

UNIVERSIDAD TECNOLOGICA NACIONAL - FACULTAD REGIONAL ROSARIO
Departamento de Ingeniería Química

Cátedra: Integración IV

Tema: Aplicación del simulador HYSYS para desarrollar el modelo estacionario de una planta simplificada para la cloración de propileno.

Alumnos: Damián Matich, Marcos Bossi y Juan M. Pignani

Profesores: Dr. Nicolás Scenna, Dr. Alejandro Santa Cruz y Dra. Sonia Benz

Año de cursado: 1999

Problema:

En una planta de cloración de *Propeno* (C_3H_6), reacciona Cl_2 con *Propeno* para producir *Cloruro de Propeno* (ClC_3H_5), *1,2-Dicloro Propano* ($Cl_2C_3H_6$) y *2,3-Dicloro Propeno* ($Cl_2C_3H_4$). La reacción tiene lugar en un reactor tanque agitado continuo y los productos resultantes se separan aguas abajo en una columna fraccionadora.

Las condiciones de la corriente de alimentación se indican en la *Tabla I*. La corriente de alimentación ingresa al reactor, que opera a 73.50 psia y 800°F, y tiene un volumen de 10 ft³. Las reacciones ocurren en fase vapor.

Los productos del reactor se enfrián a 50°F. El intercambiador de calor tiene una caída de presión de 0.30 psi.

La corriente que sale del enfriador ingresa a una columna de destilación que principalmente separa los componentes reactivos de los compuestos clorados, obtenidos como productos de la reacción.

Para conocer el número de etapas de la columna y determinar el plato de alimentación de la misma se deberá diseñar la torre con el auxilio de un modelo shortcut.

La corriente de tope de la columna de destilación está en fase vapor (condensador: Full Reflux). El condensador opera con una presión de 20 psia y tiene una pérdida de carga de 0.20 psi, mientras que la presión es de 27 psia. La composición molar de *propeno* en el producto de tope es del 92%, mientras que la composición de *cloruro de propeno* en la corriente de fondo (producto formado por los propilenos clorados), asciende al 65%.

Tabla I	Alimentación
Temperatura (°F)	128
Presión (psia)	88
Flujo molar (lbmol/hr)	1310
Flujo molar Cl_2 (lbmol/hr)	106
Flujo molar C_3H_6 (lbmol/hr)	1186
Flujo molar ClC_3H_5 (lbmol/hr)	18

$Cl_2 + C_3H_6 \rightarrow ClC_3H_5 + HCl$	$r = 2.1 * 10^{11} e^{(-27009.6/RT)} (C_{Cl_2})(C_{C_3H_6})$
$Cl_2 + C_3H_6 \rightarrow Cl_2C_3H_6$	$r = 1.19 * 10^7 e^{(-6811.98/RT)} (C_{Cl_2})(C_{C_3H_6})$
$Cl_2 + ClC_3H_5 \rightarrow Cl_2C_3H_4 + HCl$	$r = 4.69 * 10^{14} e^{(-42300/RT)} (C_{Cl_2})(C_{ClC_3H_5})$
r : [lbmol/(ft ³ hr)], energía de activación: [BTU/lbmol]	

Actividades:

1. Construir el flowsheet usando el simulador HYSYS.
2. Diseñar la columna de destilación en base al modelo de una columna de destilación shortcut, siendo la presión de tope = 20 psia y la presión de fondo = 27 psia, y sabiendo que, la fracción molar del componente clave liviano en el fondo es de 0.004 y la del clave pesado en el tope es de 0.014. Asumir que la relación de reflujo es 5.
3. Determinadas las características de diseño que debe reunir la columna separadora de propeno, instalar una columna de destilación y determinar las condiciones operativas (relación de reflujo, cargas calóricas en condensador y rehervidor, etc.), en que estará funcionando la columna en base a la especificación dada de productos.
4. Comparar los resultados obtenidos en base a dos tipos de paquetes de propiedades diferentes: Soave-Redlich-Kwong y/o Peng Robinson y un paquete de actividad (Uniquac o Unifac).

Informe Técnico:

- A) Las hipótesis, consideraciones y datos que se han tenido en cuenta para calcular e ingresar la información del proceso al modelo del simulador HYSYS fueron:
- Datos sobre las corrientes de entrada (temperatura, presión, flujo molar, etc.).
 - Elección del paquete de propiedades: PR ó SRK.
 - Fijar el sistema de unidades.
 - Determinar el número de platos de la torre de destilación:
 - Modelo: columna de destilación shortcut.
 - Presión de tope = 20 psia y de fondo = 27 psia.
 - Fracción molar del componente clave liviano en el fondo = 0.004
 - Fracción molar del componente clave pesado en el tope = 0.014
 - Relación de reflujo = 0.50
- B) Los resultados parciales y las condiciones de las corrientes de entrada y salida para cada equipo que se obtuvieron durante la simulación estacionaria fueron:
- Datos obtenido a partir del Short-Cut:
 - a- Componente clave liviano: propeno (propene).
 - b- Componente clave pesado: cloruro de propeno (2C1C3).
 - c- Relación de reflujo externa: 5
 - d- Relación de reflujo mínima: 0.066
 - e- Presión en el condensador: 1.361 atm.
 - f- Presión en el rehervidor: 1.837 atm.
 - g- Temperatura en el condensador: -35.25°C = 237.9°K
 - h- Temperatura en el rehervidor: 52.31°C = 325.46°K
 - i- Mínimo número de etapas: 3.829 ≈ 4
 - j- Número actual de etapas: 4.249 ≈ 4
 - k- Etapa óptima de alimentación: 0.59 ⇒ 1
 - Datos de las corrientes materiales:

