

# **DISEÑO PRELIMINAR DE DIAGRAMAS DE FLUJOS**

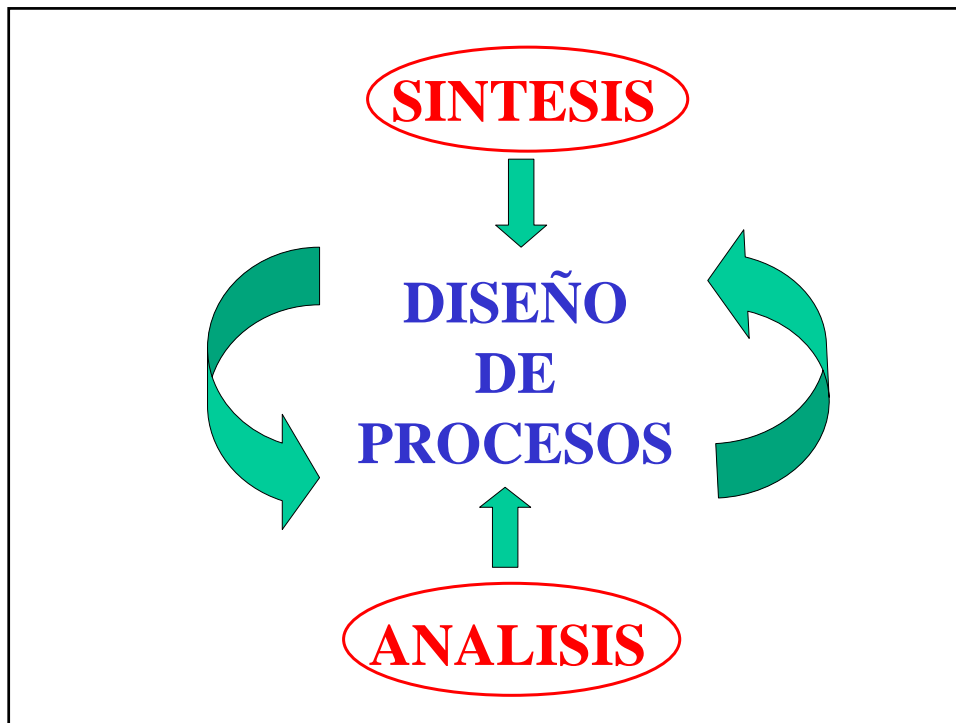
**Nuevas Ideas en Procesos**



## Nuevas Ideas en Procesos

- Producir una materia prima costosa u obtenerla al mínimo costo.
- Convertir un subproducto de desecho en un producto de valor.
- Crear un material completamente nuevo.
- Encontrar un nuevo camino de reacción para fabricar un producto existente. Por ejemplo, producir un catalizador nuevo, ó desarrollar una alternativa de bioprocesamiento.
- Desarrollar o utilizar una nueva tecnología. Por ejemplo; membranas, biotecnología, sistemas expertos, robótica, etc.
- Desarrollar o utilizar un nuevo material de construcción en un equipo de proceso. Por ejemplo; polímeros, anticorrosivos o materiales que soporten altas  $T^a$  y P, etc.
- Desarrollar un tratamiento de efluentes contaminantes a bajo costo.

- Un 50% de los productos vendidos por la mayoría de las compañías industriales fueron desarrollados hace  $\approx 10$  años.
- La posibilidad de comercialización en la etapa de investigación para un nuevo proceso es  $\approx 1-3\%$ . En la etapa de desarrollo es a  $\approx 10-25\%$  y en la etapa de planta piloto  $\approx 40-60\%$ .
- **Síntesis de Procesos:** Elección de Alternativas de Procesamiento.



### **Aproximación Jerárquica al Diseño Conceptual**

- 1- Proceso continuo vs. discontinuo vs. semicontinuo.**
- 2- Estructura de entrada y salida del diagrama de flujo.**
- 3- Estructura de reciclo del diagrama de flujo.**
- 4- Estructura general del sistema de separación:**
  - (a) Sistema de recuperación de gases.**
  - (b) Sistema de recuperación de líquidos.**
  - (c) Sistema de recuperación de sólidos.**
- 5- Red de intercambio de calor (integración de energía).**
- 6- Planificación y programación de la producción.**

