

# **INTRODUCCIÓN**

## **Antecedentes**

### **Simuladores de procesos**

El libro "Handbook of Simulation" (Jerry Banks, 1998) define la simulación como la imitación de las operaciones de un proceso real, creando un escenario artificial (modelo) para analizar y detectar problemas en el sistema operacional representado. La simulación se ha utilizado tradicionalmente para identificar y resolver problemas en fases tempranas, integrar el trabajo de diseño y tomar decisiones en la producción.

En el ámbito de la producción, la simulación se emplea para representar y analizar alternativas, facilitando la toma de decisiones sobre la mejor opción. Gracias al rápido desarrollo de software y sistemas gráficos, la simulación industrial ha evolucionado hacia entornos virtuales en tiempo real, con la incorporación del "gemelo digital" en la manufactura digital.

La simulación anticipada ayuda a prevenir riesgos significativos, ya que las industrias manufactureras enfrentan pérdidas considerables debido a fallos mecánicos y estratégicos. Las plataformas de simulación garantizan una producción eficiente al detalle. Se espera que el uso de simuladores de procesos de manufactura sea cada vez más frecuente, permitiendo la ejecución de procesos completos y reduciendo costos y riesgos en la producción.

### **Planta de amoniaco urea de Bulo-Bulo Cochabamba (PAU)**

La PAU, dirigida por Yacimientos Petrolíferos Fiscales Bolivianos (YPFB), se encarga de producir y distribuir toda la urea consumida en el mercado boliviano. Comenzó sus operaciones en 2018, después de una larga y exhaustiva búsqueda que culminó en la elección de la tecnología KBR para la producción de amoníaco, basada en el método de reformado por vapor de gas natural. Para la obtención de urea, se optó por la tecnología TOYO, que utiliza el método de thermo-urea. La PAU genera 347,300 toneladas por año, satisfaciendo el mercado boliviano y permitiendo la exportación a países vecinos.

### **Simulación del proceso de obtención de amoníaco y urea**

En el área de la simulación de ambos procesos, se puede encontrar algunos pequeños trabajos de investigación sobre la obtención de amoníaco a partir de gas natural utilizando Aspen Hysys, donde se destaca uno, donde se buscaba probar dos tipos de reactores y ver cuál de los dos era más eficiente desde un punto de vista energético, este trabajo fue realizado por el estudiante Francisco Javier Navarro en su trabajo de fin de grado titulado “Simulación y propuesta de mejorar de una planta de producción de amoníaco a partir de gas de síntesis” para la Escuela Politécnica Superior de la Universidad de Alicante España, donde se llegó a la conclusión de uso de un reactor con inyección de alimento frío con integración energética como la mejor opción.

Por otra parte, en el área de simulación para la producción de urea se encontraría que se realizó un trabajo para optar el grado académico de doctor en Ingeniería Química por el profesional Rommel Hans Ortiz Guzmán titulado “Evaluación mediante simulación del proceso más eficiente para la obtención de urea a partir de gas natural” para la Universidad Mayor de San Marcos Perú, donde incluso se comparó diferentes licencias para el proceso de obtención de urea para poder ver cuál era más eficiente energéticamente y económicamente.

Podemos notar que los trabajos de simulación buscan evaluar los procesos desde un punto de vista energético y económico para su constante mejora en función de lo que diga el mercado actual. Por otro lado, son poco los trabajos que se pueden encontrar sobre simulación de procesos, un área que está de la mano con las nuevas tecnologías y que debería ser de mayor interés por los estudiantes y profesionales.

## **Objetivos : General y específicos**

### **Objetivo General**

Realizar una simulación de la planta de producción de amoniaco-urea de Bulo-Bulo Cochabamba.

### **Objetivos Específicos**

- Describir el proceso de producción de amoniaco-urea de la planta de Bulo-Bulo.
- Identificar los equipos más relevantes para el proceso de amoniaco-urea.
- Seleccionar las variables y parámetros de proceso del proceso de producción de amoniaco-urea.
- Escoger el programa de simulación de procesos.
- Seleccionar el modelo termodinámico.
- Construir el modelo productivo de amoniaco y urea en el simulador seleccionado.
- Efectuar la validación del modelo de simulación.
- Ejecutar un análisis de sensibilidad para el proceso de simulación.
- Analizar los resultados encontrados.

### **Justificación**

#### **Justificación técnica**

La planta de amoniaco-urea de Bulo-Bulo es actualmente uno de los proyectos más grandes y nuevos del gobierno nacional, el cual produce 2.100 Tm de urea granulado al día, utilizando gas natural, dándole un valor agregado a los hidrocarburos, haciendo que el país entre en el mercado petroquímico con la transformación del gas natural, utilizando equipos como reactores, reformadores, absorbedores, purificadores y

strippers, los cuales complican los análisis cuantitativos de todo el sistema al momento de realizar cambios para un mejoramiento del proceso.

Es por eso que, el presente trabajo de “Simulación de la planta de producción de amoniaco-urea de Bulo-Bulo Cochabamba” se justifica tratando de entender de una manera más rápida, económica y fácil los cambios que se le pueden hacer a los equipos más relevantes que interfieren al momento de realizar la producción de amoniaco y urea. Esto se logrará a través del programa de simulación de procesos “Aspen Hysys” y así tener los resultados más confiables con el fin de poder realizar cambios que puedan mejorar el proceso, evitando contratiempos que pueden llevar a pérdidas económicas referidas a tiempos de producción como también algún defecto en los equipos más relevantes de la planta.

Antes de los simuladores de procesos si se quería realizar cambios en la planta, se tenía que hacer mediante plantas piloto las cuales costaban tiempo a la empresa, utilizando el simulador Aspen Hysys o Aspen plus, los cuales son muy reconocidos en el mundo por su eficacia y precisión, se podrá realizar los análisis de ecuaciones para ver cuáles son los puntos más significativos del proceso, esto para poder realizar cambios que puedan mejorar la eficiencia.

### **Justificación económica**

Se sabe que el mercado de la urea es bastante grande y competitivo, por lo que se busca siempre tener el mejor producto a bajo costo que busque rivalizar al de otras empresas, es por eso que utilizando los simuladores de procesos se puede realizar un análisis más rápido y económico que proporcione las variables más significativas para de este modo optimizar y tener un mejor beneficio económico.

### **Justificación social**

Se sabe que la urea es un producto muy usado en la industria agropecuaria, esto por ser un fertilizante rico en nitrógeno que nutre al suelo, mejorando así la calidad de las plantaciones, es por eso que al momento de producirse en la PAU debe contar con especificaciones bien definidas para que pueda ser comercializada y así los agricultores

no tengan problemas con sus sembradíos y la sociedad no sufra un desabastecimiento de alimentos o estos no cuenten con valores nutricionales óptimos, con esto en cuenta el proyecto de simulación busca tener el entendimiento y control de cada cambio que se quiera hacer al proceso en sus equipos más importantes y así no podamos afectar a la calidad del amoniaco y la urea.

### **Justificación ambiental**

Se sabe que en el proceso de producción de amoniaco se genera dióxido de carbono, esto por la transformación del gas natural, pero este dióxido de carbono es utilizado recirculándolo del final de la planta de amoniaco hacia la planta de producción de urea, esto para que reaccione con el amoniaco y se genere la urea, es por eso que con la simulación se podrá controlar mejor la cantidad de dióxido de carbono que se genera y se utiliza evitando que se desperdicie lo máximo este gas contaminante que tanto preocupa actualmente.

### **Justifican personal**

La realización de este proyecto de grado marca la culminación de mi etapa estudiantil en la carrera de Ingeniería Química, llevándome a obtener el Título Académico de Licenciado en Ingeniería Química. Este logro no solo representa la superación de los desafíos académicos, sino también la posibilidad de desarrollar un proyecto personal con un enfoque en el sector productivo.

Este trabajo de grado va más allá de cumplir con un requisito académico; representa mi dedicación a la excelencia académica, mi contribución al conocimiento en mi campo y mi deseo continuo de aprendizaje y crecimiento personal. Es una manifestación de mi compromiso con la educación y mi aspiración de hacer una diferencia significativa en mi área de estudio. A través de este proyecto, espero inspirar a otros estudiantes a emprender investigaciones innovadoras y a ver en la simulación una herramienta poderosa para el avance científico y tecnológico.

**CAPÍTULO I**  
**MARCO TEÓRICO**

## 1.1. Generalidades del amoniaco

### 1.1.1. Información general del Amoniaco

El amoniaco es una sustancia química incolora, con un fuerte y penetrante olor, y que en condiciones ambientales se encuentra en forma gaseosa. Su composición química consiste en una parte de nitrógeno y tres de hidrogeno ( $\text{NH}_3$ ). Esta forma del amoniaco se conoce también como amoniaco gaseoso o amoniaco anhidro (sin agua). Este compuesto es producido mediante la reacción entre hidrogeno y nitrógeno, utilizando un proceso llamado Haber-Bosch, el cual abarca más del 90% de la producción actual de amoniaco en el mundo. Algunas de las propiedades principales del amoniaco se detallan en la tabla I-1. (Jose Fuster Justiniano, 2022).

