

Simulación del proceso de Cloración del Propeno utilizando el software Aspen-Hysys

Simulation of the propene chloration using Aspen-Hysys

Yoisel Bueno Broteron, Reinaldo Ugalde Lima, Jorge Luis Pérez Amores, Luis E. Arteaga-Pérez*.
Dpto Ing. Química. Facultad de Química-Farmacia. Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas. Carretera a Camajuaní, km 5½, Santa Clara, Villa Clara, Cuba.
***luiseap@uclv.edu.cu**

Resumen

En el trabajo se realiza la simulación del proceso de cloración de propeno utilizando el software HYSYS, empleando el paquete termodinámico Peng-Robinson. La simulación se implementa con datos reales tomados de la literatura y el diseño de la columna de destilación se realiza partiendo de un modelo de columna Fenske-Underwood-Gilliliand. Además se realizan casos de estudio donde se valoran las posibilidades de utilizar los modelos de reactor adiabático o isotérmico en el proceso y modificar la relación de alimentación Cloro/Propeno.

Abstract

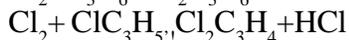
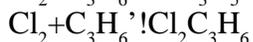
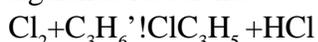
In the work it is carried out the simulation of the process of chloration of the propene using the software HYSYS, using the thermodynamic package Peng-Robinson. The simulation is implemented with taken real data of the literature and the design of the distillation column is carried out leaving of a column model Fenske-Underwood-Gilliliand. They are also carried out cases of study where the possibilities are valued of using the models of reactor adiabatic or isothermic in the process and to modify the feeding relationship Chlorine /Propene.

Introducción

El cloropropeno es un líquido que varía de incoloro a color paja o ámbar, con olor fuerte, picante, dulce e irritante, similar al cloroformo. Es miscible en hidrocarburos, disolventes halogenados, ésteres y cetona y es soluble en tolueno, acetona y octano. Este compuesto es estable bajo condiciones normales; sin embargo, es inflamable y puede encenderse en presencia de oxidantes, llamas, chispas y calor. Sus vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire. Al arder produce gases irritantes, tóxicos y corrosivos, incluyendo al cloruro de hidrógeno.

Es moderadamente tóxico para algas (marinas y de agua dulce), crustáceos y peces, pero altamente tóxico para las plantas. En los suelos altera el ciclo del nitrógeno al reducir la oxidación de amonio, cuyos niveles aumentan a la vez que disminuyen los niveles de nitratos. Además, en algunos suelos disminuye temporalmente (días) la abundancia de hongos y la actividad enzimática microbiana.

Este compuesto puede obtenerse a partir de las siguientes reacciones:



Este trabajo tiene como **objetivo general** la simulación de un proceso químico para la obtención de cloropropeno a partir de cloro y propeno utilizando el software Hysys.

Como **objetivos específicos** se tienen los siguientes:

Ø Simular el proceso de cloración de propeno utilizando datos reales en la corriente de alimentación.

Ø Diseño de una columna de destilación a partir de la base una columna short cut.

Ø Realizar casos de estudio que nos permitan conocer las relaciones establecidas entre variables del proceso fundamentales.

Desarrollo

La simulación del proceso de obtención del cloropropeno empleando el software Hysys consta de los siguientes equipos: un mezclador, un compresor, un calentador, un reactor de mezcla perfecta adiabático, un enfriador y una columna de destilación. Se utiliza el paquete termodinámico

Peng Robinson siendo este el más adecuado cuando se trabaja con mezcla de hidrocarburos.

Breve descripción del proceso.

En una planta de cloración de propeno (C_3H_6) reacciona cloro con propeno para producir Cloruro de Propeno (ClC_3H_5), 1,2 Dicloro Propano ($\text{Cl}_2\text{C}_3\text{H}_6$) y 2,3 Dicloro Propeno ($\text{Cl}_2\text{C}_3\text{H}_4$). 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 1**. La corriente de alimentación ingresa al reactor, que opera a una presión de 73.5 psia, se mantiene a 800 °F y tiene un volumen de 10 ft³. Las reacciones ocurren en fase vapor. Los productos del reactor se enfrían a 50 °F. El intercambiador de calor tiene una caída de presión de 0.3 psi. La corriente que sale del enfriador ingresa a una columna de destilación que principalmente separa los compuestos reactivos de los compuestos clorados obtenidos como producto 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 (Tabla 3). 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 caída de presión de 0.2 psi mientras que la presión en el rehervidor es de 27 psia. La composición molar de Propeno en el producto de tope es de 92 % mientras que la composición de cloruro de propeno en la corriente de fondo, producto formado por los propilenos clorados, asciende al 65%.

