

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE QUIMICA

OPTIMIZACION DEL AREA DE REACCION DE
UNA PLANTA PARA PRODUCIR ETILENGLICOL

JOSE CARLOS PEREZ ESPINOSA

INGENIERIA QUIMICA

1 9 7 8



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

TESIS 1978
LAB. M.C. 337 301
ADG. _____
FECHA _____ 335
NROC. _____
S. _____



PRESIDENTE CARLOS H. MENA BRITO FLORES

VOCAL FRANCISCO BARNES DE CASTRO

SECRETARIO ALEJANDRO RAMIREZ GRYCUK

1er. SUPLENTE EDMUNDO RAFAEL MORONES ESCOBAR

2do. SUPLENTE ALEJANDRO LOZADA CAÑIBE

Sitio donde se desarrolló el tema : Facultad de Ciencias Químicas y el C S C de la UNAM.

Nombre completo y firma del sustentante : José Carlos Pérez Espinosa.

Nombre completo y firma del asesor del tema : Alejandro Ramírez Grycuk.

Dedicado especialmente a mi madre, Elia Espinosa Martínez :

" C O M O U N P E Q U E Ñ O

A G R A D E C I M I E N T O

A S U S E N O R M E S

E S F U E R Z O S "

A mi padre, Juan Feliciano :

Agradeciendole su ayuda y
buena voluntad.

A mi hermano, Juan Manuel :

Quien desde temprana edad,
me ayudo moral y económicamente.

A mis hermanos :

Ana María y Jorge Rogelio.

A Chela :

Por su agradable compañía
en mi vida de estudiante y
otros momentos vitales.

A mis Maestros y Amigos :

Les doy las gracias.

Agradesco al Dr. Alejandro Ramírez Grycuk
su constante ayuda en la elaboración de
este trabajo.

Agradesco al Dr. Francisco Barnés de Castro
su intervención importante en la elaboración
de este trabajo.

Mi más sincero agradecimiento al Dr. Enrique
Bazua Rueda, reconociendo su calidad como
profesor y como persona para tratar a los
alumnos.

Sinceramente agradezco al Dr. Ernesto Zeller
Epsen la formación básica de mi carrera.

Por último, le doy las gracias a la U.N.A.M.
por la formación que me ha otorgado casi gratuitamente.

**Optimización del Area de Reacción
de una Planta que produce Etilenglicol**

Contenido :

- I.- Introducción**
- II.- Simulación del Area de Reacción**
- III.- Optimización del Area de Reacción**
- IV.- Resultados y Conclusiones**

Apendice

- A1.- Propiedades Físicas de las Soluciones Líquidas
de Etilenglicol y Agua**
- A2.- Cálculo de la Entalpia**
- A3.- Cálculo del Calor de Reacción**

CAPITULO I

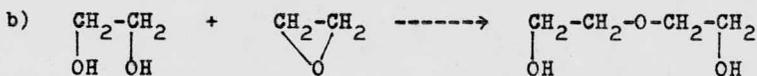
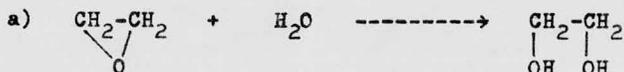
I N T R O D U C C I O N

Los glicoles (polialcoholes) son aquellos compuestos que tienen dos grupos oxhidrilo en átomos de carbono diferentes, siendo el etilenglicol el más importante de ellos.

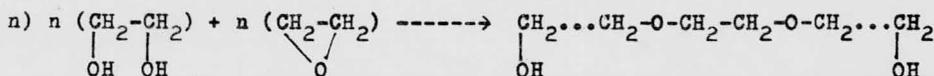
Wurtz obtuvo etilenglicol (E.G.) por primera vez en 1859, y fué hasta 1925 cuando su producción alcanzó el nivel comercial.

Los usos del etilenglicol son los siguientes: humectante, solvente en la industria de pinturas y plásticos, en la producción de tintas, agente fijador en el celofán, estabilizador en la espuma de soya (usada en la extinción de fuego causado por aceite y gasolina), en plastificantes y, principalmente, como anticongelante y como materia prima en la fabricación de fibras poliéster. Esta última aplicación consume la mayor parte del E.G. producido.

El etilenglicol se produce industrialmente por hidratación del óxido de etileno. Las reacciones que se llevan a cabo fundamentalmente son las siguientes:



⋮



La molécula más sencilla recibe el nombre de etilenglicol, y el nombre de los demás glicoles se forma de la siguiente manera: de la palabra etilenglicol con el prefijo di, tri, etc., correspondiente.

Características del Proceso:

A) Reacciones.

Analizando su cinética, Benn¹ informa lo siguiente:

- 1.- Las reacciones que producen etilenglicol y dietilenglicol tienen energías de activación semejantes y son las que se llevan a cabo en grado significativo y generalmente en forma irreversible.
- 2.- La distribución de productos casi no se ve afectada por la temperatura.
- 3.- El efecto de la presión es despreciable en el rango de operación comercial que es de 0.1 a 30 atm.
- 4.- Observó que entre más pequeña es la relación de óxido de etileno a agua alimentada al reactor, menor es la cantidad de poliglicoles formada.

La reacción se puede llevar a cabo en diferentes medios:

- a) A altas temperaturas (160 a 170 °C) y presiones moderadas (0.1 a 30 atm.) no se necesita catalizador, pero la reacción es peligrosa y puede carbonizarse el producto.
- b) Usando catalizador ácido (ác. sulfúrico diluido), se incrementa la velocidad de la reacción, pero el ácido queda como impureza después de la reacción.

- c) En solución neutra, la velocidad de la reacción es pequeña.
- d) Usando como catalizador amberlite Ik-120, se produce un efecto semejante al del ácido.

B) Proceso.

Analizando las propiedades físicas tanto de la materia prima como de los productos, se debe de tomar en cuenta los siguientes puntos:

- 1.- El óxido de etileno tiende a reaccionar explosivamente bajo condiciones ácidas e básicas extremas.
- 2.- A temperaturas bajas los glicoles son muy viscosos y tienden a hacer espuma.
- 3.- No se debe operar a temperaturas mayores de 165 °C, ya que se produce una descomposición térmica (carbonización de los glicoles).
- 4.- La eliminación de aire del sistema evita la oxidación lenta de los glicoles y la combustión explosiva del O.E., para lo cual se suministra una atmósfera inerte (N₂).
- 5.- Es conveniente tener un medio básico, pero sin exceder un pH de 8 - 8.5, porque la solución de glicoles - agua tiende a formar espuma y a emulsificarse fácilmente.
- 6.- El producto generalmente lleva residuos sólidos e hidrocarburos como impurezas que hay que eliminar para aumentar la calidad del etilenglicol.
- 7.- El óxido de etileno es estable a agentes detonantes comunes, cuando está en estado líquido.

Situación Industrial:

De las plantas que producen etilenglicol, casi todas lo hacen

vía hidratación del óxido de etileno, y por lo tanto, utilizan los mismos procedimientos químicos. En lo que difieren es en la configuración y condiciones de operación.

Siempre ha sucedido que la demanda de los demás glicoles con respecto a la del E.G. es despreciable, por lo que la formación de poliglicoles se considera una pérdida de materia prima e impureza del producto. También, como se puede observar en la gráfica siguiente, la demanda de etilenglicol en éste país siempre ha sido mayor que su producción, previéndose una demanda de 100,000 ton/año para 1980.

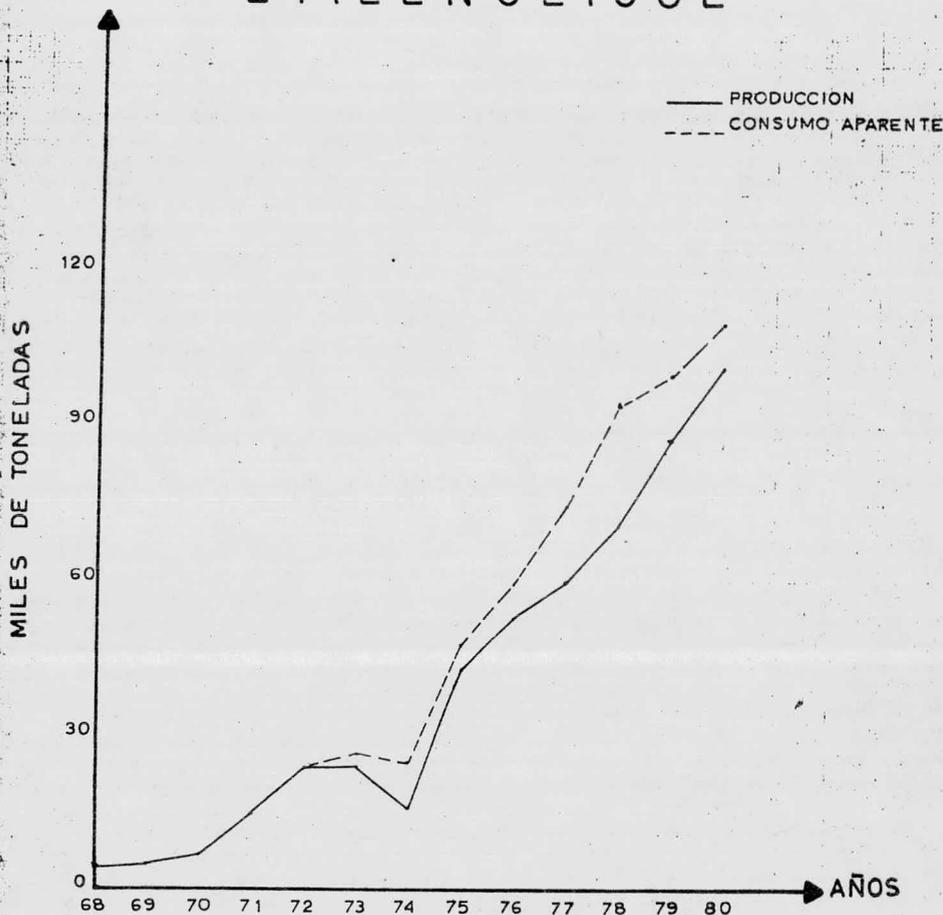
Los productores de etilenglicol en México son: Industrias Derivadas del Etileno S.A., Polioles S.A. y Glicoles Mexicanos S.A. Este último tiene en proyecto una planta con una capacidad de 113,000 ton/año para realizar en Tehuantepec Oax. y desarrollarse en 1980 (Anuario de la Industria Química Mexicana de 1977).