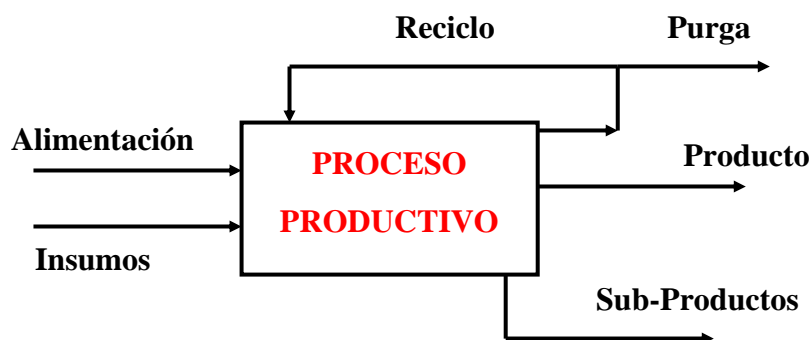
### PROCESO CONTINUO

- Condiciones de operación estacionarias.
- Gran escala de producción.
- Cada equipo realiza una operación o función específica.
- Calidad del producto constante.
- Velocidad de producción constante.
- Alta automatización.
- Poca mano de obra.

### PROCESO BATCH ( DISCONTINUO )

- Funcionamiento intermitente.
- Ciclo de operación.
- Pequeña escala de producción.
- Plantas flexibles, multiproducto y multipropósito.
- Equipos multifuncionales y multi-operacionales.
- Grandes tiempos de procesamiento o residencia.
- Reacciones lentas, Flujos pequeños.
- Productos que ensucian, incrustan o corroen los equipos.
- Productos de calidad variable.
- Velocidad de producción variable.
- Mucha mano de obra.
- Productos de alto valor y calidad.
- Procedimientos de síntesis complejos.
- Condiciones de control muy estrictas.

### Estructura de Entrada y Salida del Diagrama de flujos

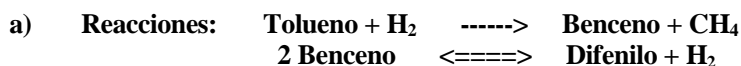


## Información Preliminar

- 1- Reacciones químicas y condiciones de reacción.
- 2- El flujo de producción deseado.
- 3- La pureza deseada del producto y su precio.
- 4- Las materias primas y su precio.
- 5- Velocidad(es) de la reacción(es) química(s) y la velocidad(es) de desactivación del catalizador(es).
- 6- Cualquier restricción del procesamiento.
- 7- Datos de la planta y lugar de ubicación.
- 8- Propiedades físicas de todos los componentes.
- 9- Seguridad, toxicidad, e impacto ambiental de los materiales involucrados.
- 10- Precios de los subproductos, equipos y servicios.

### EJEMPLO: Proceso para producir benceno a partir de tolueno (Proceso HDA).

**1- Información de la reacción:**



- b) Temperatura de reacción > 1150°C (velocidad de reacción alta).  
Presión en el reactor: 500 psia.

- c) Selectividad (S) = moles de benceno en la salida del reactor / moles de tolueno convertidos.

Conversión ( $\alpha$ ) = moles de tolueno convertidos en el reactor / moles de tolueno alimentados al reactor.

$$S = 1 - 0.0036 / (1 - \alpha)^{1.544}; \quad \alpha < 0.97$$

- c) Fase gas.
- e) No se utilizan catalizadores.

2- Flujo de producción de benceno = 265 mol/hr.

3- Pureza del benceno producido =  $x_D = 0.9997$ .

4- Materias primas: Tolueno puro en condiciones ambientales.  
Corriente que contiene 95% de hidrógeno y 5% de metano, a 550 psia y 100°F.

5- Restricciones:

- $H_2$ / aromáticos  $\geq 5$  a la entrada del reactor (prevenir la coquización).
- Temperatura de salida del reactor  $< 1300$  °F (prevenir el hidrocraqueo).
- El efluente del reactor debe ser enfriado rápidamente a 1150 °F.
- $\alpha < 0.97$  por la correlación de distribución del producto.

### **DECISIONES A TOMAR DURANTE EL DISEÑO DEL DIAGRAMA DE FLUJOS**

- 1- ¿Se debe purificar la corriente de alimentación antes de que entre en el proceso?
- 2- ¿Se debe remover o recircular un subproducto reversible?
- 3)- ¿Se debe usar un reciclo de gas con una corriente de purga?
- 4)- ¿Se deben recuperar o recircular algunos reactantes?
- 5)- ¿Cuántas corrientes efluentes deben haber?
- 6)- ¿Cuáles son las variables de diseño, y qué aspectos económicos están asociados con ellas?