La información cinética relativa a las reacciones químicas se indica en la **Tabla 2**.

Tabla 1	Alimentación
Temperatura(°F)	128
Presión(psia)	88
Flujo molar(lbmol/hr)	1310
Flujo molar Cl ₂ (lbmol/hr)	106
Flujo molar C ₃ H ₆ (lbmol/hr)	1186
Flujo molar ClC ₃ H ₅ (lbmol/hr)	18

Tabla 1. Condiciones y composición de la corriente de alimentación

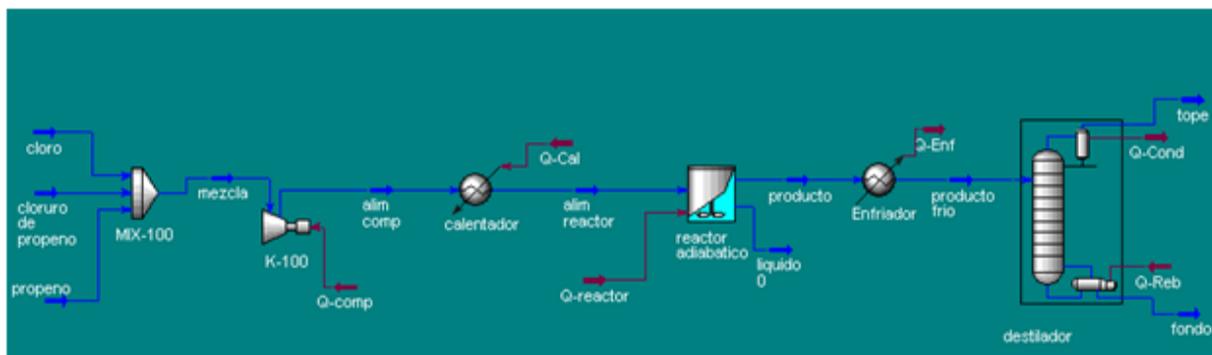
Tabla 2. Datos cinéticos sobre la reacción química.

$Cl_2 + C_3H_6 \rightarrow ClC_3H_5 + HCl$	$r = 2.1 * 10^{11} e^{\left(\frac{-27009.6}{RT}\right)} (C Cl_2)(C C_3 H_6)$
$Cl_2 + C_3H_6 \rightarrow Cl_2 C_3H_6$	$r = 1.19 * 10^7 e^{\left(\frac{-6811.98}{RT}\right)} (C Cl_2)(C C_3 H_6)$
$Cl_2 + ClC_3H_5 \rightarrow Cl_2 C_3H_4 + HCl$	$r = 4.69 * 10^{14} e^{\left(\frac{-42300}{RT}\right)} (C Cl_2)(C ClC_3 H_5)$
<i>r. [lbmol/ft³hr], energía de activación: [BTU/lbmol]</i>	

Tabla 3. Modelo de columna de destilación shortcut.

Presión de tope (psia)	20
Presión de fondo(psia)	27
Fracción molar del componente clave pesado en el tope	0.014
Fracción molar del componente clave liviano en el fondo	0.004
Relación de reflujo	5

Diagrama de simulación



Los resultados parciales y las condiciones de las corrientes de entrada y salida para cada equipo que se obtuvieron durante la simulación del caso base fueron los siguientes:

Tabla 4. Datos de las corrientes de materiales

Nombres	Fracción del vapor	Temperatura (°C)	Presión (kPa)	Flujo molar(kmol/h)
Mezcla	1	48.84	606.7	594.2
Alim. Comp	1	38.83	508.8	594.2
Alim. Reactor	1	426.7	506.8	594.2
Producto	1	474.4	506.8	592.3
Producto frío	1	10	504.7	592.3
Tope	1	-30.21	137.9	572.2
Fondo	0	53.25	186.2	19.71

Tabla 5. Composición molar de algunas corrientes (fracción mol)