Actualmente, la mayor parte del E.G. es consumida por los fabricantes de fibras poliéster, quienes exigen que el contenido de agua no sea mayor al 0.3 % en peso, es decir, piden etilenglicol casi puro. Para alcanzar tal pureza es necesario un consumo de energía muy grande en el área de separación.

Por lo expuesto anteriormente, el estudio que se presenta a continuación toma importancia en la operación de plantas existentes y, en la creación de nuevas plantas de glicoles.

Para este trabajo se ha escogido una planta que representa la configuración más común de este proceso.

ETILENGLICOL



* FUENTE: Anuario de la Industria Química Mexicana.- ANIQ
 Dirección General de Estadística.- SIC.

Memoria del Foro de la Industria Química Mex.- ANIQ.

CONSUMO APARENTE (TON.)

PROYECCION (TON.)

AÑOS	PRODUCCION	IMPORTACION	CONSUMO APARENTE	AÑOS	PRODUCCION	DEMANDA
1968	4,082	218	4,300	1975	43,154	24,905
1969	4,510	240	4,750	1976	53,160	47,600
1970	6,700	---	6,700	1977	60,066	59,500
1971	14,700	---	14,700	1978	71,150	74,500
1972	23,400	73	23,473	1979	87,846	94,000
1973	23,500	3,468	26,988	1980	101,371	100,000
1974	16,000	8,905	24,905			110,000

Descripción del Proceso:

Se alimenta a presión (22 atm apróx.) una mezcla líquida de agua y óxido de etileno a un reactor adiabático tubular continuo, en donde se llevan a cabo las reacciones de producción de glicoles; como la forma en que conviene operar al reactor es con exceso de agua, el agua sobrante es eliminada posteriormente en un sistema de evaporación en múltiple efecto, el cual trabaja con un vacío en el último efecto de aproximadamente 0.1 atm (Weaver¹¹).

El óxido de etileno que no reaccionó (una cantidad muy pequeña, debido a que la conversión es casi total) y el agua que no se eliminó en el evaporador son separados de los glicoles en una columna de destilación.

Se utiliza una columna de destilación secundaria para separar al etilenglicol de los demás glicoles (dietilenglicol y trazas de trietilenglicol).

Objetivo:

Aunque ya se mencionó someramente, el objetivo que se pretende alcanzar con este estudio es obtener la forma de operar la configuración seleccionada, de tal manera que nos dé la mayor rentabilidad del proceso. Esto significa obtener un mínimo en el costo total. Separándolo en los costos fijos y los costos de operación y, analizando estos últimos, se puede predecir lo siguiente:

La mayor parte de los costos fijos es el costo del equipo, en donde el óptimo sería tener el menor y más pequeño equipo posible.

Dentro de los costos de operación, la contribución más importante en este proceso es el consumo de energía, aumentando considerablemente cuando no se trabaja la planta en la forma adecuada (Curme⁷, Weaver¹¹ y Ballard¹²).

Debido a lo expuesto anteriormente, y tomando en cuenta que se trata de un estudio preliminar, se decidió optimizar el consumo de energía sin considerar el costo de los equipos, con la restricción de que el número de efectos del sistema de evaporación no sea mayor que ocho.

CAPITULO II

SIMULACION DEL AREA DE REACCION

A continuación se presentan los modelos matemáticos que permiten hacer la simulación del área de reacción y evaporación.

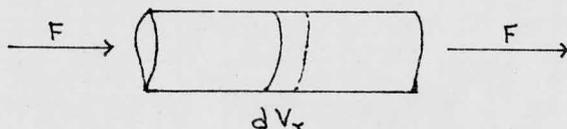
A) Simulación del Reactor.

Es un reactor adiabático continuo tubular.

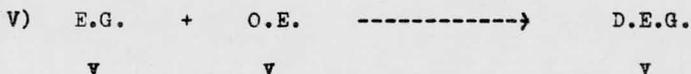
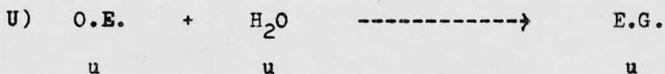
La simulación de esta parte se hace considerando lo siguiente:

- 1.- La reacción se lleva a cabo sin catalizador, empezando a ser significativa a los 85 °C.
- 2.- El etilenglicol carboniza a los 165 °C, por lo cual, la temperatura del reactor no debe ser mayor a los 165 °C.
- 3.- La relación de agua a óxido de etileno debe ser mayor a 5.56 (ver Othmer²), para evitar la formación de trietilen y tetraetilen glicol.

Modelo matemático.



Reacciones:



en donde 'u y v', son las moles reaccionadas por cada libra que se alimenta al reactor.

De un balance de materia diferencial para cada una de las reacciones

$$F du = r_u dV_r \text{ ----- (1)}$$

$$F dv = r_v dV_r \text{ ----- (2)}$$

rearrreglando

$$\frac{du}{dV_r} = \frac{r_u}{F} \text{ ----- (3)}$$

$$\frac{dv}{dV_r} = \frac{r_v}{F} \text{ ----- (4)}$$

De la cinética

$$r_u = k_u (C_{Ao} - u - v) \text{ ----- (5)}$$

$$r_v = k_v (C_{Ao} - u - v) (u - v) \text{ ----- (6)}$$

sustituyendo (5) y (6) en (3) y (4)

$$\frac{du}{dV_r} = \frac{k_u (C_{Ao} - u - v) D}{F} \text{ ----- (7)}$$

$$\frac{dv}{dV_r} = \frac{k_v (C_{Ao} - u - v) (u - v) D^2}{F} \text{ ----- (8)}$$

se agregó la densidad (D) para homogeneizar las unidades.

En donde

$$C_{OE} = C_{Ao} - u - v \text{ ----- (9)}$$

$$C_{EG} = u - v \text{ ----- (10)}$$

y representan la concentración del O.E. y del E.G. respectivamente, conforme aumenta la conversión en el reactor.

Las constantes de velocidad se obtuvieron correlacionando datos experimentales y ajustando al modelo de Arrhenius.

$$k_u = 9.9765 \times 10^{10} e^{-\frac{9346.36}{T}} \text{ hr}^{-1}$$

$$k_v = 11.1566 \times 10^{12} e^{-\frac{11326.73}{T}} \text{ ft}^3 / \text{ lb mol-hr}$$

Para calcular la conversión conforme aumenta el volumen del reactor, integro las ecuaciones (7) y (8) por el método de Euler simple, con un incremento de volumen pequeño.

$$u_n = u_{n-1} + \left(\frac{du}{dv_r}\right)_{n-1} \Delta V_r$$

$$v_n = v_{n-1} + \left(\frac{dv}{dv_r}\right)_{n-1} \Delta V_r$$

Del balance de energía diferencial

$$\frac{dT}{dv_r} = \frac{\Delta H u}{C_p} \frac{du}{dv_r} + \frac{\Delta H v}{C_p} \frac{dv}{dv_r} \text{ ----- (11)}$$

Para calcular la temperatura en cada punto del reactor, se integra la ec. (11) utilizando el mismo método.

$$T_n = T_{n-1} + \left(\frac{dT}{dv_r}\right)_{n-1} \Delta V_r$$

Además,

$$V_{r_n} = V_{r_{n-1}} + \Delta V_r \quad \text{-----} \quad (12)$$

Para calcular el diámetro del reactor, se utilizó la correlación derivada de la ecuación general de Fanning, obtenida de Hogen³.

$$\frac{dP}{dL} = \frac{0.0235}{\phi 4.8} \left(\frac{F}{1000}\right)^{1.8} \frac{\mu^{0.2}}{\rho} \frac{\text{lb}}{\text{in}^2 \text{ ft}}$$

Realizando las operaciones necesarias y div. entre la sección transversal

$$\frac{dP}{dV} = 1.1673 \times 10^{-6} \frac{F^{1.8} \mu^{0.2}}{\phi 6.8 \rho} \frac{\text{atm}}{\text{ft}^3} \quad \text{-----} \quad (13)$$

Para calcular el diámetro, doy una caída de presión máxima en el reactor de 0.34 atm^{*}, con la cual restrinjo la ec. (13), resolviéndola para el diámetro.