*Tabla I-1. Propiedades del amoniaco como combustible*

PROPIEADES	VALOR	UNIDAD
PODER CALORÍFICO INFERIOR	18,6	MJ/KG
	14,1	MJ/Nm3
DENSIDAD ENERGETICA	12,7	MJ/L
ÍNDICE DE WOBBE	18,4	MJ/Nm3
VELOCIDAD DE LLAMA EN AIRE SECO	6	cm/s
PESO MOLECULAR	17,03	g/mol
DENSIDAD EN ESTADO LÍQUIDO	618	kg/m3
TEMPERATURA DE EVAPORACIÓN A 1 BAR	33,6	°C
TEMPERATURA DE AUTOIGNICIÓN	651	°C

*Fuente:* (Institute for Sustainable Process Technology, 2017)

Adicionalmente, existen diferentes grados de pureza de amoniaco disponibles en el mercado, los cuales varían dependiendo del uso final que se le dará al producto:

- Premium o Metalúrgico (Met-grade): amoníaco con pureza de 99,995%.
- Refrigeración (R-grade): amoníaco con pureza de 99,98%.
- Comercial o Agrícola (C-grade): amoníaco con pureza de 99,5%.

Si bien el amoníaco se produce con una pureza bastante alta, este tiene la característica de que absorbe agua con mucha facilidad, lo cual se puede considerar como una “impureza” que es cara y requiere mucha energía para ser eliminada. No obstante, siempre se considera un contenido mínimo de agua en el rango de 0,2-0,5% en peso para evitar el agrietamiento por corrosión bajo tensión en los contenedores, lo cual mejora significativamente la seguridad en su almacenamiento. Es por esto que en muchos casos se prefiere utilizar amoníaco mezclado con un porcentaje menor de agua para facilitar su distribución y manipulación. Estos factores han contribuido a definir el mercado actual del amoníaco. (Jose Fuster Justiniano, 2022).

En la tabla I-2 se presentan las especificaciones típicas del amoníaco comercial o grado C:

*Tabla I-2. Especificaciones típicas del amoníaco anhidro de grado comercial*

<b>PROPIEDADES</b>	<b>VALOR</b>
Amoníaco	> 99,5 [wt%]
Agua	0,2 – 0,5 [wt%]
Contenido de 7 nitrógeno	81,8 – 82,1 [wt%]
Contenido de aceite	0,3 – 10 [ppm]
Contenido de hierro	0,1 – 1 [ppm]
Gravedad específica a 16 °C	0,62
Densidad a 16 °C	0,62 [kg/l]

*Fuente:* (Jose Fuster Justiniano, 2022)

Actualmente, en torno a un 80% del amoníaco que se produce en todo el mundo se utiliza como fuente de nitrógeno para fabricar fertilizantes, mientras que el 20% restante se emplea en distintas aplicaciones industriales, como la producción de plásticos, fibras, explosivos, hidracina, aminas, amidas, nitrilos y otros compuestos orgánicos de nitrógeno que sirven de productos intermedios en la fabricación de tintes y productos farmacéuticos. Entre los productos inorgánicos que se fabrican a partir del amoníaco destacan el ácido nítrico, la urea y el cianuro de sodio. El amoníaco también

se utiliza en medidas de protección para el medio ambiente, por ejemplo, para eliminar los  $NO_x$  de los gases de combustión. El amoniaco líquido es un disolvente destacado y también se utiliza como refrigerante. (Jose Fuster Justiniano, 2022).

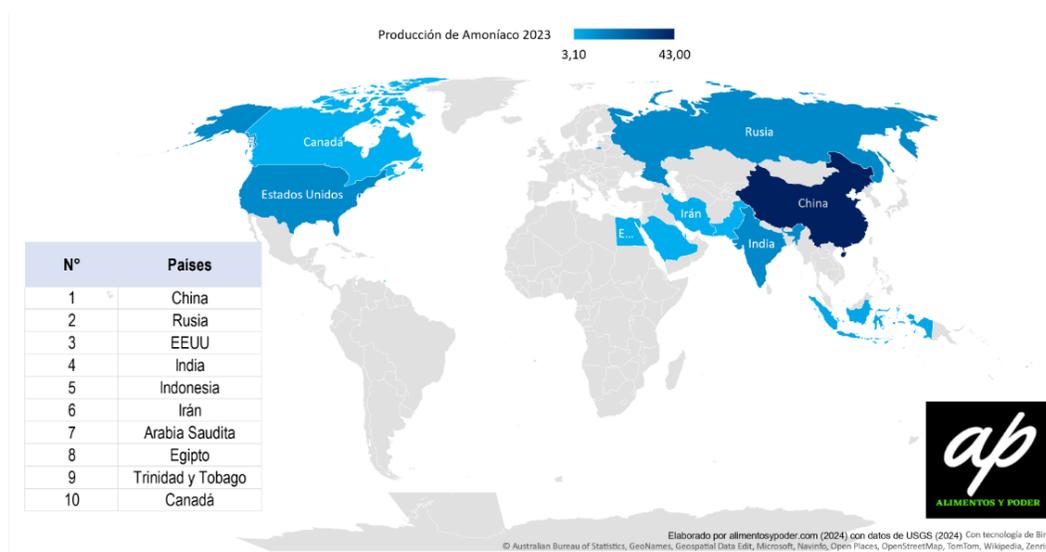
En 2022, la capacidad mundial de producción de amoniaco alcanzó los 190 millones de toneladas. (Sánchez Guevara, 2024).

La mayor parte de esta capacidad se encontraba en las regiones que se enumeran a continuación:

- Asia (36,2%)
- América del norte (33,5%)
- Europa (15,5%)
- África (12,1 %)
- Oceanía (1.3%)
- América Latina (1%)

Fuente: (Gobierno de México, 2023)

Fig. 1-1. Principales productores de amoniaco en el mundo (2023)



Fuente: (Sánchez Guevara, 2024)

En 1974, en los países en vías de desarrollo se concentraba un 27% de la capacidad mundial de producción de amoníaco. En 1998, este porcentaje había aumentado hasta un 51%. En estos países, el amoníaco se utiliza para producir urea para el cultivo de arroz.

Una planta moderna de producción de amoníaco suele contar con una capacidad de entre 1000 y 2000 t/d, mientras que las plantas más nuevas pueden alcanzar hasta 2200 t/d. en la unión europea, el sector del amoníaco produce aproximadamente 11 millones de toneladas de NH<sub>3</sub> al año (2017) en unas 50 plantas. En la tabla I-3 se puede consultar más información sobre la ubicación de estas plantas, así como su capacidad, antigüedad y tipo de materias primas que utilizan.

*Tabla I-3. Instalaciones de producción de amoníaco en la Unión Europea 2017*

Ubicación	Empresa	Capacidad	Primera renovación	Estado	Materia prima
Limz	AMI	1000	1974	Ren 1987-1990	NG
		520	1967		NG
Amberes	BASF	1800	1991	Ren 1996/04	NG
Tertre	Kemira GrowHow	1200	1968		
Latvinov	Chemopetrol	1150	1972		NG
Kothia-Jarve	Nitrofert	500	1979		NG
Granpuits	Grande Paroisse	1150	1970		NG
Rouen	Grande Paroisse	1150	1969	Ren	NG
Gonfreville	Yara	1000	1969		NG/Hidrogeno
Pardies	Yara	450	1961		NG
Ottmarsheim	Pec Rhin-BASF	650	1967-1968		NG
Ludwigshafen	BASF	1200/1360	1971/1982		NG
Koln	Innovene	900	1969-1970	Ren	NG
Brunsbüttel	Yara	2000	1978	Ren-1989	Residuos al vacío
Lutherstadt	SKW Piesteritz	2 x 1650	1974-75	Ren	NG
Gelsenkirchen	Ruhr Ol GmbH	1250	1973		Residuos al vacío
Salomica	EKO Chemicals A.E.	400	1966/1976		Nafta

Nea Karvali	Phosphorie Fert Industry	400	1986		NG
Petfurdo	Nitrogenmuvek Rt.	1070	1975		NG
Ferrara	Yara	1500	1977		NG
Nera Monroro	Yara	500	1970		NG
Jonava	Achema	1400	1978		NG
Krievu sala	Gazprom	1770			
Sluiskil	Yara	C:900	1971	Ren	NG
		D:1500	1984		NG
		E:1750	1987		NG
Pulawy	Zaklady Azotowe Oulawy	2x 1340	1966		NG
Police	POLICE	2 x750	1985		NG
Kedzierzyn	Zaklady Azotowe Oulawy	500	1954		NG
Wloclawek	ANWIL	750	1972		NG
Tarnow	ZAK	530	1964		NG
Palos	Fertuberia S.A.	1130	1976	Ren 1986/89	NG
Puertollano	Fertiberia S.A.	500	1970	Ren 1988/92	NG
Sala Nad-Vahom	Duslo	1070	1990		NG
Billingham	TERRA Nitrogen	1150	1977		NG
Cleveland					
Severnside	TERRA Nitrogen	2 x 400	1988		NG
Ince. Cheshire	Kemira GrowHow	1050	1970	Ren	NG
Hull	Kemira GrowHow	815	1989		H2 y N2
Barreiro	Quimigal Adobos S.A	900	1984	Ren. Plamificada	Residuos

*Fuente:* (Ducoy & Javier , 2018)