Nombre	Feed	Dummy	S1	S2	PropRec	Bottoms
Fracción de vapor	1.00	0.00	1.00	0.94	1.00	0.00
Temperatura (°K)	326.48	699.82	699.82	283.15	233.04	294.58
Presión (atm)	5.99	5.00	5.00	4.98	1.36	1.84
Flujo molar (Kmol/min)	9.90	0.00	9.85	9.85	9.29	0.56
Flujo másico (Kg/min)	444.53	0.00	444.53	444.53	399.09	45.44
Flujo calor (KJ/min)	192825.22	0.00	473505.27	92797.14	103285.93	-33868.01

Componente	Fracción molar en el reactor	
	Input (Feed)	Output (S1)
HCl	0.0000	0.0387
Cl ₂	0.0809	0.0369
Propeno	0.9053	0.8730
Cloruro de propeno (2ClC ₃)	0.0137	0.0387
1,2 Dicloro propano (12ClC ₃)	0.0000	0.0058
2,3 Dicloro propeno (23ClC ₃)	0.0000	0.0069

- Según el paquete de propiedades Peng Robinson:

	Presión (KPa)	Temp (°K)	Cl ₂	C ₃ H ₆	ClC ₃ H ₅
ondensador	137.9	233.04	0.050	0.909	0.033
-TS	139.7	237.93	0.048	0.746	0.151
-TS	151.0	240.59	0.060	0.739	0.151
-TS	162.7	242.86	0.077	0.720	0.154
-TS	174.4	246.13	0.097	0.662	0.191
-TS	186.2	258.56	0.090	0.418	0.428
ehervidor	186.2	294.58	0.031	0.096	0.650

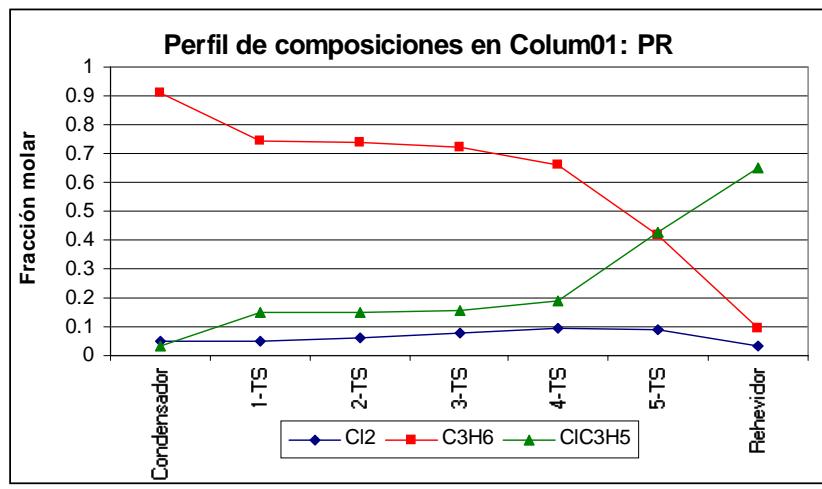
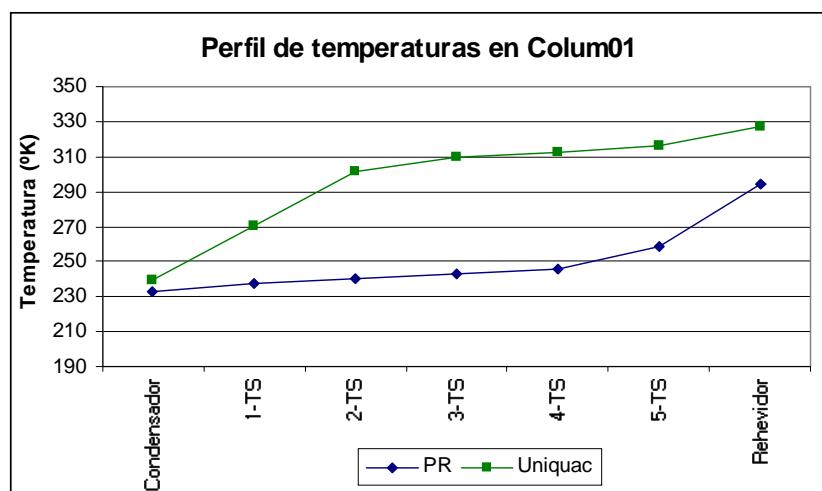
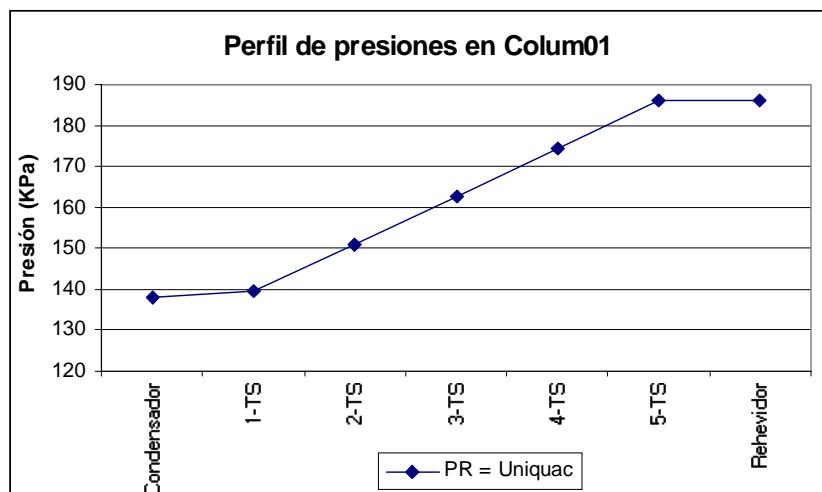
Intercambio energético	KJ/hr
Intercambiador (Enfriador01)	-2.284*10 ⁷
Condensador (Qcond)	-4.149*10 ⁶
Rehervidor (Qreb)	2.736*10 ⁶