Como el reactor toma la forma de un banco de tubos (cuando es muy grande), hay que agregar la caída de presión en los codos; para ello se calcula su longitud equivalente con la siguiente fórmula,

$$\text{Leq. codo} = 60 \phi$$

y se añade a la longitud del tubo recto.

* Equivale a 5 $\frac{\text{lb}}{\text{in}^2}$ y es la caída de presión permisible, usada comúnmente.

B) Simulación del Evaporador.

Es un evaporador de múltiple efecto con recirculación forzada. El arreglo de los flujos es en paralelo, para evitar que la solución más concentrada se encuentre en contacto (indirecto) con el vapor de mayor calidad, arriesgando la carbonización del producto.

Para la simulación del evaporador se hizo en la siguiente consideración:

1.- Como la cantidad de D.E.G. presente en la solución es pequeña (menor al 4 % en mol a la salida del evaporador), se considera que se está manejando una solución de etilenglicol-agua (para calcular sus propiedades). Además, en la estimación de sus propiedades físicas se usó la fracción mol de glicoles en vez de la del D.E.G.

Modelo matemático.

Balance de energía en cada uno de los efectos

$$V_F \lambda_F + F h_F = V_1 H_1 + (F - V_1) h_1$$

$$V_1 H_1 + (F - V_1) h_1 = V_2 H_2 + (F - V_1 - V_2) h_2 + V_1 h_{c_2}$$

$$V_2 H_2 + (F - V_1 - V_2) h_2 = V_3 H_3 + (F - V_1 - V_2 - V_3) h_3 + V_2 h_{c_3}$$

⋮

$$V_i H_i + (F - \sum_{j=1}^i V_j) h_i = V_{i+1} H_{i+1} + (F - \sum_{j=1}^{i+1} V_j) h_{i+1} + V_i h_{c_{i+1}}$$

⋮

$$V_{N-1} H_{N-1} + (F - \sum_{j=1}^{N-1} V_j) h_{N-1} = V_N H_N + (F - \sum_{j=1}^N V_j) h_N + V_{N-1} h_{c_N}$$

en donde i es un efecto cualquiera, y N es el último efecto (ó número total de efectos).

Rearreglando las ecuaciones anteriores en forma lineal

$$\lambda_F V_F + (h_1 - H_1) V_1 = F (h_1 - h_F) \quad \text{----- (1)}$$

$$(H_1 - h_1 + h_2 - h_{c_2}) V_1 + (h_2 - H_2) V_2 = F (h_2 - h_1) \quad \text{----- (2)}$$

$$(h_3 - h_2) V_1 + (H_2 - h_2 + h_3 - h_{c_3}) V_2 + (h_3 - H_3) V_3 = F (h_3 - h_2) \quad \text{-- (3)}$$

⋮
⋮

$$(h_i - h_{i-1}) V_1 + (h_i - h_{i-1}) V_2 + \dots + (h_i - h_{i-1}) V_{i-2} +$$

$$(H_{i-1} - h_{i-1} + h_i - h_{c_i}) V_{i-1} + (h_i - H_i) V_i = F (h_i - h_{i-1}) \quad \text{----- (4)}$$

⋮
⋮

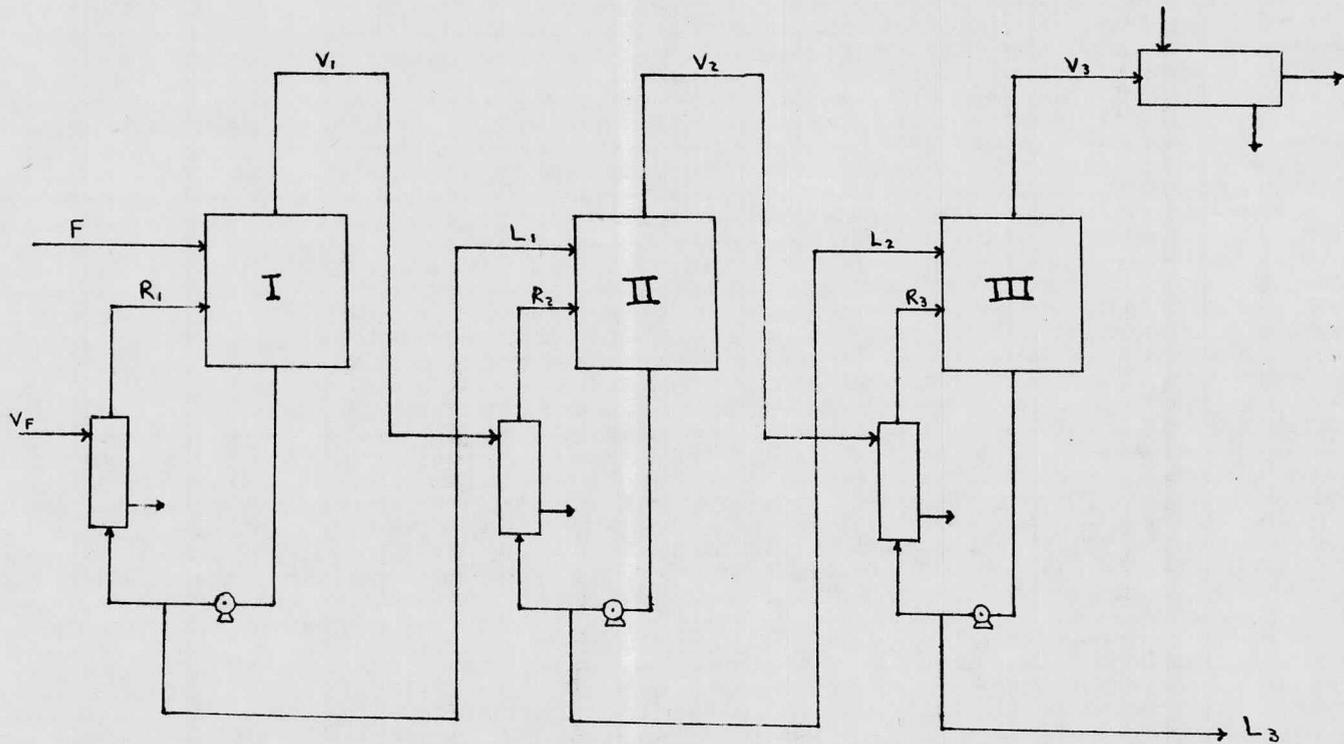
$$(h_N - h_{N-1}) V_1 + (h_N - h_{N-1}) V_2 + \dots + (h_N - h_{N-1}) V_{N-2} +$$

$$(H_{N-1} - h_{N-1} + h_N - h_{c_N}) V_{N-1} + (h_N - H_N) V_N = F (h_N - h_{N-1}) \quad \text{----- (5)}$$

y el balance de materia para el vapor

$$V_1 + V_2 + V_3 + \dots + V_N = V_T \quad \text{----- (6)}$$

forman un sistema de $N+1$ ecuaciones lineales con $N+1$ incógnitas que se resuelve conociendo las entalpías. Para ésto, es necesario conocer la concentración de la solución y la temperatura en cada efecto.



Evaporador en múltiple efecto

Las siguientes relaciones permiten el calculo de la temperatura y de la temperatura de condensación en cada efecto.

$$\Delta T_{ef} = T_{VF} - T_C - \sum_{i=1}^N EPE_i \quad \text{-----} \quad (7)$$

$$\Delta T_{ef} = \sum_{i=1}^N \Delta T_i \quad \text{-----} \quad (8)$$

$$\Delta T_i = T_{VC_i} - T_i \quad \text{-----} \quad (9)$$

$$T_{VC_{i+1}} = T_i - EPE_i \quad \text{-----} \quad (10)$$

El cálculo de la elevación en el punto de ebullición de la solución (EPE), se hace con las funciones obtenidas del ajuste hecho a los datos experimentales de Ju - Chin - Chu⁴.

$$EPE = 50.0 X_{E.G.} \quad X_{E.G.} \leq 0.3$$

$$EPE = \text{EXP} (3.14 X_{E.G.} + 1.9) \quad 0.3 < X_{E.G.} \leq 0.765$$

$$EPE = \text{EXP} (3.14 X_{E.G.} + 1.8) \quad 0.765 < X_{E.G.} \leq 0.9$$

$$EPE = \text{EXP} (3.14 X_{E.G.} + 1.95) \quad X_{E.G.} > 0.9$$

en donde EPE se obtiene en °F.