Nombre	Cl ₂	C ₃ =	2ClC ₃ =	1.2ClC ₃	2.3ClC ₃ =	HCl
Mezcla	0.08	0.905	0.0137			
Producto	0.04	0.875	0.035	0.0032	0.0086	0.141
Tope	0.041	0.905	0.014			0.04
Fondo			0.64	0.097	0.26	

Tabla 6. Flujos caloríficos de las corrientes de energía

Nombre	Símbolo	Valor (kJ/h)
Compresor	Q comp	-3.426*10 ⁵
Calentador	Q cal	2.094*10 ⁷
Reactor adiabático	Q adiab	0
Reactor isotérmico	Q isot	-6.311*10 ⁷
Enfriador	Q enf	2.6*10 ⁷
Condensador	Qcond	6. 2*10 ⁷
Rehervidor	Q reb	6.1*10 ⁷

Tabla 7. Datos obtenidos para el diseño de la columna a partir del modelo Short-Cut:

Nombre	Valor
Componente clave liviano:	propeno (propene).
Componente clave pesado:	cloruro de propeno (2ClC ₃ =).
Relación de reflujo externa:	5
Relación de reflujo mínima:	0.066
Temperatura en el condensador	-35.5°C
Temperatura en el rehervidor:	54.21°C
Mínimo número de platos	4.398 ≈ 5
Número real de platos:	4.923 ≈ 5
Plato óptimo de alimentación	1.876 ≈ 2

Casos de estudio:

1- Influencia de la T alim a los reactores en la₃= en el producto salida de los reactores. El intervalo de temperaturas evaluado °C reportado por (Macy, 1992) para la reacción de cloración del propileno.

Reactor adiabático:

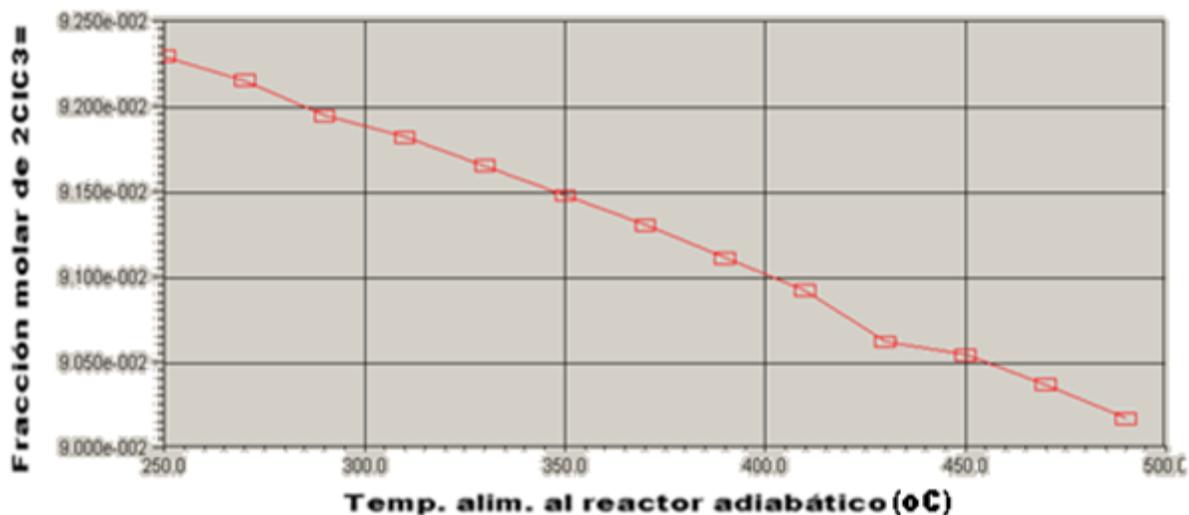


Fig. 1 Influencia de la T alim al reactor adiabático₃= en el producto de salida.

Como se demuestra a medida que se aumenta la temperatura de alimentación al reactor adiabático la composición del cloropropeno va disminuyendo en la corriente de salida, por lo que es necesario operar a la $T=250^{\circ}\text{C}$ y se alcanzaría una composición de cloropropeno de $X=0.0923$ a la salida del reactor y se ahorraría vapor, disminuyendo los costos de operación.