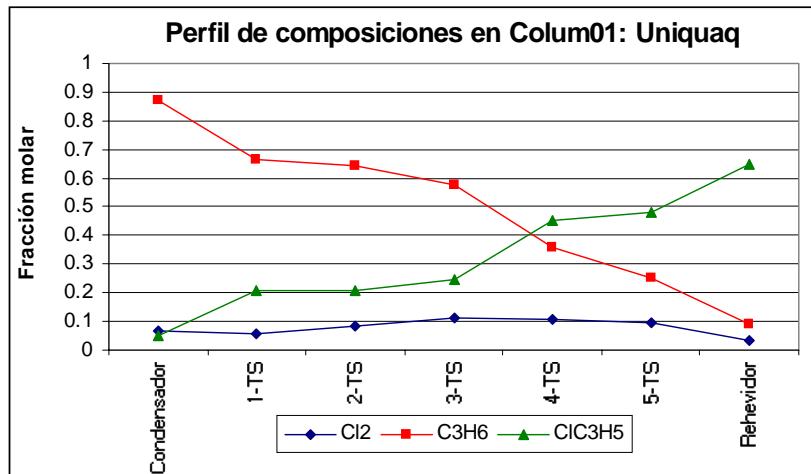
- Según el paquete de propiedades Soave-Redlich-Kwong: los valores encontrados por medio de este paquete de propiedades fueron similares a los obtenidos por medio del paquete Peng Robinson.
- Según el paquete de propiedades Unicuaq:

	Presión (KPa)	Temp. (°K)	Cl ₂	C ₃ H ₆	ClC ₃ H ₅
Condensador	137.9	239.430	0.068	0.873	0.051
1-TS	139.3	270.829	0.057	0.664	0.206
2-TS	151.0	301.330	0.082	0.641	0.209
3-TS	162.7	309.420	0.114	0.573	0.244
4-TS	174.4	312.480	0.106	0.359	0.455
5-TS	186.2	315.910	0.097	0.249	0.483
Rehervidor	186.2	326.830	0.036	0.089	0.650

Intercambio energético	KJ/hr
Intercambiador (Enfriador01)	-2.277*10 ⁷
Condensador (Qcond)	-3.030*10 ⁶
Rehervidor (Qreb)	1.626*10 ⁶

C) Gráficas de los perfiles de temperatura y composición de la columna de destilación.





- D) El impacto de las diferentes bases termodinámicas sobre los obtenidos no es muy notoria. Tanto el paquete de propiedades Peng Robinson y/o Soave-Redlich-Kwong como el paquete de actividades Unicuaq dan resultados muy similares en cuanto a temperaturas, presiones y composiciones, entre otros. Por lo tanto optar por uno u otro, no influye de manera muy significante a los resultados finales.
- E) Considerando la relación de reflujo molar de los reactivos Cl_2 y C_3H_6 , y de los productos obtenidos se podrían introducir los siguientes cambios:
- Sin modificar el flowsheet: aumentar la relación de entrada $\text{Cl}_2/\text{C}_3\text{H}_6$.
 - Modificando el flowsheet: recircular una fracción de la corriente de salida del reactor o colocar otro reactor tanque agitado en serie.