El área de transferencia de calor de cada efecto se calcula con

$$A_1 = \frac{Q_1}{U_1 \Delta T_1} = \frac{V_{i-1} (H_{i-1} - h_{c_1})}{U_1 \Delta T_1} \quad \text{-----} \quad (11)$$

Los coeficientes de transferencia de calor en los evaporadores de circulación forzada se estiman de la siguiente manera:

a) Coeficiente del lado del líquido.- se calcula usando la ecuación de Dittus-Boelter. Esta ecuación es válida cuando no hay evaporación en el interior de los tubos, por lo cual, la velocidad debe ser mayor a 4.5 ft/sec.

$$h_i = 0.0278 \frac{k}{\phi} \left(\frac{\phi v \rho}{M} \right)^{0.8} \left(\frac{C_p M}{k} \right)^{0.4} \quad \text{-----} \quad (12)$$

b) Coeficiente del lado del vapor

$$h_o = 1500 \frac{\text{BTU}}{\text{hr-ft}^2\text{-}^\circ\text{F}}$$

c) El coeficiente por conducción en el espesor de la pared del tubo no se toma en cuenta, porque su resistencia es despreciable.

El coeficiente global se calcula con

$$U_c = \frac{h_i h_o}{h_i + h_o} \quad \text{-----} \quad (13)$$

Para los cálculos no se tomó el coeficiente de diseño, ya que el factor de obstrucción afecta únicamente las dimensiones del equipo en forma proporcional y, no se están tomando en cuenta los costos de operación.

Como no todas las ecuaciones anteriores son lineales, es necesario resolver el sistema en forma iterativa. Para iniciar el cálculo iterativo, se hacen las siguientes suposiciones:

1.- Que se evapora la misma cantidad de líquido en cada efecto.

2.- Se supone que se transfiere la misma cantidad de energía en todos los efectos.

De la suposición anterior se obtiene

$$U_1 A_1 \Delta T_1 = U_2 A_2 \Delta T_2 = \dots = U_N A_N \Delta T_N$$

Si se quiere que las áreas sean iguales (economía en el diseño), entonces

$$U_i \Delta T_i = U_{i+1} \Delta T_{i+1}$$

$$\therefore \Delta T_{i+1} = \frac{U_i}{U_{i+1}} \Delta T_i \quad \text{-----} \quad (14)$$

sustituyendo (14) en (8)

$$\Delta T_{ef} = \Delta T_1 + \frac{U_1}{U_2} \Delta T_1 + \frac{U_1}{U_3} \Delta T_1 + \dots + \frac{U_1}{U_N} \Delta T_1$$

$$\therefore \Delta T_{ef} = \Delta T_1 \sum_{i=1}^N \frac{U_1}{U_i} \quad \text{-----} \quad (15)$$

Cuando las áreas calculadas son diferentes, se corrige el ΔT de cada efecto de la siguiente manera:

Se calcula una área media

$$A_m = \frac{\sum_{i=1}^N A_i \Delta T_i}{\sum_{i=1}^N \Delta T_i} \quad \text{-----} \quad (16)$$

y con A_m se obtiene el ΔT nuevo

$$\Delta T_i' = \frac{A_i}{A_m} \Delta T_i \quad \text{-----} \quad (17)$$

Con $\Delta T_i'$ se obtienen las nuevas temperaturas de los efectos, y se repite el cálculo hasta que las áreas sean aproximadamente iguales. Esto es

$$\left| \frac{A_m - A_i}{A_m} \right| \leq 0.02$$

El cálculo de la recirculación en cada efecto se obtiene haciendo un balance de energía alrededor del efecto

$$L_{i-1} h_{i-1} + R_i (h_i + \lambda_{i-1}) = V_i H_i + (R_i + L_i) h_i$$

$$\therefore R_i = \frac{V_i H_i + L_i h_i - L_{i-1} h_{i-1}}{\lambda_{i-1}} \quad \text{-----} \quad (18)$$

Cálculo del consumo de agua en el condensador

Temperatura del agua de enfriamiento = 86 °F

Temperatura del agua a la salida = 120 °F

$$G_{H_2O} = \frac{V_N \lambda_C}{120 - 86} \quad \text{-----} \quad (19)$$

Cálculo de la carga térmica en el condensador

$$Q_C = V_N \lambda_C \quad \text{-----} \quad (20)$$

Cálculo de la economía del vapor

$$ECV = \frac{V_T}{V_F} \text{ ----- (21)}$$

CAPITULO III

OPTIMIZACION DEL AREA DE REACCION

Como se menciona anteriormente, la optimización a realizar es en cuanto a energía consumida; por lo que es necesario elaborar una función que nos represente la energía suministrada al sistema y que se le da el nombre de función objetivo (F.O.).

Una vez que se tiene la función objetivo y las restricciones al problema, se procede a optimizar (en este caso se busca el mínimo de la función) utilizando un método matemático.

La técnica de optimización que se utilizó, es el método de busqueda directa de Hooke y Jeeves.

Formulación de la función objetivo :

1.- Energía utilizada en el precalentador de la alimentación al reactor.

$$Q_{PC} = F \int_{25^{\circ}\text{C}}^{\text{Temp. a la entrada del reactor}} C_p dT \quad \text{-----} \quad (22)$$

2.- Energía del vapor suministrado al primer efecto del evaporador.

$$Q_{VF} = V_F \lambda_{VF} \quad \text{-----} \quad (23)$$

3.- Energía disponible en la materia prima. Es la energía aprovechable, si el óxido de etileno se quemara en una caldera con una eficiencia térmica del 80 %.

$$Q_{MP} = (F_{O.E.} Hc_{O.E.})(0.8) \quad \text{-----} \quad (24)$$

en donde, $F_{O.E.}$ son las moles de óxido de etileno alimentadas al reactor, y $Hc_{O.E.}$ es la entalpia de combustión del óxido de etileno a la temperatura del sistema.

4.- Energía utilizada en las columnas de destilación para producir etilenglicol puro.

1) Columna de destilación de agua y gases ligeros.

Opera con una presión de vacío de 0.844 atm. y una temperatura en el rehevador = 145 °C.

Consideraciones :

1.- Opera con flujos molares constantes.

2.- Se considera despreciable el contenido de gases ligeros.

Cálculo de la volatilidad relativa

$$\alpha_{\frac{H_2O}{E.G.}} = \frac{P_{H_2O}^o}{P_{E.G.}^o} \quad \alpha \quad 145 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Cálculo de la composición del vapor en equilibrio con la alimentación a la columna

$$Y_{H_2O} = \frac{X_{H_2O} \alpha_i}{1 + (\alpha_i - 1) X_{H_2O}} \quad \text{-----} \quad (25)$$

Cálculo del reflujo mínimo:

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min} = \frac{1 - Y}{1 - X} \quad \text{-----} \quad (26)$$

Además se tiene que

$$\left(\frac{L}{V}\right) = \frac{R}{R + 1} \quad \therefore \quad R_{\min} = \frac{(L/V)_{\min}}{1 - (L/V)_{\min}} \quad \text{-----} \quad (27)$$

Cálculo del flujo de vapor en operación

$$R = \frac{L}{D} \quad \therefore \quad L_{\text{mín.}} = R_{\text{mín.}} D \quad \text{-----} \quad (28)$$

usando la regla heurística recomendada

$$L_{\text{Op.}} = 1.25 L_{\text{mín.}} \quad \text{-----} \quad (29)$$

y considerando que toda el agua se destila

$$V_{\text{Op.}} = L_{\text{Op.}} + D \quad \text{-----} \quad (30)$$

Cálculo de la energía suministrada al rehervidor

$$Q_{\text{RA}} = V_{\text{Op.}} \lambda_{\text{E.G.}} \quad \text{-----} \quad (31)$$

II) Columna de destilación de etilenglicol.

Opera y se hacen las mismas consideraciones que en la columna de agua y gases ligeros.

Se resuelve en forma análoga a la columna anterior, para el sistema E.G. - D.E.G., obteniendo la siguiente expresión para la carga térmica en el rehervidor

$$Q_{\text{RE}} = V_{\text{Op.}} \lambda_{\text{D.E.G.}} \quad \text{-----} \quad (32)$$

Ya que se tienen todos los términos de energía suministrada al sistema, la función objetivo se calcula con la siguiente ec.:

$$Q_{TT} = \frac{Q_{PC} + Q_{VF} + Q_{MP} + Q_{RA} + Q_{RE}}{PEG} \quad \text{-----} \quad (33)$$

que representa la carga térmica total suministrada al sistema por mol de etilenglicol producido.

En la ecuación (33) se está considerando que no se aprovecha la energía disponible del dietilenglicol producido, y que la energía consumida en la compresión más la que se utiliza para hacer vacío en el evaporador son despreciables respecto al consumo total.

Determinando los grados de libertad de un análisis físico, se obtuvieron seis, de los cuales se fijaron tres, la temperatura del vapor alimentado al evaporador, el vacío en el último efecto y la concentración de E.G. a la salida del sistema de evaporación.

Se seleccionaron las siguientes variables de optimización :

- 1.- La temperatura de entrada al reactor.
- 2.- La relación de agua a óxido de etileno alimentada al reactor.
- 3.- La temperatura a la salida del reactor.

Como la optimización es energética, se pierden los grados de libertad relacionados con la dimensión de los equipos. La temperatura a la entrada del reactor debe ser mayor que la temperatura a la cual la reacción comienza a ser apreciable, 85 °C. Y, el número de efectos del evaporador es tomado como variable discreta.