## **1- ¿Se debe purificar la corriente de alimentación antes de que entre en el proceso?**

- i) Impurezas reactivas y/o en cantidades significativas ==> **Remove.**
- ii) Impurezas como gas y/o inertes ==> **En Principio Procesarlas**
- iii) Impureza presente en efluente líquido de subproducto o producto ==> **Remove**
- iv) Impureza presente como azeótropo ==> **Procesarla**
- v) Impureza que inactiva el catalizador ==> **Remove**
- vi) Impurezas participantes de un ciclo ==> **Purgar**

**Remove Especies ó Purificar**

**==> Aumento de Costos del Proceso**

## **2- ¿Se debe remover o recircular un subproducto reversible?**

**Recirculación un subproducto reversible**

**==> sobre-dimensionar todos los equipos del ciclo**

**Remoción de un subproducto reversible**

**==> aumento de los costos variables  
(mayor requerimiento de materias primas)**

**La Decisión es Económica**

**3)- ¿Se debe usar un reciclo de gas con una corriente de purga?**

"Cuando un reactivo liviano se encuentre junto a impurezas o subproductos livianos con punto de ebullición menor que el propileno,  $C_3H_6$ , ( $-48^\circ C$ ), se debe usar un sistema de reciclo con una corriente de purga.

Sin embargo, las separaciones por membrana, siempre deben ser consideradas".

**La separación de gases livianos requiere de alta presión y refrigeración**

**4)- ¿Se deben recuperar o recircular algunos reactantes?**

**Criterio de diseño:** recuperar  $\approx 99\%$  de los materiales valiosos, ya que éstos representan un alto % del costo de producción.

**El aire es alimentado en exceso para forzar la conversión completa y no se recircula.**

**El agua también se usa en exceso y debe recircularse al máximo, debido a los altos costos de tratamiento.**

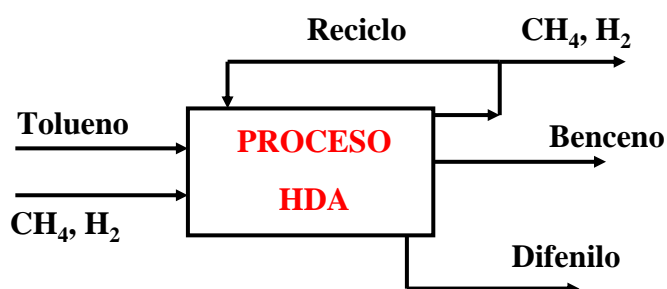


### 5)- ¿Cuántas corrientes efluentes deben haber?

CÓDIGO DE DESTINO	CLASIFICACIÓN DE COMPONENTES
1- Salida	Subproductos gaseosos e impurezas de la alimentación
2- Reciclo con Purga	Reactantes, inertes y/o subproductos gaseosos
3- Reciclo	Reactantes Productos intermedios Azeótropos con reactantes Subproductos reversibles
4- Salida de Exceso	Reactantes gaseosos no recuperados ni recirculados
5- Productos Primarios	Productos principales
6- Subproducto Valioso	Subproductos con un valor interesante
7- Combustibles	Subproductos a combustión
8- Desechos	Subproductos para tratamiento de desechos

### Ejemplo: Encontrar el número de corrientes de productos para el proceso HDA.

Componente	Tª de ebullición normal, °C	Destino
H <sub>2</sub>	-253	reciclo y purga
CH <sub>4</sub>	-161	reciclo y purga
benceno	80	producto primario
tolueno	111	reciclo
difenilo	253	combustible



## 6)- ¿Cuáles son las variables de diseño, y qué aspectos económicos están asociados con ellas?

- Las **Variables de Diseño** son las que afectan la distribución de los productos dentro del proceso.
- Número de variables que se deben especificar para definir el proceso: **Grados de Libertad**.
- Los Balances de Masa y Energía y la Evaluación económica se deben plantear en función de variables de diseño.

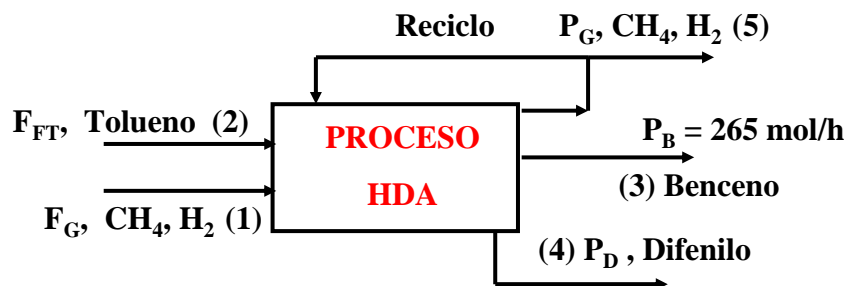
### Ejemplos de Variables de Diseño

Reacción Compleja	:	Conversión del reactor Razón molar de reactantes $T^a$ y Presión de la reacción
Reacción con Exceso	:	Cantidad de exceso
Procesos con Reciclo	:	Relación entre los gases recirculados y purgados