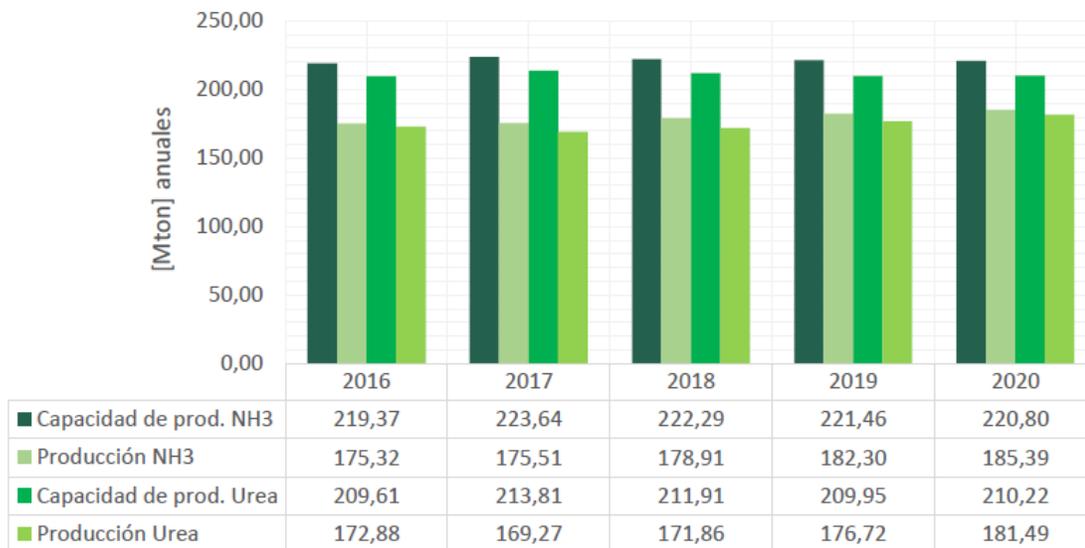
Con el aumento del precio de las materias primas y la dura competencia del mercado, muchos productores han optado por renovar o modernizar sus instalaciones, más antiguas y menos eficientes, para que continúen siendo competitivas. En la mayoría de proyectos de renovación realizados, se aumentó ligeramente la capacidad de producción, puesto que parte de la maquinaria original estaba sobredimensionada y

solo fue necesario eliminar obstáculos específicos que no acarrearán un gasto excesivo. Dado que las posibilidades de mercado para una empresa no aumentan de 1000 a 1500 t/d, sino que mejoran paulatinamente, este incremento moderado de la capacidad comporta un menor riesgo y resulta más económico que construir una planta nueva. (Ducos F. J., 2018).

De acuerdo con la International Fertilizer Association (IFA), la capacidad actual de producción de amoníaco depende fuertemente de la expansión de la industria de la urea, proyectando que esta contribuiría hasta en un 75% al incremento de la capacidad de producción de amoníaco en el periodo 2020-2024. Sin embargo, es importante tener en cuenta que la capacidad de producción instalada a nivel mundial, tanto para el amoníaco como para la urea, excede los valores de producción anuales de estos productos. (Internacional Fertilizer Association , 2020).

En la *Figura I-2* se puede ver como en el 2020, por ejemplo, la producción de amoníaco fue de 185 millones de toneladas de un total de 220,80 de capacidad disponible, utilizando aproximadamente solo el 84% de la capacidad total instalada. Considerando que muchas de las plantas actuales de amoníaco son antiguas, y asumiendo un factor de planta del 90%, en el 2020 se tuvo una capacidad de producción disponible de amoníaco no explotada de alrededor de 13,3 millones de toneladas.

Fig. 1-2. Capacidad y producción de amoníaco y urea entre 2016 y 2020.



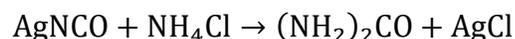
Fuente: (Internacional Fertilizer Association , 2020)

## 1.2. Descripción de la industria química de la Urea

### 1.2.1. Información general

El científico neerlandés Herman Boerhaave en 1727 tuvo los primeros registros de separación de la sal *netivis urinae* extraída de la orina, a esto se le conoce como urea, cuyo descubrimiento se reconocería cincuenta años más tarde. Este descubrimiento se le atribuye a menudo al químico francés Hilaire Rouelle que en 1773 logra aislar la urea, tanto en la orina humana como en la de vaca y caballo, siendo con ello el primer metabolito animal (cualquier molécula utilizada o producida durante el metabolismo) en ser aislado en forma cristalina. Su descubrimiento fue un primer asalto contra la teoría del vitalismo, que postulaba que las sustancias relacionadas con los seres vivos no procedían de los compuestos químicos ordinarios. (Bellorin , Mora , & Serrano , 2016).

El químico alemán Friedrich Wöhler en 1828, obtuvo urea artificial mediante el tratamiento del cianato de plata con cloruro de amonio.



esta fue la primera vez que un compuesto orgánico fue sintetizado artificialmente a partir de materiales de partida inorgánicos, además confirmó el rechazo del vitalismo, en su síntesis Wöhler escribió a Berzelius (considerado el padre de la química moderna) “...Debo decirle que yo puedo hacer urea sin el uso de riñones, ni de hombre ni de perro. El cianato de amonio es la urea...” por este descubrimiento algunos consideran a Wöhler el padre de la química orgánica. (Bellorin , Mora , & Serrano , 2016).

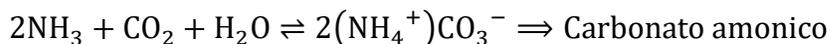
La urea  $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$  conocida también como carbamida, es muy estable en condiciones ambientales. Se utiliza como fertilizantes, abono o para crear complejos NPK, debido al alto porcentaje de nitrógeno que posee. Como uso menos común también puede ser utilizado para la producción de adhesivos. Es fácil de transportar y manipular, lo que hace que sea muy utilizado, pues es muy seguro y económico.

*Tabla I-4. Ficha técnica de la urea.*

<b>FICHA TÉCNICA</b>	
Nombre químico	Urea
Formula química	$\text{CO}(\text{NH}_2)_2$
Peso molecular	60 g/mol
Nitrógeno total	Min. 44%
Humedad	Max. 2%
Apariencia	Polvo o cristales
Color	Blanco
Sabor	Salino
Peso específico	1,335
Densidad	768 kg/m <sup>3</sup>
Punto de fusión	132,70 °C

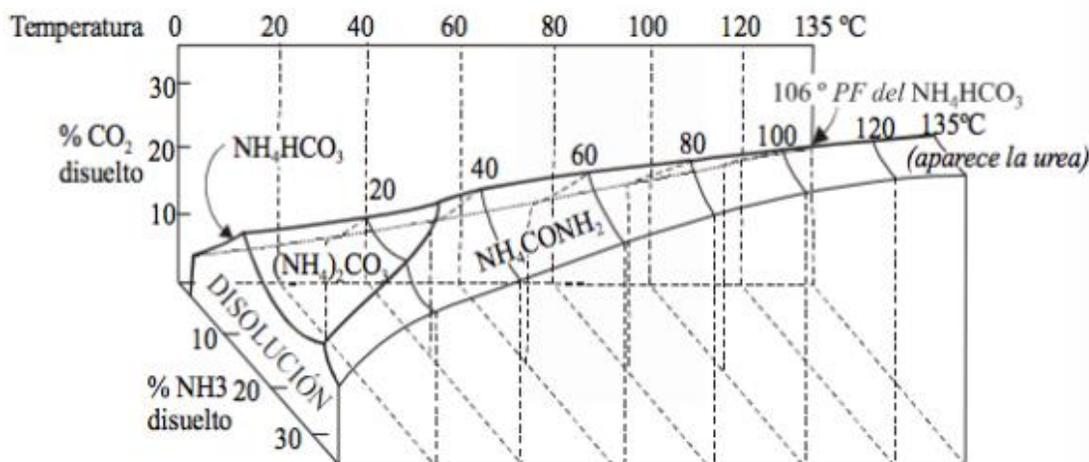
*Fuente:* (Peralez Fernandez , 2018)

La urea se obtiene de la reacción entre el  $\text{NH}_3$  y el  $\text{CO}_2$ . Las reacciones que tienen lugar en el momento en el que están disueltos en agua varían según las condiciones de temperatura y relación molar  $\text{NH}_3/\text{CO}_2$  que se tiene:



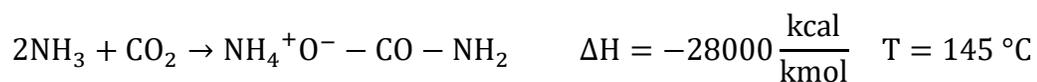
Se utilizan los diagramas tridimensionales para identificar que compuestos se forman de las reacciones entre  $\text{NH}_3$  y el  $\text{CO}_2$ . Para la obtención de dichos diagramas se hacen uso de diagramas triangulares de diferentes temperaturas realizados con diferentes disoluciones. La composición de estos diagramas tridimensionales se hace con la superposición de los valores de estos diagramas triangulares unos con otros.

Fig. 1-3. Diagrama de equilibrio entre fases del sistema  $\text{NH}_3 - \text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$

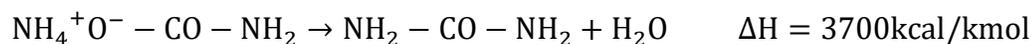


Fuente: (ETSII, 2016)

Antes de obtener la producción de la urea, se ha de generar la formación del carbamato amónico (reacción a alta presión y muy exotérmica):



Una vez que esta se consigue, se obtiene la urea por deshidratación del carbamato amónico a 135°C mediante la reacción endotérmica reversible:



La reacción de formación del carbamato amónico es muy exotérmica con lo que no se hace necesario aportar energía para producir la reacción de deshidratación. Una vez alcanzados los 155°C la urea se funde. Ambas reacciones se producen a la vez en el reactor a 200°C y 180 atm.