La elección de las variables se hizo considerando lo mencionado en el capítulo de introducción tomando en cuenta las que tienen una influencia significativa en el consumo de energía.

La optimización se llevó a cabo en las siguientes condiciones :

$$T_{VF} = 165.6 \text{ }^{\circ}\text{C} \text{ (vapor saturado de 7.23 atm).}$$

$$P_C = 0.1 \text{ atm - (vacío efectuado en el evaporador).}$$

$$W_{E.G.} = 0.77 \text{ a la salida del evaporador.}$$

Los valores que se les dió es en base a lo siguiente:

La temperatura del vapor alimentado al evaporador se eligió de manera que fuera ligeramente superior a la temperatura de alimentación del fluido de proceso. Vapor de mayor calidad a la mencionada se aprovecha mejor para producir energía eléctrica o para operar impulsores.

Las otras dos especificaciones fueron tomadas de la forma de operar el proceso (Benn¹ y Weaver¹¹).

CAPITULO IV

RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

Los resultados obtenidos se presentan de la siguiente forma :

Primero se presenta una tabla que contiene el valor que toma la función objetivo para diferentes valores de las variables de optimización. A la izquierda, para un número de efectos determinado, se encuentran las condiciones elegidas de puntos iniciales o de partida; y a la derecha, como se puede observar, se obtiene el punto óptimo al cual se llega tomando las condiciones anteriormente mencionadas.

Como el punto óptimo que se obtiene es uno solo para diferentes puntos iniciales, es probable que el óptimo encontrado sea un óptimo global.

Se deduce de la tabla que la optimización realizada de esta forma, es independiente del número de efectos en el sistema de evaporación, debido a que las condiciones en el óptimo son las mismas para cualquier número de efectos.

Posteriormente se presenta una gráfica de la función objetivo contra el número de efectos del evaporador en la que se muestra un alto consumo de energía cuando se usan uno o dos efectos, disminuyendo apreciablemente al pasar de dos a seis efectos; sin embargo un mayor número de efectos no aporta un ahorro apreciable de energía. Por lo tanto, para saber cual es el óptimo dependiendo de esta variable, es necesario hacer un análisis de costos.

Por último se muestran las tablas que contienen los resultados de la simulación del evaporador, seguidas de una hoja con los resultados de las cargas térmicas añadidas al sistema en las condiciones óptimas encontradas.

OPTIMIZACION

PUNTO INICIAL					PUNTO OPTIMO			
N	R	TER	TSR	F.O.	R	TER	TSR	F.O.
2	10	185	272.93	0.11928×10^7	17.8	185	286.43	0.74670×10^6
	10	185	296.33	0.94578×10^6				
	25	224.33	296.33	0.85903×10^6				
4	10	185	272.93	0.11101×10^7	17.8	185	286.43	0.67548×10^6
	10	185	296.33	0.88372×10^6				
	25	224.33	296.33	0.75396×10^6				
6	10	185	272.93	0.10830×10^7	17.8	185	286.43	0.65235×10^6
	10	185	296.33	0.86341×10^6				
	25	224.33	296.33	0.71928×10^6				
8	10	185	272.93	0.10699×10^7	17.8	185	286.43	0.64106×10^6
	10	185	296.33	0.85354×10^6				
	25	224.33	296.33	0.70276×10^6				

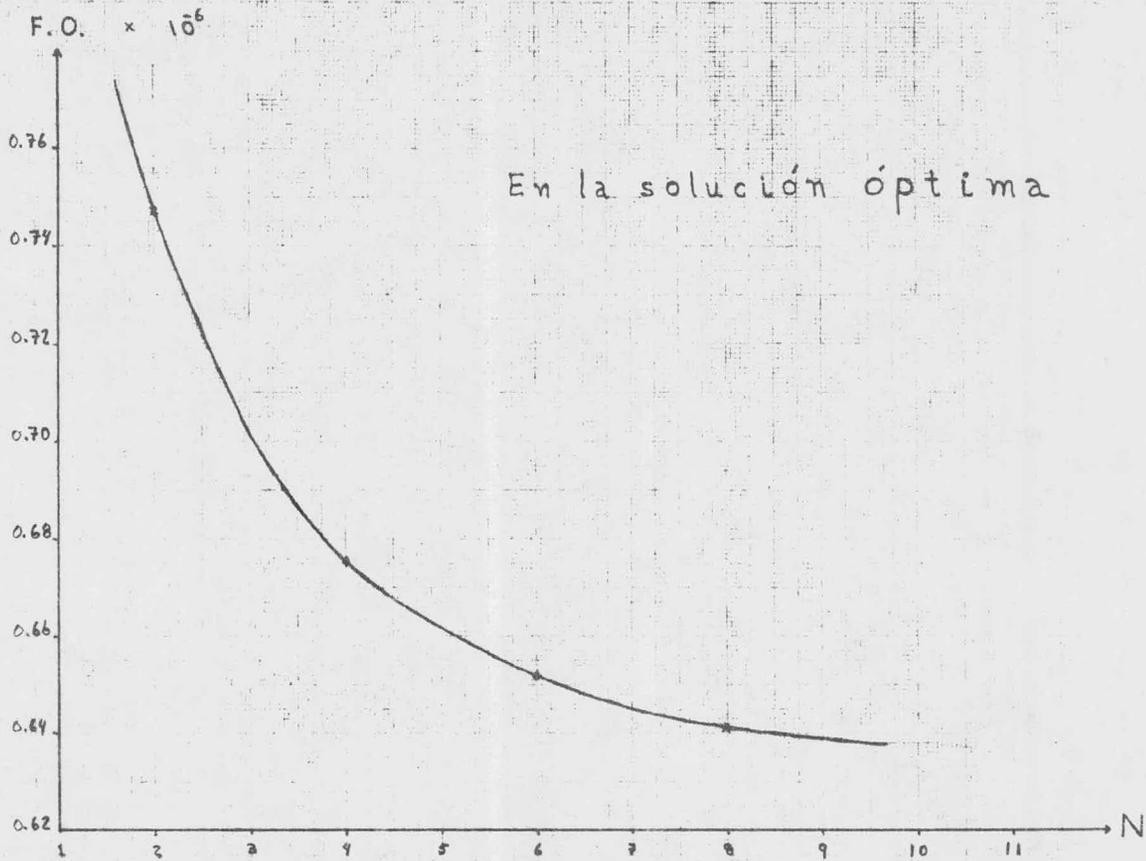
N : Número de efectos del evaporador.

R: Relación de moles de agua a óxido de etileno alimentada al reactor.

TER: Temperatura a la entrada del reactor, °F

TSR: Temperatura a la salida del reactor, °F

F.O.: Función objetivo, BTU/lb mol de E.G. producida.



Como se puede ver en la tabla anterior, las condiciones óptimas obtenidas para el reactor son las mismas para cualquier número de efectos en la evaporación.

Reactor :

R = 17.8 lbs mol de agua por lb mol de óxido de etileno alimentadas.

$$T_{ER} = 185 \text{ } ^\circ\text{F} \quad 85^\circ\text{C}$$

$$T_{SR} = 286.43 \text{ } ^\circ\text{F} \quad 141.35^\circ\text{C}$$

CON = 98.9067 % respecto al O.E.

$$V_R = 558 \text{ ft}^3$$

$$\phi = 5.0 \text{ in}$$

$$W_{E.G.} = 0.1509 \quad \text{a la salida.}$$

$$W_{D.E.G.} = 0.0149 \quad "$$

$$W_{H_2O} = 0.8342 \quad "$$

$$F = 36440.0 \quad \text{lb alimentadas / hr .}$$

Evaporador :

$$T_{VF} = 330.0 \text{ } ^\circ\text{F}$$

$$T_C = 207.0 \text{ } ^\circ\text{F}$$

$$T_F = 286.43 \text{ } ^\circ\text{F}$$

N = 2

	I	II
WE	0.2466	0.7790
WG	0.2709	0.8458
WA	0.7291	0.1542
XE	0.0890	0.5723
XG	0.0941	0.6052
XA	0.9059	0.3948
L	22297.82	7141.49
V	14142.18	15156.32
EPE	4.70	44.72
DT	27.98	45.59
TVC	330.00	297.31
T	302.02	251.72
HL	5343.30	5239.47
HV	21188.58	20677.14
REC	18425.13	36204.21
U	809.57	485.84
A	582.20	582.18
DEN	64.34	68.53
CP	1.00	0.74

$$N = 2$$

$$V_F = 14,829.31 \text{ lb / hr}$$

$$V_T = 29,298.51 \text{ "}$$

$$A_m = 582.19 \text{ ft}^2$$

$$A_T = 1,164.39 \text{ "}$$

$$ECV = 1.98$$

$$G_{H_2O} = 421,790.67 \text{ lb / hr}$$

Cargas Térmicas :

$$Q_{PC} = 3,935,520.0 \text{ BTU / hr}$$

$$Q_{VF} = 13,189,594.96 \text{ "}$$

$$Q_{MP} = 43,502,400.0 \text{ "}$$

$$Q_{SD} = 5,599,388.35 \text{ "}$$

$$Q_{TH} = 66,226,903.31 \text{ "}$$

$$Q_{TT} = 746,700.31 \text{ BTU / lb mol de E.G.}$$

$$Q_C = 14,762,673.38 \text{ BTU / hr}$$

Producción de Etilenglicol :

