mayoría de los puntos, utilizando la técnica de los mínimos cuadrados, minimizando la suma del error en cada punto.

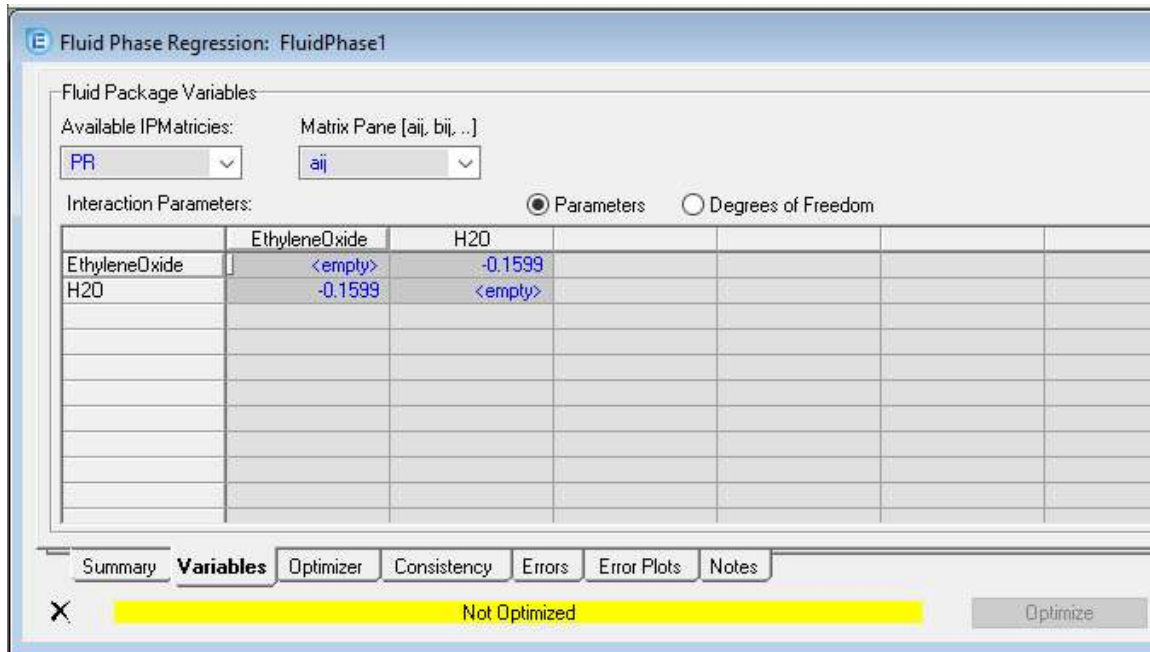


Figura 3. Parámetros de interacción propuestos con un valor de -0,1599

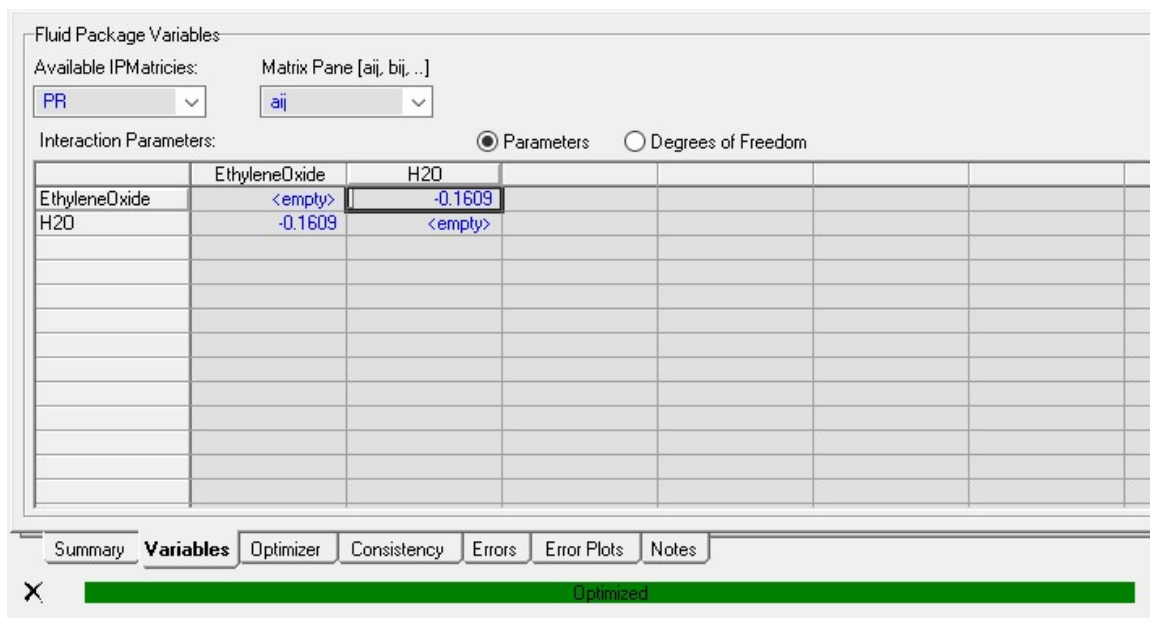


Figura 4. Optimización y ajuste de parámetros en Aspen COMTHERMO

Diagrama que representa la línea de punto de burbuja, la línea horizontal representa un equilibrio liquido vapor, por encima tenemos líquido mientras que por abajo tenemos vapor, representando inmiscibilidad, la interacción no es suficientemente fuerte por lo que crea dos fases.

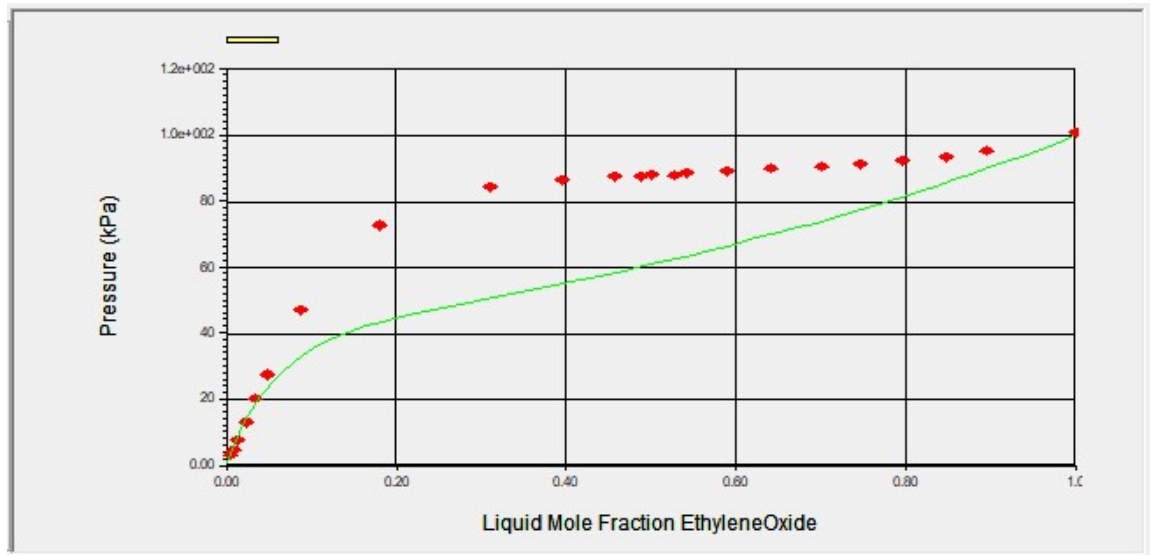


Figura 5. Datos experimentales en rojo y calculados en verde de presión.

La línea verde no representa de manera adecuada los valores experimentales de presión.

Ajuste realizado en clase, quedando pendiente realizar el mejor ajuste.

1. Se añadió como Fluid Package, Peng Robinson para líquido y vapor.
2. En componentes se seleccionó Óxido de etileno (C_2H_4O) y agua (H_2O).
3. Se procede a hacer la regresión de datos experimentales liquido-vapor.
4. Se añade una data set, el tipo de diagrama a meter dependerá de los datos que tengamos ya que los datos son presión composición se selecciona PX-Presión de burbuja.
5. Se calcula el error a partir del parámetro que se da, correrá el modelo y para cada punto experimental calculará la presión.
6. Optimizador la data set
7. Cambia la opción a glued ya que deseamos que la optimización de los parámetros se modifica de igual manera para ambos de otra manera los valores no nos servirían para nada.

Actividad 5. Análisis de temperatura.

Se analizó las temperaturas de las corrientes 304 ($36^\circ C$) y 301 ($101^\circ C$), la absorción de gases se favorece típicamente con temperaturas bajas y altas presiones, caso contrario si se desea desorber es necesario aumentar la temperatura y disminuir la presión. La presión de las corrientes 304 es 2150kPa y 301 es 400kPa.