Para la primera reacción se consigue prácticamente el 100% de conversión, mientras que para la reacción de deshidratación del carbamato se consigue un máximo del 55% y conforme pasa el tiempo la conversión se reduce, volviéndose a hidratar.

### **1.2.2. Principales empresas productoras de Urea a nivel intercontinental y nacional**

**Profertil:** Esta empresa se encuentra ubicada en Argentina con una inversión de 705 millones de dólares, inauguró en septiembre de 2000 una fábrica de amoníaco y urea granulada, abasteciendo por completo el mercado interno, solventando así una demanda de 750 mil toneladas anuales de urea granulada en la república de Argentina. Desde allí se lanzan al mercado 1.100.000 toneladas de urea por año, el 30% para exportación. Esta planta es una de las más grandes en cuanto a tamaño y producción del fertilizante nitrogenado y junto a Pequiven forman dos de las productoras de urea más importantes de Sudamérica.

**YPFB (Yacimientos Petrolíferos Fiscales Bolivianos):** Inauguró a principios de este año una planta de fertilizantes nitrogenados a disposición de los agricultores de la región y para exportar a Argentina y el Occidente de Brasil, dicho proyecto salió a relucir en la “Exposoya 2016” realizada en la ciudad de La Paz, donde se resaltaron los beneficios de la urea como el fertilizante más popular y de mayor uso en el mundo, se espera que la planta alcance una producción de 2100 toneladas de urea granulada al día a partir del mes de julio de 2016.

**Pequiven:** En el 2014 aumentó la producción de urea granulada en un 40%, para satisfacer la demanda del mercado nacional y atender el mercado de los países de la región (exportación a Brasil y a los países del Alba y Petrocaribe), ya que la urea es el principal compuesto o energético que usa la agricultura para su producción, sobre todo el cultivo de cereales y hortalizas; componentes fundamentales de la pirámide alimenticia de la población.

En Venezuela también resaltan otras empresas que manejan la producción y/o distribución de urea granulada del país, en su mayoría filiales a Pequiven, como lo son, Fertinitro, Nitroven y Serviferil.

**Fertinitro (Fertilizantes nitrogenados de oriente):** Es una de las compañías de fertilizantes más grandes de Venezuela produciendo alrededor de 1,5 millones de toneladas de urea al año. Fue nacionalizada en el 2010. El 35% de la compañía pertenece a Pequiven y el restante a firmas privadas.

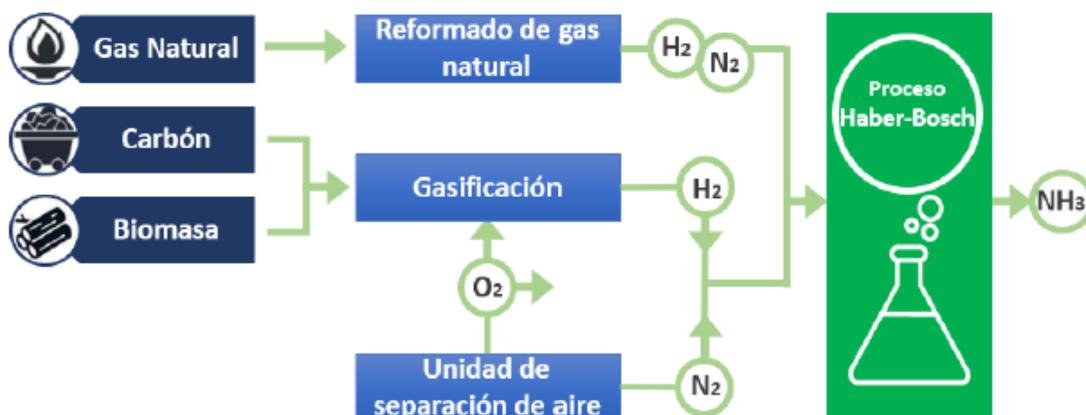
**Serviferil:** Esta empresa se encuentra ubicada en el estado Carabobo se encarga principalmente de la producción de fertilizantes y servicios para el agro.

### **1.3. Procesos de obtención de Amoniac y Urea**

#### **1.3.1. Procesos de obtención de amoniaco a nivel industrial**

La producción convencional de amoniaco se puede dividir en dos partes principales: primero, la obtención de hidrógeno y nitrógeno y segundo, el proceso de síntesis de amoniaco mediante el proceso de Haber-Bosh. Como se puede apreciar en la Figura I-4, las principales formas de obtener hidrógeno que se utilizan actualmente son mediante el reformado de gas natural y el proceso de gasificación con carbón o biomasa.

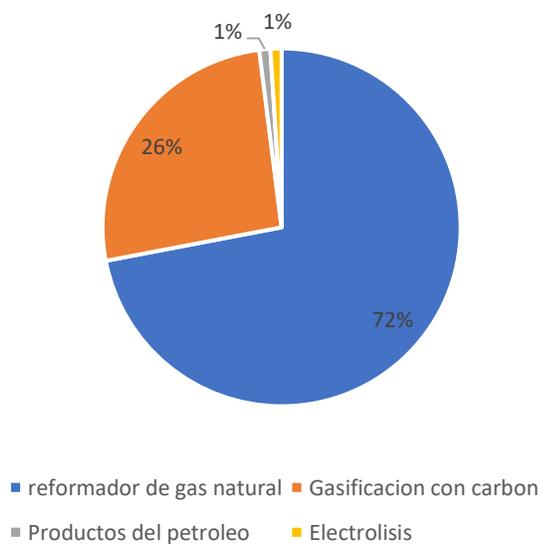
Fig. 1-4. Métodos de producción de amoníaco



Fuente: (Jose Fuster Justiniano, 2022)

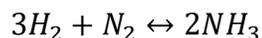
Actualmente cerca del 100% del amoníaco se produce con el uso de combustibles fósiles, principalmente a través del reformado de gas natural y la gasificación con carbón, como se puede ver en el ejemplo de la *figura 1-5* para el año 2020. Esto implica que el mercado actualmente del amoníaco y sus derivados tenga una fuerte dependencia de las variaciones que pueda experimentar el mercado global del gas natural.

Fig. 1-5. Métodos de producción de amoníaco en 2020



Fuente: (Jose Fuster Justiniano, 2022)

Para la fase de síntesis de amoníaco, el proceso de Haber-Bosch requiere niveles de temperatura y presión entre los 350 y 500 °C y 150 a 300 bar respectivamente y realiza la síntesis de amoníaco a través de la siguiente reacción química:



La mejor fuente de nitrógeno es el aire atmosférico. Por su parte, el hidrógeno necesario se puede obtener de distintas materias primas, pero actualmente se deriva principalmente de combustibles fósiles. Dependiendo del tipo de combustible fósil, se suelen aplicar dos métodos principales para producir el hidrógeno necesario para la fabricación de amoníaco: el reformado con vapor o la oxidación parcial.

Como se puede apreciar en la próxima tabla en la actualidad en torno a un 80% de la capacidad mundial de producción de amoníaco se obtiene mediante el proceso de reformado con vapor. El alto nivel de integración del proceso, el diseño innovador de la maquinaria y los catalizadores mejorados son las principales características de las instalaciones de producción de amoníaco actuales.

*Tabla I-5. Procesos y materias primas aplicados en la producción de amoníaco*

<b>MATERIA PRIMA</b>	<b>PROCESO</b>	<b>PORCENTAJE DE LA CAPACIDAD MUNDIAL</b>
Gas natural	Reformado con vapor	77%
Nafta.LPG. Gas de refinería	Reformado con vapor	6%
Fracciones de hidrocarburos pesados	Oxidación parcial	3%
Coque, carbón	Oxidación parcial	13,50%
Agua	Electrolisis acuosa	0,50%

*Fuente:* (Ducoy & Javier , 2018)

La evolución del proceso de oxidación parcial en las instalaciones integradas ha sido limitada. Los consumos energéticos que se muestran en la siguiente tabla, sugieren que, en comparación con el proceso de reformado con vapor, la eficiencia energética de los procesos de oxidación parcial todavía se puede mejorar.