$$PEG = 88.6927 \text{ lb mol / hr .}$$

N = 4

	<u>I</u>	<u>II</u>	<u>III</u>	<u>IV</u>
WE	0.1840	0.2412	0.3614	0.7700
WG	0.2021	0.2649	0.3970	0.8458
WA	0.7979	0.7351	0.6030	0.1542
XE	0.0625	0.0865	0.1469	0.5723
XG	0.0661	0.0915	0.1554	0.6052
XA	0.9339	0.9085	0.8446	0.3948
L	29890.27	22800.15	15216.43	7141.49
V	6549.73	7090.12	7583.72	8074.94
EPE	3.30	4.57	7.77	44.72
DT	13.03	11.77	14.38	23.46
TVC	330.00	313.66	297.33	275.19
T	316.97	301.90	282.95	251.72
HL	5578.34	5334.42	5066.15	5239.47
HV	21281.18	21188.66	21063.28	20677.14
REC	9044.70	8092.83	9927.80	19413.69
U	855.31	813.05	729.25	485.84
A	616.50	616.63	616.79	616.68
DEN	63.84	64.30	65.26	68.53
CP	1.03	1.00	0.94	0.74

$$N = 4$$

$$V_F = 7,727.63 \quad \text{lb / hr}$$

$$V_T = 29,298.51 \quad "$$

$$A_m = 616.66 \quad \text{ft}^2$$

$$A_T = 2,466.61 \quad "$$

$$ECV = 3.79$$

$$G_{H_2O} = 224,720.39 \quad \text{lb / hr}$$

Cargas Térmicas :

$$Q_{PC} = 3,935,520.0 \quad \text{BTU / hr}$$

$$Q_{VF} = 6,873,167.33 \quad "$$

$$Q_{MP} = 43,502,400.0 \quad "$$

$$Q_{SD} = 5,599,388.35 \quad "$$

$$Q_{TH} = 59,910,475.68 \quad "$$

$$Q_{TT} = 675,483.35 \quad \text{BTU / lb mol de E.G.}$$

$$Q_C = 7,865,213.59 \quad \text{BTU / hr}$$

Producción de Etilenglicol :

$$PEG = 88.6927 \quad \text{lb mol / hr .}$$

N = 6

	I	II	III	IV	V	VI
WE	0.1695	0.1958	0.2352	0.3001	0.4258	0.7700
WG	0.1862	0.2150	0.2583	0.3296	0.4677	0.8458
WA	0.8138	0.7850	0.7417	0.6704	0.5323	0.1542
XE	0.0568	0.0673	0.0839	0.1143	0.1864	0.5723
XG	0.0601	0.0711	0.0887	0.1208	0.1972	0.6052
XA	0.9399	0.9289	0.9113	0.8792	0.8028	0.3948
L	32441.50	28089.79	23383.69	18325.36	12915.82	7141.49
V	3998.50	4351.71	4706.10	5058.32	5409.54	5774.32
EPE	3.10	3.78	4.84	6.72	11.00	44.72
DT	7.22	5.52	6.30	7.33	9.01	13.45
TVC	330.00	319.67	310.37	299.24	285.18	265.17
T	322.78	314.15	304.08	291.91	276.17	251.72
HL	5684.93	5547.39	5393.07	5219.74	5030.50	5239.47
HV	21315.21	21262.53	21199.47	21119.90	21006.56	20677.14
REC	6237.73	4734.50	5404.31	6321.73	7954.07	14095.79
U	863.57	840.10	806.87	755.93	667.77	485.84
A	772.82	773.09	773.60	773.60	773.41	773.22
DEH	63.76	64.02	64.39	64.97	66.03	68.53
CP	1.04	1.02	1.00	0.96	0.89	0.74

$$N = 6$$

$$V_F = 5,420.82 \quad \text{lb / hr}$$

$$V_T = 29,298.51 \quad "$$

$$A_m = 773.29 \quad \text{ft}^2$$

$$A_T = 4,639.74 \quad "$$

$$ECV = 5.40$$

$$G_{H_2O} = 160,695.73 \quad \text{lb / hr}$$

Cargas Térmicas :

$$Q_{PC} = 3,935,520.0 \quad \text{BTU / hr}$$

$$Q_{VF} = 4,821,428.47 \quad "$$

$$Q_{MP} = 43,502,400.0 \quad "$$

$$Q_{SD} = 5,599,388.35 \quad "$$

$$Q_{TH} = 57,858,736.81 \quad "$$

$$Q_{TT} = 652,350.24 \quad \text{BTU / lb mol de E.G.}$$

$$Q_C = 5,624,350.56 \quad \text{BTU / hr}$$

Producción de Etilenglicol :

$$PEG = 88.6927 \quad \text{lb mol / hr .}$$

N = 8

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
WE	0.1632	0.1791	0.2002	0.2295	0.2725	0.3410	0.4667	0.7700
WG	0.1792	0.1967	0.2199	0.2521	0.2993	0.3746	0.5126	0.8158
WA	0.8208	0.8033	0.7801	0.7479	0.7007	0.6254	0.4874	0.1542
XE	0.0544	0.0606	0.0671	0.0814	0.1009	0.1356	0.2148	0.5723
XG	0.0575	0.0641	0.0730	0.0861	0.1067	0.1434	0.2272	0.6052
XA	0.9425	0.9359	0.9270	0.9139	0.8933	0.8566	0.7728	0.3948
L	33698.43	30709.57	27464.89	23957.01	20179.28	16124.69	11783.24	7141.49
V	2741.57	2988.86	3244.67	3507.89	3777.73	4054.59	4341.44	4641.75
EPE	2.97	3.41	4.00	4.84	6.13	8.35	13.08	44.72
DT	4.18	2.73	3.06	3.45	3.93	4.57	5.61	7.97
TVC	330.00	322.85	316.70	309.64	301.35	291.30	278.38	259.69
T	325.82	320.11	313.64	306.19	297.43	286.73	272.77	251.72
HL	5738.57	5648.56	5548.71	5437.41	5312.62	5172.31	5022.39	5239.47
HV	21333.18	21298.40	21258.40	21211.46	21154.53	21081.38	20975.52	20677.14
REC	4902.12	3176.30	3563.32	4020.29	4594.84	5406.21	6849.74	11414.85
U	868.81	853.35	833.68	807.80	772.12	719.72	635.70	485.84
A	1050.98	1051.24	1052.11	1052.32	1052.21	1051.98	1051.74	1051.57
DEN	63.71	63.88	64.10	64.39	64.80	65.41	66.44	68.53
CP	1.05	1.03	1.02	1.00	0.97	0.93	0.87	0.74

$$N = 8$$

$$V_F = 4,295.08 \quad \text{lb / hr}$$

$$V_T = 29,298.51 \quad "$$

$$A_m = 1,051.74 \quad \text{ft}^2$$

$$A_T = 8,414.15 \quad "$$

$$ECV = 6.82$$

$$G_{H_2O} = 129,176.88 \quad \text{lb / hr}$$

Cargas Térmicas :

$$Q_{PC} = 3,935,520.0 \quad \text{BTU / hr}$$

$$Q_{VF} = 3,820,164.33 \quad "$$

$$Q_{MP} = 43,502,400.0 \quad "$$

$$Q_{SD} = 5,599,388.35 \quad "$$

$$Q_{TH} = 56,857,472.68 \quad "$$

$$Q_{TT} = 641,061.11 \quad \text{BTU / lb mol de E.G.}$$

$$Q_C = 4,521,190.66 \quad \text{BTU / hr}$$

Producción de Etilenglicol :

$$PEG = 88.6927 \quad \text{lb mol / hr .}$$

Conclusiones :

Analizando los resultados se deduce lo siguiente:

1.- El reactor óptimo es aquel que tiende a :

- a) Tener una conversión máxima.
- b) Operar con la mínima temperatura a la entrada.
- c) Operar con la máxima temperatura a la salida.
- d) Operar con una relación de flujos, de agua a óxido de etileno máxima a la entrada.

Lo anterior significa, que debe ser un reactor que convierta todo el óxido de etileno, y que el producto contenga la menor cantidad posible de poliglicoles con el mayor contenido energético.

2.- A medida que aumenta el número de efectos del evaporador la carga térmica total disminuye, y este descenso cada vez es menor.

3.- Al aumentar el número de efectos, las cargas térmicas del condensador y del vapor alimentado al evaporador disminuyen, y lo hacen considerablemente al cambiar de dos a cuatro efectos.

4.- La economía del vapor se mejora considerablemente al aumentar el número de efectos.

5.- El área de transferencia de calor del evaporador aumenta en forma directamente proporcional al número de efectos.

Como conclusión final se tiene que :

Los resultados del estudio muestran que la relación óptima de agua a óxido de etileno y el diseño del reactor son independientes del sistema de evaporación, Y que el consumo de energía disminuye apreciablemente al pasar de 2 a 6 efectos; sin embargo un número mayor de efectos no aporta un ahorro apreciable de energía.