Reactor isotérmico:

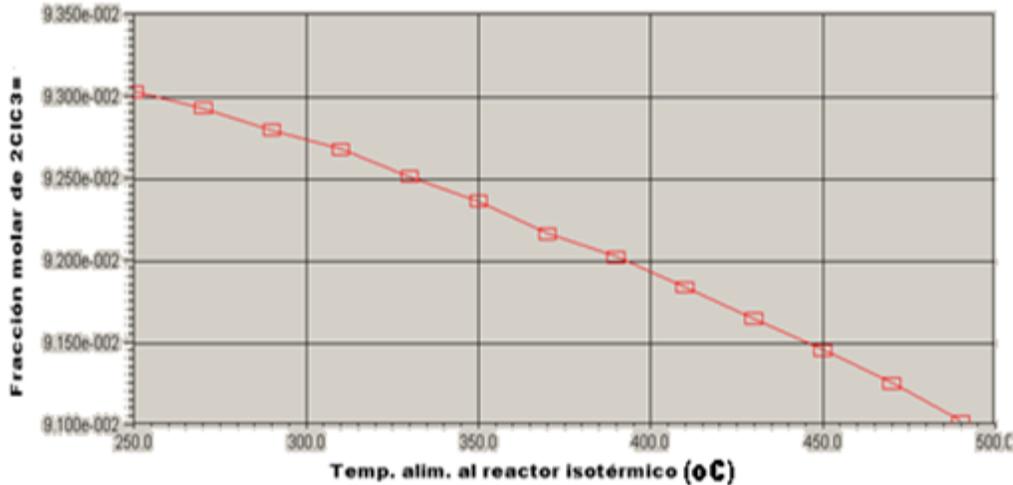


Fig. 2 Influencia de la T alim al reactor isotérmico en la composición de $2\text{CIC}_3=$ en el producto de salida.

Como se demuestra a medida que se aumenta la temperatura de alimentación al reactor isotérmico, la composición del cloropropeno va disminuyendo en la corriente de salida. Esto se debe a que las reacciones estudiadas son exotérmicas y según el principio de Le Chatelier-Braun, a medida que aumenta la T, el equilibrio se desplaza hacia los reactantes, por lo que va disminuyendo la cantidad

de cloropropeno en la corriente de salida del reactor. En este caso se obtiene una mayor composición de cloropropeno a la salida ($X=0.093$) a una temperatura de 250°C , siendo esta mucho menor que la de trabajo ($T=800^{\circ}\text{F}=426.7^{\circ}\text{C}$), lo que significaría el ahorro de vapor y 3015kW de potencia.

2-Influencia de la relación de alimentación $\text{Cl}_2/\text{C}_3=$ en la composición del cloropropeno a la salida del reactor adiabático:

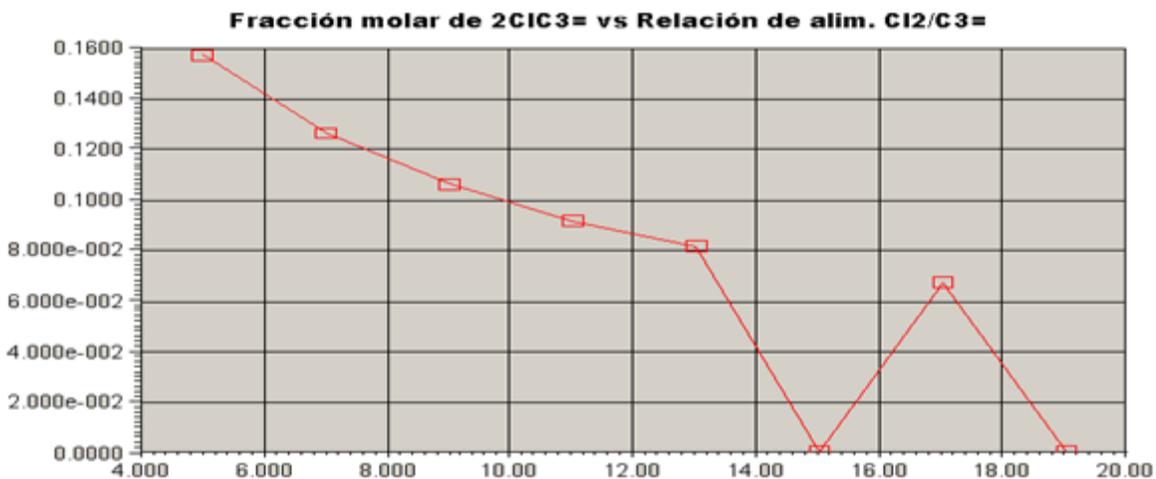


Fig. 3 -Influencia de la relación de alimentación $\text{Cl}_2/\text{C}_3=$ en la composición del cloropropeno a la salida del reactor adiabático:

Como se muestra la composición de cloropropeno va disminuyendo a medida que aumenta la relación de alimentación, por lo que es necesario trabajar a menores valores o sea entre 1-6. Este hecho se explica a través de la termodinámica de la reacción.