Tabla I-6. Diferencias de costos y demandas de energía total en la producción de amoníaco

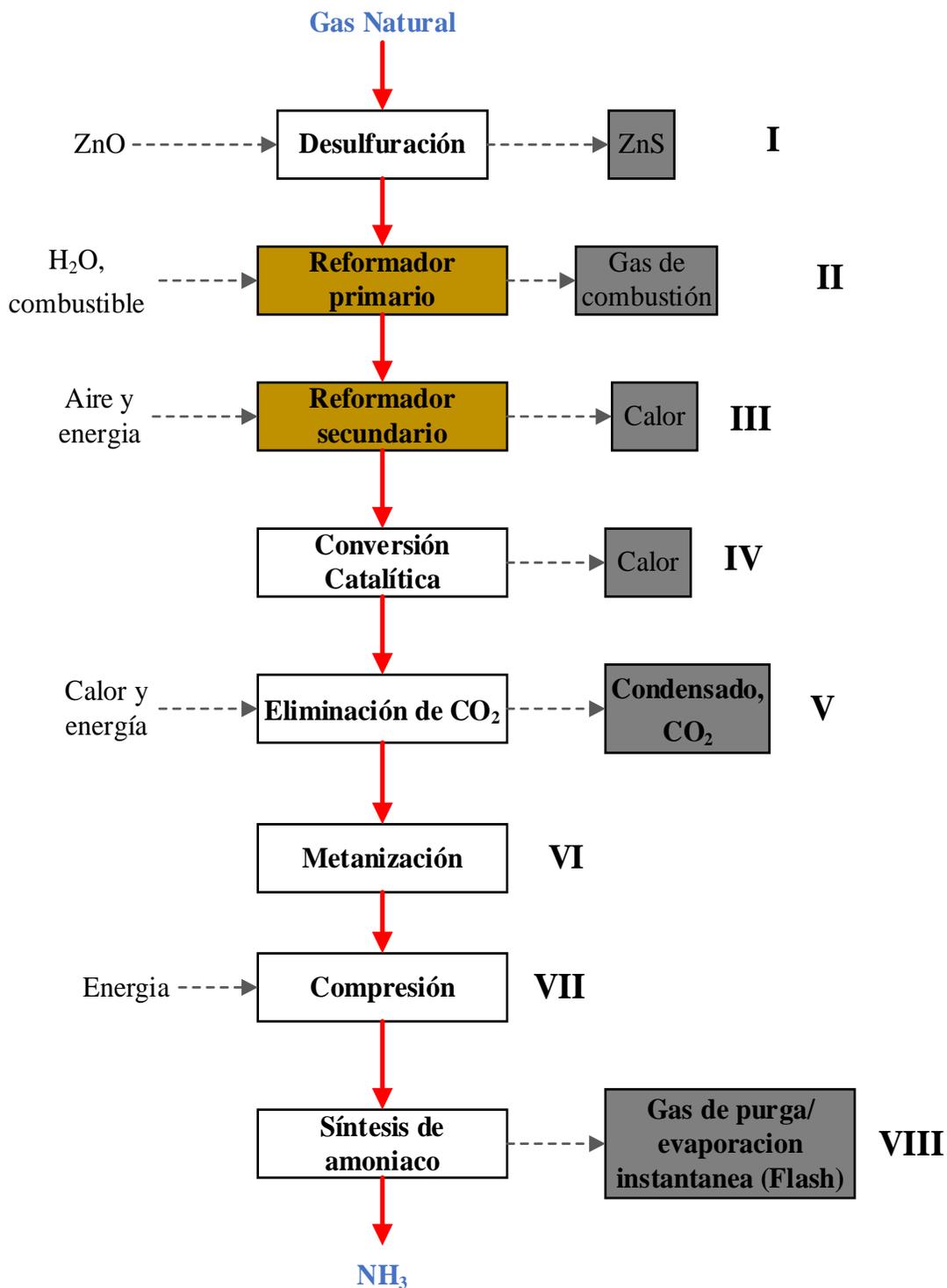
MATERIA PRIMA	PROCESOS	CONSUMO ENERGÉTICO PRIMARIO NETO (Gj/t NH <sub>3</sub> , (LHV))	INVERSIÓN RELATIVIVA
Gas Natural	Reformado con vapor	28	1
Hidrocarburos Pesados	Oxidación parcial	38	1,5
Carbón	Oxidación parcial	48	2-3

Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

### 1.3.1.1. Proceso de obtención de amoníaco con reformado de vapor

En la *figura I-6* se puede observar una visión general de un proceso de reformado convencional con vapor. Las etapas del proceso se describen en los apartados que se incluyen a continuación.

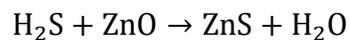
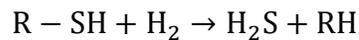
Fig. 1-6. Producción de amoniaco mediante reformado con vapor



Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

## I. Desulfuración

El catalizador utilizado en el proceso de reformado con vapor es muy sensible a los compuestos de azufre que, por lo tanto, se deben reducir hasta alcanzar una concentración menor a 0,15 mg de S/Nm<sup>3</sup> en el gas de alimentación. Para ello, el gas de alimentación se precalienta entre 350°C y 400°C. a continuación, los compuestos de azufre se hidrogenan a H<sub>2</sub>S, normalmente aplicando un catalizador de cobalto-molibdeno y finalmente se adsorben en óxido de zinc granulado (R=grupo alquil):



El hidrógeno necesario para reacción se suele reciclar de la sección de síntesis de la instalación. (Ducoy & Javier , 2018).

## II. Reformado primario

El índice de conversión de hidrocarburo en el reformador primario de una planta de reformado convencional con vapor se sitúa en torno al 60%. En conjunto, la reacción es muy endotérmica:



El gas procedente del desulfurador se mezcla con vapor de agua y la mezcla precalentada se introduce en el reformador primario en una temperatura de entre 400 y 600°C.

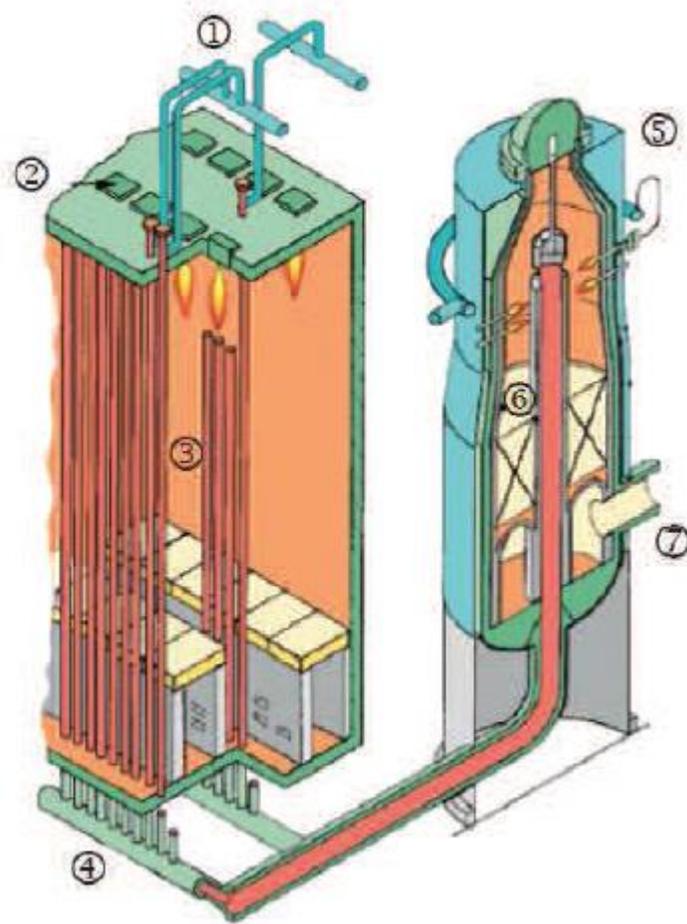
El reformador primario está formado por un gran número de tubos llenos de catalizador. En algunas plantas nuevas o modernizadas, la mezcla de vapor precalentado y gas atraviesa un pre-reformador adiabático y, a continuación, se vuelve a calentar en la sección de convección.

El vapor aplicado a la fracción molar de carbono (proporción S/C) suele ser de 3,0. Sin embargo, la reacción óptima depende de varios factores, como la calidad de la materia prima, la recuperación del gas de purga, la capacidad del reformador primario, el

funcionamiento catalítico y el balance de vapor de la planta. En las plantas nuevas, la relación óptima S/C puede ser menor de 3,0.

El calor para el proceso de reformado primario se suministra quemando gas natural u otro combustible gaseoso en los quemadores de una cámara radiante con tubos llenos de catalizador. (Ducoy & Javier , 2018).

*Fig. 1-7. Ejemplo de una sección radiante de un reformador y un reformador secundario.*



*Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)*

1. Colector de entrada
2. Quemadores
3. Tuberías de reformador
4. Colector de salida
5. Entrada de aire de proceso
6. Lecho catalizador

Aproximadamente la mitad del calor se emplea en la reacción de reformado, mientras que el resto permanece en el gas de combustión y se utiliza en la sección de convección del reformador para precalentar varias corrientes de proceso.

### **III. Reformador secundario**

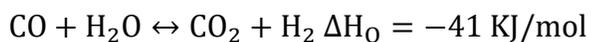
El objetivo principal del reformado secundario es añadir el nitrógeno necesario para la síntesis y para completar la conversión de la alimentación de hidrocarburo. Para ello, se efectúa una combustión interna de parte del gas de reacción antes de que atraviese los catalizadores que contienen níquel y, de este modo, se obtiene el calor de reacción y la temperatura necesaria.

El aire de proceso se comprime y se calienta en la sección de convección del reformador primario hasta alcanzar entre 500 °C y 600 °C. como resultado, el contenido de metano se reduce a un porcentaje residual de entre 0,2 % y 0,3 %. La reacción se produce de manera adiabática, con el cual se obtiene una temperatura de salida del gas de unos 1000°C. el calor se elimina en una caldera de vapor de calor residual, un sobrecalentador/caldera o una caldera/precalentador, donde el gas se enfría hasta unos 330—380 °C aproximadamente. (Ducoy & Javier , 2018).

### **IV. Conversión catalítica**

El gas de proceso del reformador secundario contiene entre un 12 % y un 15 % de CO (gas seco).