A P E N D I C E .

A 1.- Propiedades físicas de las soluciones líquidas de etilengli-
col- agua.

Se correlacionaron los datos obtenidos de las gráficas de -
Gallant⁵, obteniendo las siguientes funciones :

1.- Capacidad Calorífica a Presión Constante

$$C_p = 8.8657346 \times 10^{-4} T - 0.408 W_{E.G.} + 0.9755083$$

$$\text{Error máximo} = \pm 1.27 \%$$

$$\text{Error promedio} = \pm 1 \%$$

Rango de temperatura : 20-140 °C

T en °C

2.- Densidad

$$\rho = 69.65 W_{E.G.} + 62.37 W_{H_2O}$$

$$\text{Error máximo} = 4.1 \%$$

$$\text{Error promedio} = 2 \%$$

No sensible a la temperatura en el rango de 20 - 120 °C

3.- Viscosidad

$$\mu = (0.19077 + 0.41202763 W_{E.G.}) \left(30.0 \frac{5.9938713 + 30.0 W_{E.G.}}{T} \right)$$

$$\text{Error máximo} = \pm 20 \%$$

$$\text{Error promedio} = \pm 7.7 \%$$

Rango de temperatura : 40 - 120 °C

T en °C

4.- Conductividad Térmica

$$k = W_{E.G.} k_{E.G.} + W_{H_2O} k_{H_2O} - 0.15887 W_{E.G.} W_{H_2O}$$

en donde

$$k_{E.G.} = (7.25 \times 10^{-4} - 1.8 \times 10^{-7} T) 241.9$$

$$k_{H_2O} = (5.6621 \times 10^{-4} + 2.9333 \times 10^{-6} T) 241.9$$

$$\text{Error máximo} = \pm 5.7 \%$$

$$\text{Error promedio} = \pm 4.4 \%$$

Rango de temperatura : 313 - 413 °K

T en °K

A2.- Cálculo de la Entalpia

1.- Cálculo de la entalpia de la solución líquida.

Se toma como estado de referencia :

- a) Agua líquida pura a 32°F , $H_{\text{H}_2\text{O}} = 0$
 b) E.G. líquido puro a 32°F , $H_{\text{E.G.}} = 0$

Calor de Disolución.

El calor de disolución (q_s) es función de la temperatura y de la concentración.

En las tablas críticas internacionales se encontró. que cuando se mezclan 37 partes de E.G. con 63 partes de agua. (en peso) a 62.6°F , el calor de disolución es - 11.7 BTU por lb de solución. Obteniendo la siguiente función :

$$q_s \Big|_{62.6^{\circ}\text{F}} = - 94.0134 X_{\text{E.G.}} X_{\text{H}_2\text{O}} \text{ ----- (1)}$$

La entalpia molar (H) de una solución binaria líquida a la temperatura T y presión P está dada por la siguiente expresión

$$H = (x_2 h_2 + x_1 h_1 + q_s)_{T_M} + \int_{T_M}^T C_{P_M} dT + \int_{P_M}^P \left(\frac{dH}{dP}\right)_T dP \text{ ----- (2)}$$

A presiones moderadas el último término de la ecuación (2) es despreciable para líquidos. Por lo tanto para el sistema - -

E.G. - Agua :

$$H = \left[X_{\text{E.G.}} h_{\text{E.G.}} + (1 - X_{\text{E.G.}}) h_{\text{H}_2\text{O}} + q_s \right]_{62.6} + \int_{62.6}^T C_{P_M} dT \text{ - (3)}$$

en donde

$$\begin{aligned}
 h \left|_{\text{E.G.}}^{62.6^{\circ}\text{F}} \right. &= \int_{T_{\text{ref.}}}^{62.6} C_{p_{\text{E.G.}}} dT = \int_{32}^{62.6} (31.212 + 2.586 \times 10^{-2} T) dT \\
 &= 31.212 (62.6 - 32) + 1.293 \times 10^{-2} (62.6^2 - 32^2) \\
 &= 992.5165 \frac{\text{B T U}}{\text{lb mol}}
 \end{aligned}$$

y la del agua es

$$\begin{aligned}
 h \left|_{\text{H}_2\text{O}}^{62.6^{\circ}\text{F}} \right. &= \int_{T_{\text{ref.}}}^{62.6} C_{p_{\text{H}_2\text{O}}} dT = \overline{C}_{p_{\text{H}_2\text{O}}} (62.6 - T_{\text{ref.}}) \\
 &= 18 (62.6 - 32) = 550.8 \frac{\text{B T U}}{\text{lb mol}}
 \end{aligned}$$

sustituyendo en (2)

$$H = \left[X_{\text{E.G.}} (992.5165) + (1 - X_{\text{E.G.}}) 550.8 + q_s \right]_{62.6^{\circ}\text{F}} + \int_{62.6}^T C_{p_M} dT \quad (4)$$

Usando la correlación obtenida para el C_{p_M} (ver apéndice 1) cálculo el último término de la ec. (3)

$$\int_{62.6}^T C_{p_M} dT = \int_{62.6}^T (8.8657346 \times 10^{-4} T - 0.408 W_{\text{E.G.}} + 0.9755083) dT$$

integrando y agrupando términos comunes

$$\begin{aligned}
 \int_{62.6}^T C_{p_M} dT &= (0.9755083 - 0.408 W_{\text{E.G.}})(T - 17) + 4.4328673 \times 10^{-4} \\
 &(T^2 - 289) \text{-----} \quad (5)
 \end{aligned}$$

en donde T está en $^{\circ}\text{C}$

Así, la entalpia se calcúla con las ecuaciones (1) (4) (5).

2.- Cálculo de la entalpia del vapor.

Como en las condiciones en las que se trabaja la volatilidad relativa del agua respecto al E.G. es aproximadamente igual a 25, lo que hace suponer que en la fase vapor solo hay agua. Por lo tanto la entalpia del vapor será solo la del agua

$$H_V = H \left|_{H_2O(l)}^T + \lambda \left|_{H_2O}^T \text{-----} \quad (6)$$

Considerando que es un vapor sobrecalentado.

$$H_V = H \text{ vapor sat. a } T_{vc} + \text{sobrecalentamiento}$$

$$\begin{aligned} H_V &= H \left|_{H_2O(l)}^{T_{vc}} + \lambda \left|_{H_2O}^{T_{vc}} + \text{sobrecalentamiento} \\ &= H \left|_{H_2O(l)}^{T_{vc}} + \lambda \left|_{H_2O}^{T_{vc}} + \int_{T_{vc}}^T C_{p,H_2O}(g) dT \end{aligned}$$

El cambio de entalpia debido al sobrecalentamiento es pequeño comparado con la entalpia del vapor, por lo que el último término se desprecia.

$$H_V \left|^T = H \left|_{H_2O(l)}^{T_{vc}} + \lambda \left|_{H_2O}^{T_{vc}} \text{-----} \quad (7)$$

en donde T_{vc} es la temperatura a la que condensa el vapor.

Calor latente de vaporización.

El calor latente de vaporización del agua se calcula usando las siguientes expresiones :

$$\lambda = 20,080.9 - 12.337 T ; \quad T \geq 212 ^\circ\text{F}$$

$$\lambda = 19,713.24 - 10.535 T ; \quad T < 212 ^\circ\text{F}$$

en donde T está en $^\circ\text{F}$.

A3 .- Cálculo del Calor de Reacción



Los siguientes datos fueron obtenidos de Lange⁶

$$\Delta H_{f, \text{O.E.}}^{\circ} = -18.6 \text{ Kcal / g mol}$$

$$\Delta H_{f, \text{H}_2\text{O}}^{\circ} = -68.317 \text{ Kcal / g mol}$$

$$\Delta H_{f, \text{E.G.}}^{\circ} = -107.91 \text{ Kcal / g mol}$$

$$\Delta H_{f, \text{D.E.G.}}^{\circ} = -136.22 \text{ Kcal / g mol}$$

$$C_{p, \text{O.E.}}(1) = 19.9826 + 0.042 T$$

$$C_{p, \text{H}_2\text{O}}(1) = 17.01 + 0.01057 T$$

$$C_{p, \text{E.G.}}(1) = 33.356 + 0.0701 T$$

$$C_{p, \text{D.E.G.}}(1) = 55.11 + 0.1060 T$$

en donde

T está en °C y Cp en cal / g mol °C.