## Procedimiento para Desarrollar Balances

- 1- Comenzar especificando el nivel de producción de requerido (ton/año).
- 2- Por medio de la estequiometría y la cinética de las reacciones, es posible determinar los flujo de subproductos y los requerimientos de materias primas (en términos de las variables de diseño).
- 3- Calcular los flujos de impurezas que entran y salen del proceso.
- 4- Calcular los flujos de salida de los reactantes en términos de una cantidad específica de exceso (sobre los requerimientos estequiométricos), en el caso de corrientes donde los reactantes no son completamente consumidos o recirculados (sistemas de reciclo con purga ó procesos que utilizan aire y/o agua).

## Ejemplo: Balances de masa en el proceso HDA



### Flujos de Entrada:

$F_{FT}$ : Flujo molar de tolueno alimentado en el proceso, [mol/h]  
 $F_G$ : Flujo molar total de gases ( $H_2$ ,  $CH_4$ ) en la alimentación, [mol/h]  
 $F_E$ : Flujo molar de  $H_2$  alimentado en exceso al proceso, el cuál debe salir por la corriente de purga, [mol/h]  
 $F_{H2}$ : Flujo molar de  $H_2$  consumido en la reacción, [mol/h]

### Flujos de Salida:

$P_B$ : Flujo molar de benceno que sale del reactor, [mol/h]  
 $P_{RCH4}$ : Flujo molar de metano producido, [mol/h]  
 $P_{CH4}$ : Flujo molar de metano en la purga, [mol/h]  
 $P_D$ : Flujo molar de difenilo producido, [mol/h]  
 $P_G$ : Flujo molar de purga, [mol/h]

### Fracciones molares:

$Y_{FH}$ : Fracción molar de  $H_2$  en la alimentación  
 $Y_{PH}$ : Fracción molar de  $H_2$  en la purga.

Selectividad,  $S = \text{Flujo de Benceno} / \text{Flujo de Tolueno}$

**Reacciones:**  $\text{Tolueno} + H_2 \rightarrow \text{Benceno} + CH_4$   
 $2 \text{ Benceno} \rightleftharpoons \text{Difenilo} + H_2$

## Balances de Masa:

Selectividad:  $F_{FT} = P_B / S = P_{RCH4}$

Producción de Difenilo:  $P_D = F_{FT} (1 - S) / 2 = (P_B / S) (1 - S) / 2$

Balance e Hidrógeno:  $F_E + P_B (1 + S) / 2S = Y_{FH} F_G$

Balance de Metano:  $P_{CH4} = (1 - Y_{FH}) F_G + P_B / S$

Flujo de Purga:  $P_G = F_E + (1 - Y_{FH}) F_G + P_B / S$

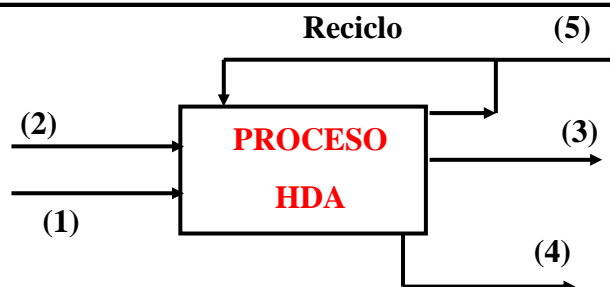
$$Y_{PH} = F_E / P_G$$

Conociendo  $\{ P_B, S \}$  ó  $\{ F_E, Y_{PH} \}$  (variables de diseño)  
Se obtienen:  $F_{FT}, P_D, F_G, P_G$  y luego se puede calcular  
el beneficio económico bruto ó el potencial económico.

## Tabla de Corrientes

	Corrientes				
	1	2	3	4	5
T <sup>a</sup> , (°F)	100	100	100	100	100
P, (psia)	550	15	15	15	465
H <sub>2</sub>	F <sub>H2</sub>	0	0	0	F <sub>E</sub>
CH <sub>4</sub>	F <sub>M</sub>	0	0	0	F <sub>M</sub> + P <sub>B</sub> /S
benceno	0	0	P <sub>B</sub>	0	0
tolueno	0	P <sub>B</sub> /S	0	0	0
difenilo	0	0	0	P <sub>B</sub> (1-S)/2S	0