La mayor parte de este CO se convierte en CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> en la sección catalítica a través de esta reacción:



La reacción se produce en dos etapas, con una eliminación de calor intermedia. En la primera etapa, el gas de proceso atraviesa un lecho de catalizador de óxido de hierro/óxido de cromo a 350 – 380°C aproximadamente. El contenido final de CO residual en el oscila entre 0,2 % y 0,4 %. Si se continúa investigando en esta dirección, se podría conseguir una conversión catalítica isotérmica en una sola etapa con refrigeración interna del gas de proceso mediante tuberías de refrigeración que atraviesen las capas de catalizador.

Condensados del proceso. El gas que sale del reactor catalítico de baja temperatura se enfría y, después de condensar y eliminar la mayor parte del exceso de vapor, se envía a un sistema de eliminación de CO<sub>2</sub>. Este paso es necesario para prevenir la dilución del disolvente de eliminación de CO<sub>2</sub> y mantener un correcto balance de equilibrio. Los condensados con un contenido aproximado de entre 1500 y 2000 ppm de amoníaco y de 800 a 1200 ppm de metanol se pueden reciclar en el proceso de distintas maneras. El calor que se desprende durante la refrigeración y condensación se puede aprovechar para varios procesos, por ejemplo, para regenerar la solución de depuración del CO<sub>2</sub>, para hacer funcionar una unidad de refrigeración por absorción o para precalentar el agua de alimentación de la caldera. (Ducoy & Javier , 2018).

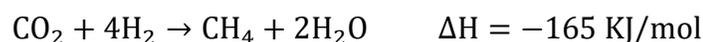
## **V. Eliminación del CO<sub>2</sub>**

Esta etapa del proceso elimina CO<sub>2</sub> del gas de reacción, cuya cantidad equivale a casi todo el carbono introducido como gas de alimentación en el proceso. El contenido de CO<sub>2</sub> residual suele variar entre 50 y 3000 ppm. El CO<sub>2</sub> se elimina mediante un proceso de absorción química o física. Los disolventes que se utilizan en los procesos de absorción química suelen ser soluciones aminas acuosas, por ejemplo, el monoetanolamina (MEA), metil-dietanolamina activada (Amdea) o soluciones de carbonato potásico caliente. Para los procesos de absorción física se suelen utilizar dos disolventes distintos: glicol-dimetiléter (Selexol) y carbonato de propileno. El proceso MEA requiere una elevada energía de regeneración.

Otro proceso emergente en este ámbito es la adsorción con modulación de presión (PSA), que permite combinar en una sola etapa el proceso clásico de eliminación de CO<sub>2</sub> y la metanización (siguiente etapa del proceso). Este método resulta adecuado cuando la pureza del CO<sub>2</sub> es poco relevante. Sin embargo, cuando se desee obtener CO<sub>2</sub> es poco relevante. Sin embargo, cuando se desee obtener CO<sub>2</sub> puro como producto, se puede optar por una depuración clásica con disolvente del efluente gaseoso de baja presión del PSA para recuperar el CO<sub>2</sub>. (Ducoy & Javier , 2018).

## VI. Metanización

Las pequeñas cantidades de CO y CO<sub>2</sub> que permanecen en el gas de síntesis pueden envenenar el catalizador de síntesis del amoníaco y, por lo tanto, se deben eliminar. El proceso más habitual es la conversión en CH<sub>4</sub> mediante hidrogenación en el metanador:



Estas reacciones se producen a una temperatura de unos 300 °C en un reactor lleno de un catalizador a base de níquel. La concentración residual de estos óxidos de carbono no suele alcanzar los 10 ppm. A pesar de que el metano no participa en la reacción de síntesis, el agua que se forma se debe eliminar antes de que llegue al convertidor. Para ello, se realiza un proceso de refrigeración, seguido de una etapa de condensación, que se aplica después del metanizador y, por último, una etapa de condensación/absorción del amoníaco producto, que se lleva a cabo en el circuito o en una unidad de secado del gas de reposición. (Ducoy & Javier , 2018).

## VII. Compresión

En las instalaciones modernas de producción de amoníaco se utilizan compresores centrífugos para presurizar el gas de síntesis hasta conseguir el nivel necesario (100 – 250 bar, 350 – 550 °C) para la síntesis del amoníaco. En algunos casos, se emplean tamices moleculares después de la etapa de compresión inicial para eliminar las últimas trazas de H<sub>2</sub>O, CO y CO<sub>2</sub> del gas de síntesis. Los compresores suelen funcionar con turbinas de vapor que aprovechan el vapor obtenido del exceso de calor de proceso.

Durante la etapa de compresión, una pequeña cantidad de condensado, que todavía contiene amoníaco, se elimina del gas de síntesis. Además, los aceites lubricantes del equipo mecánico, que se suelen eliminar en los separadores de aceite/agua, también los pueden contaminar. (Ducoy & Javier , 2018).

### VIII. Síntesis de NH<sub>3</sub>

La síntesis del amoníaco se produce en un catalizador de hierro con una presión que suele variar entre 100 y 250 bar y una temperatura de entre 350 y 550 °C.



Solamente entre un 20 % y un 30 % del gas de síntesis se convierte en amoníaco en un solo paso, puesto que las condiciones de equilibrio son poco favorables. El gas sin reaccionar se recicla después de eliminar el amoníaco que se haya formado. A continuación, se añade gas de síntesis nuevo al circuito.

A medida que avanza la reacción de síntesis exotérmica, el volumen se reduce y, por lo tanto, aumenta la presión y disminuye la temperatura, factores que favorecen la reacción. La temperatura del catalizador se debe controlar, ya que el calor de la reacción con el equilibrio y velocidad de reacción necesaria producen un aumento de la temperatura. Para controlar ésta, se puede recurrir a una técnica que consiste en subdividir el catalizador en distintas capas. Entre estas, los gases se enfrían directamente, añadiendo gas de síntesis refrigerado, o indirectamente, generando vapor. Existen distintos diseños de convertidor que permiten aplicar esta técnica.

Para condensar el amoníaco en el circuito, la refrigeración con agua o aire no permite alcanzar una concentración suficientemente reducida de amoníaco en la entrada. Por este motivo, el NH<sub>3</sub> se vaporiza para enfriar el gas. Los vapores de amoníaco se licuan mediante un compresor de refrigeración. Las distintas configuraciones de síntesis pueden variar según el punto donde se añada el gas de repuesto o donde se extraiga el amoníaco licuado y el gas de purga. Las últimas investigaciones en este campo apuntan al uso de catalizadores más activos, como el hierro dopado con cobalto y el rutenio.

Estos catalizadores permiten mantener una presión de síntesis más baja y reducir el consumo energético.

El reformado convencional con metanización como etapa final de purificación produce un gas de síntesis que contiene gases sin reaccionar y elementos inertes (metano y argón). Para evitar la acumulación de estos elementos inertes, se debe aplicar un flujo continuo de gas de purga. Éste contiene, básicamente, amoníaco, nitrógeno, hidrógeno, elementos inertes y gases sin reaccionar. El caudal de este flujo de gas de purga permite controlar el nivel de elementos inertes en el circuito y mantenerlos dentro de un nivel aproximado del 10 % al 15 %. El gas de purga se depura con agua para eliminar el amoníaco antes de utilizarlo como combustible o enviarlo a la unidad de recuperación de hidrógeno. (Ducoy & Javier , 2018).

### **1.3.1.2. Proceso de obtención de amoníaco por oxidación parcial**

En esta ruta se utilizan principalmente como materias primas hidrocarburos pesados que no son adecuados para el reformado con vapor, dónde se incluyen nafta, petróleo crudo, fuel-oil pesado, asfalto y alquitrán. A continuación, se expone un diagrama general de este tipo de plantas.

### **1.3.1.3. Resultado de la producción de amoníaco**

#### **I. Amoníaco**

La producción de una instalación de amoníaco de una sola corriente, suele variar entre 1.000 y 1.500 t/d (300.000 – 500.000). si no se utiliza, el producto se conserva en depósitos de almacenamiento.

Dentro del amoníaco anhidro comercial se puede distinguir dos grados de pureza

- Amoníaco anhidro min. 99,7% peso, contenido de agua aproximado 0,2 % peso.
- Amoníaco anhidro min 99,9\$ peso.

#### **II. Dióxido de carbono**

El dióxido de carbono se produce como consecuencia de una conversión estequiométrica. Se puede recuperar para utilizarlo posteriormente como materia prima en una planta de producción de urea, en la producción de fertilizantes (Proceso ODDA) y/o en la producción o licuefacción de metanol, en el sector de las bebidas o como gas refrigerante en reactores nucleares. Sin embargo, el exceso de dióxido de carbono del proceso se debe liberar inevitablemente al medio.

La producción de dióxido de carbono en el reformado con vapor/aire de gas natural oscila entre 1,15 y 1,40 kg/kg de amoníaco, dependiendo del grado de reformado con aire (las cifras no incluyen el dióxido de carbono que contienen los gases de combustión). Con los procesos de reformado con intercambiador de calor se puede obtener una fracción molar  $\text{CO}_2/\text{NH}_3$  de 0,5 (relación en peso 1,29), es decir, la relación estequiométrica para la producción de urea.

### **III. Azufre**

Con los procesos de oxidación parcial, entre un 87% y un 95% del contenido de azufre de la alimentación al gasificador se recupera en una unidad Claus.