Obtención de ΔH_U a la temperatura T :

$$\begin{aligned} \Delta H_U^{\circ} &= \sum \Delta H_P^{\circ} - \sum \Delta H_R^{\circ} \\ &= -107.91 - (-18.6 - 68.317) = -20.993 \frac{\text{Kcal}}{\text{g mol}} \end{aligned}$$

$$\Delta H_U = \Delta H_U^{\circ} + \int_{T_0}^T \Delta C_{p_U} dT \text{ ----- (1)}$$

$$\begin{aligned} \Delta C_{p_U} &= C_{p_{E.G.}} - (C_{p_{O.E.}} + C_{p_{H_2O}}) \\ &= -3.637 + 0.0175 T, \text{ sustituyendo en (1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_U &= \Delta H_U^{\circ} + \int_{25}^T (-3.637 + 0.0175 T) dT \\ &= \Delta H_U^{\circ} + \left[-3.637 (T-25) + 0.00875 (T^2 - 625) \right] \text{---- (2)} \end{aligned}$$

Obtención de ΔH_V a la temp. T :

$$\begin{aligned} \Delta H_V^{\circ} &= \sum \Delta H_p^{\circ} - \sum \Delta H_r^{\circ} \\ &= -136.22 - (-107.91 - 18.6) = -9.71 \frac{\text{Kcal}}{\text{g mol}} \\ &= -9,710.0 \frac{\text{cal}}{\text{g mol}} \end{aligned}$$

$$\Delta H_V = \Delta H_V^{\circ} + \int_{T_0}^T \Delta C_{p_V} dT \text{ ----- (3)}$$

$$\begin{aligned} \Delta C_{p_V} &= C_{p_{D.E.G.}} - (C_{p_{E.G.}} + C_{p_{O.E.}}) \\ &= 1.771 - 0.0061 T, \text{ sustituyendo en (3)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_V &= \Delta H_V^{\circ} + \int_{25}^T (1.771 - 0.0061 T) dT \\ &= \Delta H_V^{\circ} + \left[1.771 (T-25) - 0.00305 (T^2 - 625) \right] \\ &= -9,710.0 + 1.771 (T-25) - 0.00305 (T^2 - 625) \text{---- (4)} \end{aligned}$$

en donde :

T esta en $^{\circ}\text{C}$

ΔH está en $\frac{\text{cal}}{\text{g mol}}$

Para tener el ΔH en unidades de $\frac{B T U}{lb mol}$, multiplico las ecuaciones (2) y (4) por 1.8 :

$$\Delta H_u = -37,787.4 - 6.5466 (T-25) + 0.01575 (T^2 - 625) \text{ ---- (5)}$$

$$\Delta H_v = -17,478.0 + 3.1878 (T-25) - 0.00549 (T^2 - 625) \text{ ---- (6)}$$

en donde,

T esta en $^{\circ}C$.

NOMENCLATURA

- A_i : Area de transferencia de calor del efecto i del evaporador, ft^2 .
- A_m : Area media de transferencia de calor del evaporador, ft^2 .
- A_T : Area total de transferencia de calor del evaporador, ft^2 .
- C_{Ao} : Concentración inicial de O.E. en el reactor, lb mol/ lb -
alimentada .
- $C_{E.G.}$: Concentración de E.G. en el reactor, lb mol/ lb alimen-
tada .
- $C_{O.E.}$: Concentración de O.E. en el reactor, lb mol/lb alimentada
- C_p : Capacidad calorifica a presión constante de la solución -
 $BTU / lb ^\circ F$.
- ECV : Economía del vapor en el evaporador, lb evaporadas / lb de
vapor alimentadas.
- EPE : Elevación en el punto de ebullición de la solución de E. -
G. - H_2O , $^\circ F$.
- F : Gasto alimentado al reactor, lb / hr.
- $F.O.$: Función objetivo, $BTU / lb mol$ de E.G.
- G_{H_2O} : Gasto de agua empleada en el condensador, lb / hr.
- H_i : Entalpia del vapor generado en el efecto i del evaporador,
 $BTU / lb mol$.
- L_i : Gasto de liquido que abandona el efecto i del evaporador,
lb / hr.
- N : Número total de efectos del evaporador.
- PEG : Producción de etilenglicol, lb mol / hr .
- P_i^o : Presión de vapor del componente i, lb / in^2 .

- Q_{MP} : Carga térmica equivalente al oxido de etileno alimentado, BTU / hr.
- Q_{PC} : Carga termica utilizada en el precalentador de la alimentación del reactor, BTU / hr.
- Q_{RA} : Carga termica suministrada al reboiler de la columna de destilación de agua, BTU / hr.
- Q_{RE} : Carga termica suministrada al reboiler de la columna de destilación de etilenglicol, BTU / hr.
- Q_{SD} : Carga termica en la separación por destilación, BTU / hr.
- Q_{TH} : Carga termica total suministrada al sistema, BTU / hr.
- Q_{TT} : Carga termica total suministrada al sistema por lb mol de etilenglicol producido, BTU / lb mol de E.G.
- R_i : Recirculación en el efecto i del evaporador, lb/ hr.
- T_C : Temperatura en el condensador, °F .
- T_i : Temperatura en el efecto i del evaporador, °F.
- T_{VC_i} : Temperatura de condensación en el efecto i del evaporador, °F .
- T_{VF} : Temperatura del vapor alimentado al primer efecto del evaporador, °F .
- V_F : Vapor alimentado al primer efecto del evaporador, lb/hr.
- V_i : Vapor generado en el efecto i del evaporador, lb / hr.
- V_R : Volumen del reactor, ft³.
- V_T : Vapor total generado en el evaporador, lb/hr.
- W_i : Fracción en peso del componente i.
- X_i : Fracción mol del componente i en la fase liquida.
- Y_i : Fracción mol del componente i en la fase vapor.

- h_{c_i} : Entalpia del condensado que sale del efecto i del evaporador, BTU /lb mol.
- h_i : Entalpia del liquido en el efecto i del evaporador, BTU/lb mol.
- k_i : Conductividad termica del componente i, BTU /hr-ft- $^{\circ}$ F.
- k : Conductividad termica de la solución de etilenglicol-agua, BTU / hr-ft- $^{\circ}$ F.
- k_u : Constante de velocidad de la reacción de formación del etilenglicol, hr $^{-1}$.
- k_v : Constante de velocidad de la reacción de formación de dietilenglicol, ft 3 / lb mol-hr.
- q_s : Calor de disolución del sistema etilenglicol-agua, BTU/lb de solución.
- r_u : Velocidad de la reacción de formación de etilenglicol, lb mol/hr ft 3 .
- r_v : Velocidad de la reacción de formación de dietilenglicol, lb mol / hr- ft 3 .
- u : lb mol de oxido de etileno reaccionadas para formar etilenglicol, por libra alimentada, lb mol/lb alimentada.
- v : lb mol de oxido de etileno reaccionadas para formar dietilenglicol, por lb alimentada, lb mol/ lb alimentada.
- α_{ij} : Volatilidad relativa de i con respecto a j.
- ΔH_u : Calor de reacción de formación de etilenglicol, cal/g mol.
- ΔH_v : Calor de la reacción de formación de dietilenglicol, cal/g mol.

ΔV_r : Incremento de volumen del reactor, ft^3 .

μ : Viscosidad de la solución de etilenglicol-agua, centipoises.

λ_i : Calor latente de vaporización del componente i, BTU/ lb mol.

λ_c : Calor latente de vaporización del agua a la temperatura de el condensador, BTU/ lb mol .

λ_{VF} : Calor latente de vaporización del vapor alimentado al evaporador, BTU/ lb mol .

ϕ : Diametro del reactor, in .

ρ : Densidad de la solución de etilenglicol-agua, lb/ ft^3

Equivalentes :

DEN = ρ

DT = ΔT

HL = h

HV = H

REC = R

TER = T entrada al reactor

TSR = T salida del reactor

VIS = μ

WE = $W_{E.G.}$

WG = W_{Glicoles}

WA = $W_{\text{H}_2\text{O}}$

XE = $X_{E.G.}$

XG = X_{Glicoles}

XA = $X_{\text{H}_2\text{O}}$

BIBLIOGRAFIA.

- 1.- Benn - "Ethylene and Industrial Derivatives".
- 2.- Othmer & Thakar - "Glycol Production - Hydration of Ethylene Oxide" - 50,9,(1235-1244). Sept.1958 - I.E.C.
- 3.- Hougen & Watson - "Chemical Process principles - Part 3 - Kinetics & Catalysis" - pag. 869.
- 4.- Ju-Chin-Chu - "Enthalpy - Concentration Diagram" - 42 , 2 , (373 - 375). Feb. 1950 - - I. E. C.
- 5.- Gallant - "Physical Properties of Hydrocarbons" - Part 13 - Ethylene Glycols - 46,4 (183 - 192). April 1967 - Hydrocarbon Processing.
- 6.- Lange - "Lange's Handbook of Chemistry" - - pag. 9-66.
- 7.- Curme & Johnston - "Glycols"
- 8.- Parker & Prados - "Analog Computer Design of an - Ethylene Glycol System" - 60, 6 (74 - 78). June 1964 - Chemical Eng. Progr.

- 9.- Coles & Popper - "Vapor - Liquid Equilibria" -
- 42,7, (1434 - 1438). July -
1950 - I. E. C.
- 10.- Miller & Corrigan - "Ethylene Glycol Reactor -
Put To Test"- 46,4 (176- 178)
April 1967 - Hydrocarbon Pro-
cessing.
- 11.- Weaver & Smart - "Glycols and Ethanolamines" -
51,8, (894 - 900). August 1959
- I. E. C.
- 12.- Ballard - "How to Operate a Glycol Plant"
-45,6, (171 - 180). June 1966
- Hydrocarbon Processing.
- 13.- Hess & Tilton - "Ethylene Oxide" - 42,6, (1251 -
1258). June 1950 - I. E. C.