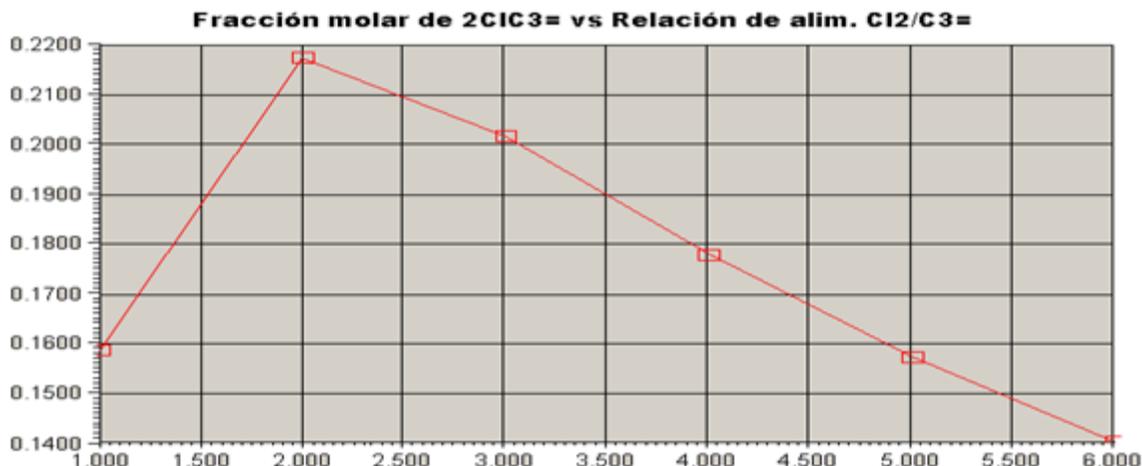


Fig. 4 -Influencia de la relación de alimentación Cl₂/C₃= en la composición del cloropropeno a la salida del reactor adiabático:

Como se ve la relación de alimentación óptima es 2, con la cual se obtendría una composición de cloropropeno de 0.2174 y se aumentaría la producción del mismo.

Conclusiones

Con la simulación del proceso de cloración del propeno se pueden arribar a las siguientes conclusiones:

- 1-El uso del simulador Hysys permite realizar una descripción muy detallada del proceso estudiado con un elevado grado de exactitud.
- 2-Se realizó el diseño de la columna de destilación partiendo del modelo short cut.
- 3-Los resultados obtenidos a través de los casos de estudios demuestran que el empleo del reactor isotérmico es más factible tecnológica y económicamente que el uso del reactor adiabático en el proceso, así como que la relación de alimentación óptima Cloro/Propeno es 2, a la vez que fueron comprobados los conocimientos de la termodinámica del proceso.

Bibliografía

- Hamid, M.K.A., HYSYS: An introduction to Chemical Engineering simulation.
- Kasatkin, A.G., *Operaciones básicas y aparatos en la tecnología química*. Vol. 1, 2. 1985: Pueblo y Educación.
- Macy,R: *Química orgánica simplificada*. Editorial Reverté.España.1992.
- Matich.D,Bossi.M y Pignani.J.M: Aplicación del simulador Hysys para desarrollar el modelo estacionario de una planta simplificada para la cloración del propileno.Dpto de Ingeniería Química.Universidad Tecnológica Nacional-Facultad Regional Rosario.1999.
- McCabe, W.L. and J.C. Smith, *Operaciones básicas de Ingeniería Química*. 1 ed. Vol. 2. 1986, Ciudad de La Habana: Editorial Revolucionaria.
- Treybal, R.E., *Operaciones con transferencia de masa*. 2 ed. 1980, Ciudad de La Habana: Editorial Pueblo y Educación.