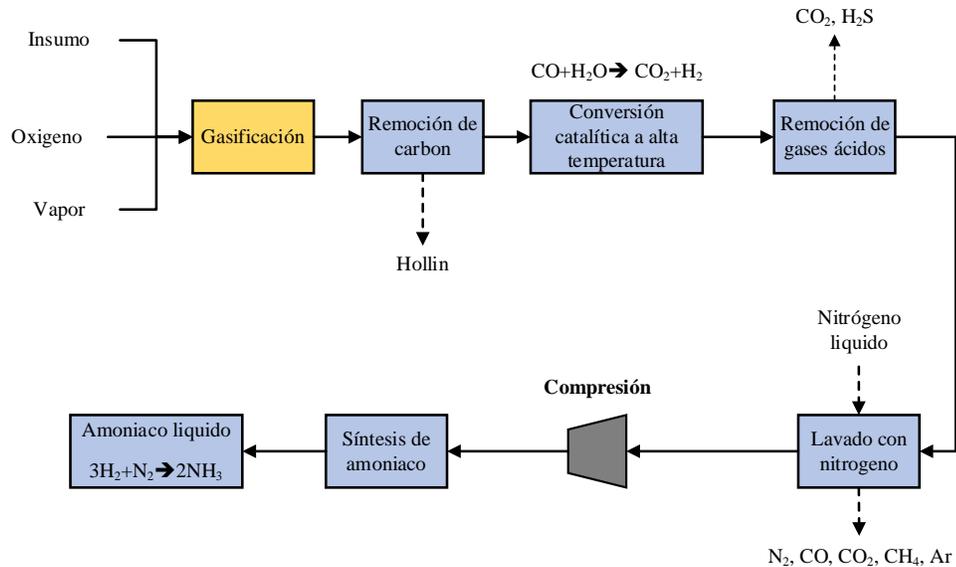
### **IV. Vapor de agua**

El diseño de los procesos modernos de reformado con vapor se puede adoptar para no exportar vapor o bien para exportar cierta cantidad de vapor cuando esta característica favorezca el balance energético del vapor de agua de presión baja/media de la instalación. El vapor en exceso se suele producir en los procesos de reformado cuyo compresor de aire de proceso funciona con una turbina de gas y en los casos en que la energía eléctrica se utiliza para los compresores principales y se puede exportar.

Los procesos con reformado primario calentado con gas se pueden diseñar para no exportar vapor de agua, aunque es necesario importar cierta cantidad de energía o disponer de un suministro de vapor para accionar la turbina de gas.

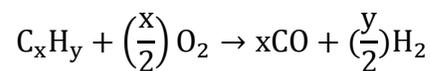
El proceso de oxidación parcial, se producirá un déficit de vapor si todos los compresores funcionan con vapor. (Ducoy & Javier , 2018)

Fig. 1-8. Diagrama de bloques para la producción de amoníaco por oxidación parcial



Fuente: (Carrillo, 2018)

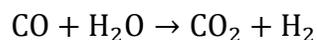
Inicialmente, las materias primas se oxidan parcialmente en un gasificador, ello mediante una quema utilizando una limitada cantidad de oxígeno en presencia de vapor, actualmente este proceso se lleva a cabo a 80 bar y 1250°C. La reacción llevada a cabo es la siguiente:



Además de estos productos, la corriente de salida del gasificador contiene agua y dióxido de carbono, proveniente de una cierta cantidad de moléculas que alcanzan a oxidarse completamente, además de ello se encuentran pequeñas partes de metano y sulfuro de hidrógeno, provenientes de las impurezas en las materias primas.

El gas saliente, pasa rápidamente a un enfriamiento con agua, con el motivo de estancar la composición en el equilibrio de la reacción llevada a alta temperatura. Posteriormente, el gas enfriado se limpia de las partículas de carbón remanentes.

Después de la gasificación, el gas se lleva a reaccionar sobre un catalizador de óxido de hierro a alta temperatura, donde se lleva a cabo la siguiente reacción:



Posteriormente, el gas pasa por una segunda etapa de purificación, donde se remueven gases ácidos, sulfuro de hidrógeno y dióxido de carbono. Para ello normalmente se utiliza el proceso denominado Rectisol, en el cual el gas se purifica utilizando un solvente orgánico como el metanol a temperaturas bajas ( $<0^\circ\text{C}$ ), debido a la solubilidad del dióxido de carbono en el solvente orgánico.

El siguiente paso es purificar nuevamente el gas mediante un lavado con nitrógeno líquido a muy baja temperatura, siendo este insumo, obtenido de la planta de separación de aire, en la cual también se separa el oxígeno que es utilizado en el gasificador. Con este lavado final se remueve el monóxido de carbono, metano, argón y dióxido de carbono remanente de la purificación anterior. Además, con este lavado se controla que quede la cantidad estequiométrica para que se proceda, posteriormente a una compresión a la síntesis de amoníaco. Finalmente, la síntesis del amoníaco se completa de manera similar a la explicada en el anterior apartado. (Carrillo, 2018).

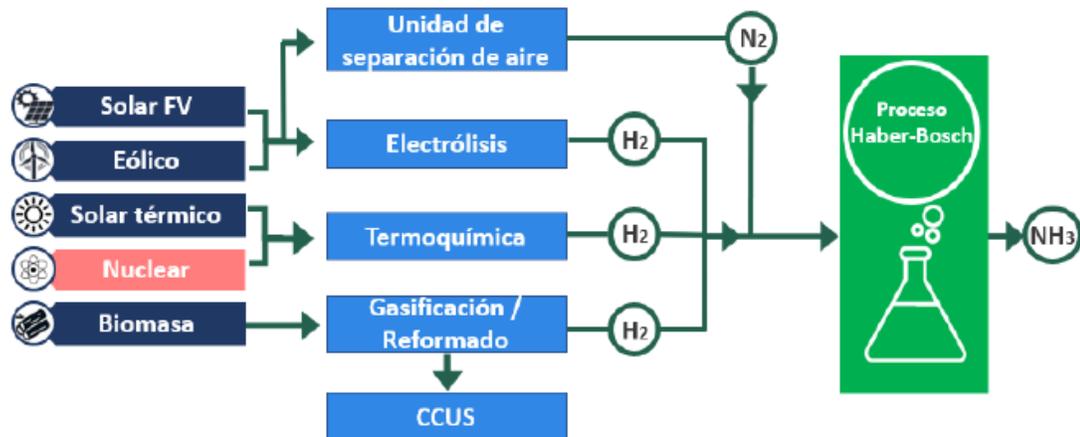
#### **1.3.1.4. Proceso de obtención con amoníaco verde**

Al igual que en los métodos de producción convencionales, la producción de amoníaco verde requiere una etapa previa para obtener hidrógeno y nitrógeno, seguida por la síntesis de amoníaco mediante el proceso de Haber-Bosch. En el esquema presentado en la *figura 1-8*, el amoníaco verde se genera utilizando energía eléctrica procedente de fuentes renovables como la energía eólica y solar fotovoltaica. Esta energía eléctrica se emplea junto con agua como materia prima para alimentar el proceso de electrólisis, del cual se obtiene hidrógeno verde. Respecto al nitrógeno, existen diversas formas de obtenerlo, como la destilación fraccionada del aire líquido, el uso de membranas poliméricas o la adsorción a presiones oscilantes (esto último depende principalmente de la cantidad de amoníaco que se desea producir); no obstante, la opción más comúnmente utilizada es una unidad de separación de aire convencional (ASU).

Posteriormente, el hidrógeno y el nitrógeno se emplean en el proceso de Haber-Bosch para la síntesis de amoníaco.

En la *figura 1-9* también se presenta el método de producción termoquímico, el cual requiere altas temperaturas para obtener hidrógeno y puede ser alimentado por energía solar térmica o energía nuclear. A pesar de que la energía nuclear es una tecnología con bajas emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) asociadas, el hidrógeno producido mediante este método no se considera como hidrógeno verde. Además, es posible producir amoníaco verde a partir de biomasa, la cual sirve como materia prima para producir hidrógeno y también como una fuente circular de CO<sub>2</sub>. De esta manera, el amoníaco obtenido de la biomasa puede convertirse en urea verde, que se emplea en fertilizantes o en aplicaciones industriales para la reducción de NO<sub>x</sub>. La biomasa puede transformarse en amoníaco mediante diversos métodos, como la gasificación con aire para formar syngas (una mezcla de hidrógeno y CO), el cual puede ser procesado para obtener amoníaco después de eliminar el carbono. Alternativamente, la biomasa puede ser gasificada y metanizada para producir biometano o biogás, que luego se utiliza como materia prima. El biometano también puede ser producido mediante la digestión anaeróbica de la biomasa. Aunque el bioamoníaco no se produce comercialmente en la actualidad, todos los pasos del proceso de conversión de la biomasa en amoníaco han sido demostrados comercialmente. (Jose Fuster Justiniano, 2022).

Fig. 1-9. Métodos de producción de amoníaco verde.