$F_M = (1 - Y_{FH}) [F_E + P_B (1 + S)/2S] / Y_{FH}$   
 $F_{H2} = F_E + (1 + S)P_B / 2S$   
 $S = 1 - 0.0036 / (1 - \alpha)^{1.544}$   
 $\alpha$  = conversión de tolueno por pasada



## Beneficio Económico Bruto

Para el Proceso HDA se tiene:  $BE =$

$$\begin{aligned} & \{ \text{valor del benceno} + \text{valor del difenilo} \\ & + \text{valor del combustible de la purga} \} \\ & - \{ \text{valor del tolueno} - \text{valor del gas consumido} \} \end{aligned}$$

$$BE = \{ \text{valor producto} + \text{valor subproducto(s)} - \text{valor materia prima(s)} \}, \quad [\$/\text{año}]$$

**No se consideran los costos de inversión ni los costos de servicios.**

Si  $BE < 0$  entonces:

- i)- Desechar el diseño del proceso.
- ii)- Buscar una fuente de materias primas más baratas.
- iii)- Buscar procesos alternativos.

## Precios

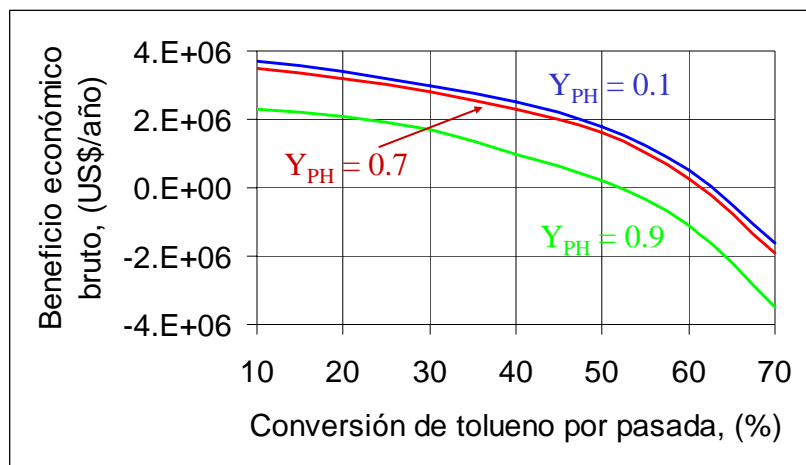
Valor del Benceno	0.85 US\$/gal = 9.04 US\$/mol
Valor del Tolueno (*)	0.5 US\$/gal = 6.4 US\$/mol
Valor del H <sub>2</sub> alimentado	3 US\$/1000 ft <sup>3</sup> = 1.14 US\$/mol
Valor del Combustible	4 US\$/Mbtu

### Calores de Combustión:

H <sub>2</sub>	0.123 Mbtu/mol	Tolueno	1.68 Mbtu/mol
CH <sub>4</sub>	0.383 Mbtu/mol	Difenilo	2.69 Mbtu/mol (**)
Benceno	1.41 Mbtu/mol		

(\*) Se asume un precio de transferencia interna (precio de mercado = 1.26 US\$/gal)

(\*\*) Se asume un valor del combustible difenilo de 5.38 US\$/mol



Beneficio Bruto del Proceso HDA en función de la conversión y de la fracción de hidrógeno en la corriente de purga

## Estructura de los Sistemas de Separación

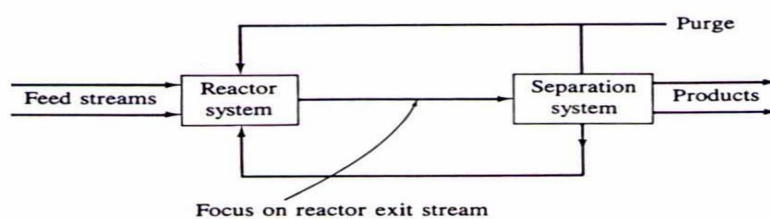


FIGURE Phase of the reactor effluent stream.

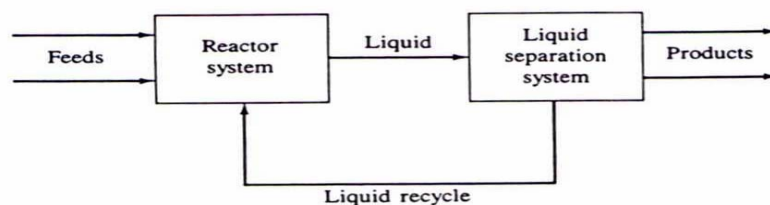


FIGURE Reactor exit is liquid. [From J. M. Douglas, *AIChE J.*, 31: 353 (1985).]