Fuente: (Jose Fuster Justiniano, 2022)

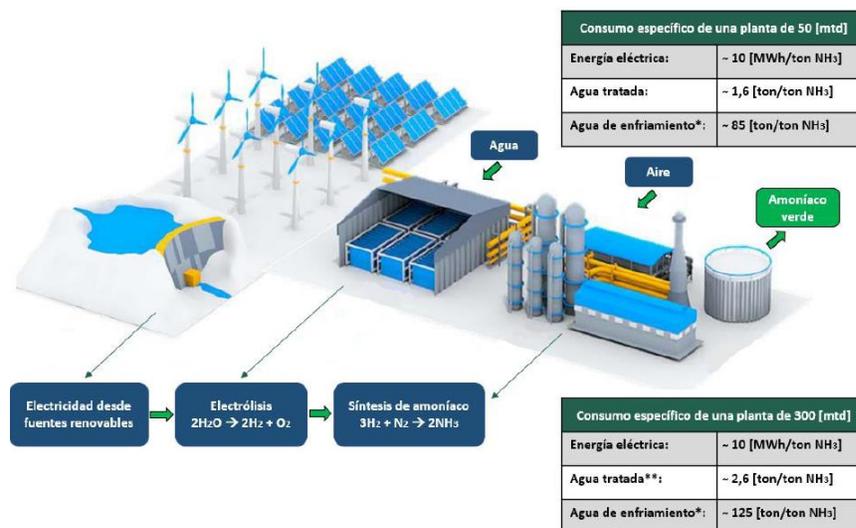
Para la electrólisis del agua, se emplean tres tecnologías principales: la electrólisis alcalina, la de membrana de intercambio protónico (PEM) y la de óxidos sólidos (SOEC). En la electrólisis alcalina, se utilizan dos electrodos separados por un diafragma, junto con un electrolito líquido alcalino que facilita la separación de los componentes del agua, dirigiendo los aniones hacia el cátodo. En los electrolizadores PEM, se reemplaza el electrolito líquido por una membrana polimérica sólida, lo que resulta en una mayor eficiencia en la separación de las moléculas de agua. Por otro lado, la tecnología SOEC opera a presiones y temperaturas más elevadas, cercanas a los  $900^{\circ}C$ , lo que permite mejorar la eficiencia en la separación de las moléculas de agua. Sin embargo, la tecnología SOEC es la menos desarrollada comercialmente de las tres. (Jose Fuster Justiniano, 2022)

En la actualidad, la producción de amoníaco verde es prácticamente inexistente en todo el mundo, sin embargo, se espera que esta situación cambie en la próxima década. Varios proveedores de combustibles y tecnología están trabajando en soluciones que permitan producir amoníaco verde a escala comercial. Entre estos, se destaca la empresa alemana Thyssenkrupp, que ha desarrollado dos conceptos de producción de amoníaco verde (ver Figura 1-10). Uno de estos conceptos es una instalación de escala local con capacidad para producir 50 toneladas métricas por día (mtpd), basada en una planta de electrólisis de 20 MW con una disponibilidad del 100%. El otro concepto es

una instalación de pequeña escala con capacidad de producción de 300 mtpd, utilizando una planta de electrólisis de 120 MW. Esta última se acerca a la escala industrial, lo que la convierte en una opción atractiva para la conversión de plantas tradicionales actualmente en funcionamiento.

Thyssenkrupp ha establecido planes concretos para demostrar estos conceptos. Uno de estos planes implica el diseño y suministro de una planta de hidrógeno verde para la empresa CF Industries. Esta instalación utilizará energía renovable de la red para producir hidrógeno verde a través de una planta de electrólisis alcalina de 20 MW. El hidrógeno generado se convertirá posteriormente en 20.000 toneladas anuales de amoníaco verde en las plantas de amoníaco existentes de CF Industries, ubicadas en el complejo de Donaldsonville en Luisiana, EE.UU. Según las publicaciones de Thyssenkrupp, el proyecto ya ha comenzado actividades de ingeniería y adquisición, y se espera que entre en operación en 2023. *Fuente:* (Jose Fuster Justiniano, 2022).

*Fig. 1-10. Planta de producción de amoníaco verde de pequeña escala de Thyssenkrupp.*

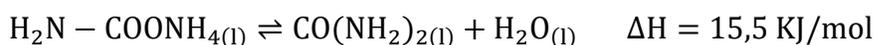


*Fuente:* (Jose Fuster Justiniano, 2022)

### 1.3.2. Proceso de producción de Urea a nivel industrial

La síntesis de urea a nivel industrial se lleva a cabo mediante la combinación de amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) líquido y anhídrido carbónico ( $\text{CO}_2$ ) gaseoso. Este proceso se realiza en dos etapas. En la primera etapa, los reactivos mencionados reaccionan para formar un producto intermedio conocido como carbamato de amonio. Posteriormente, en la segunda etapa, el carbamato de amonio se deshidrata para dar lugar a la formación de urea.

Surge un problema debido a las diferencias en las velocidades de reacción. La primera etapa de la reacción es considerablemente más rápida que la segunda, lo que resulta en la acumulación de carbamato intermedio. Además, la primera reacción no se completa en su totalidad, lo que conduce a la presencia de amoníaco y dióxido de carbono libres. Es importante destacar que el carbamato es altamente corrosivo. Por lo tanto, se opta por degradar la parte del carbamato no convertida en urea en sus reactivos originales y luego volver a formarlo.



$\text{H}_2\text{N} - \text{COONH}_4(\text{l}) = \text{Carbamato}$

$\text{CO}(\text{NH}_2)_2(\text{l}) = \text{Urea}$

Vemos que la primera reacción es exotérmica, y la segunda es endotérmica.

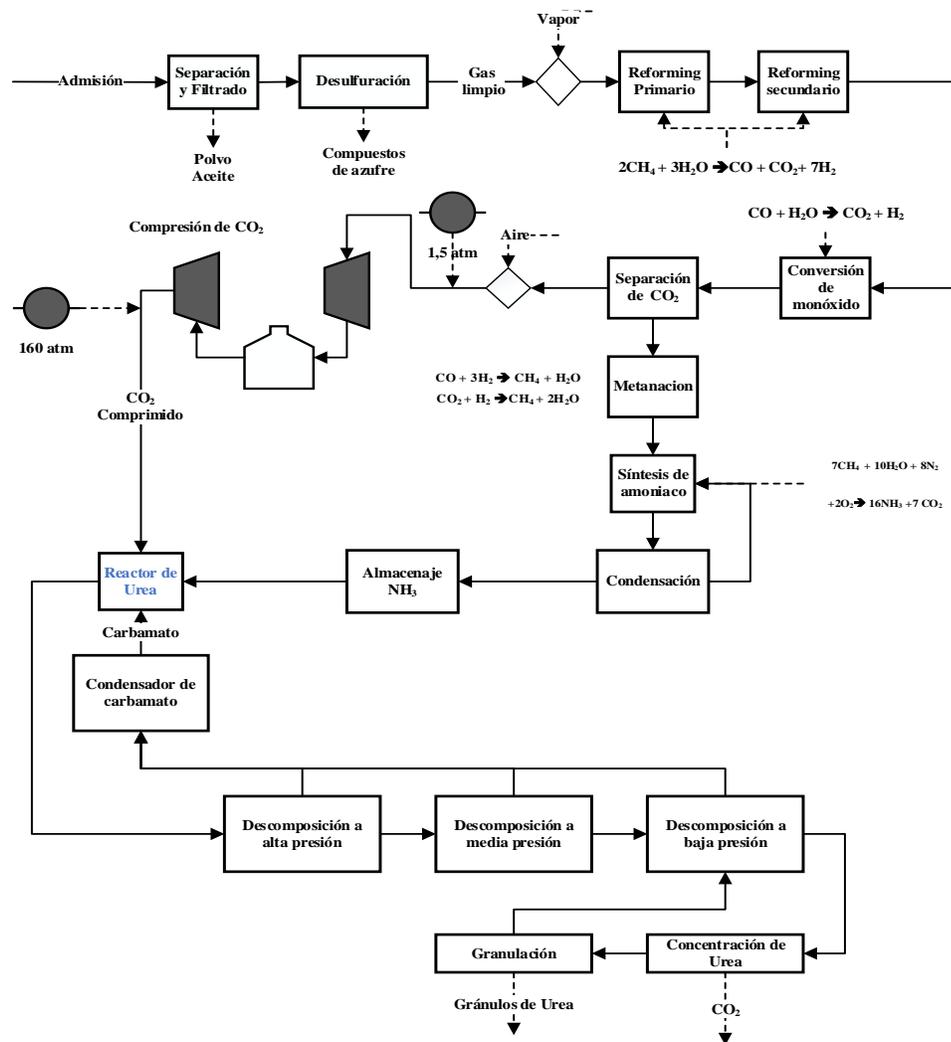
Un problema en el proceso surge durante el segundo paso de la reacción, donde se forma un producto conocido como biuret. El biuret se genera mediante la unión de dos moléculas de urea con la pérdida de una molécula de amoníaco. Este producto es indeseable debido a su naturaleza tóxica. Por esta razón, es crucial implementar un control adecuado para evitar su formación.

#### 1.3.2.1. Proceso de obtención de urea por el proceso thermo-urea

El proceso completo de producción de la urea puede separarse en las siguientes etapas.

- I. Obtención de  $\text{CO}_2$
- II. Obtención de amoníaco
- III. Formación de carbamato
- IV. Degradación del carbamato y reciclado
- V. Síntesis de urea
- VI. Deshidratación concentración y granulación

Fig. 1-11. Diagrama del proceso completo de producción de urea.

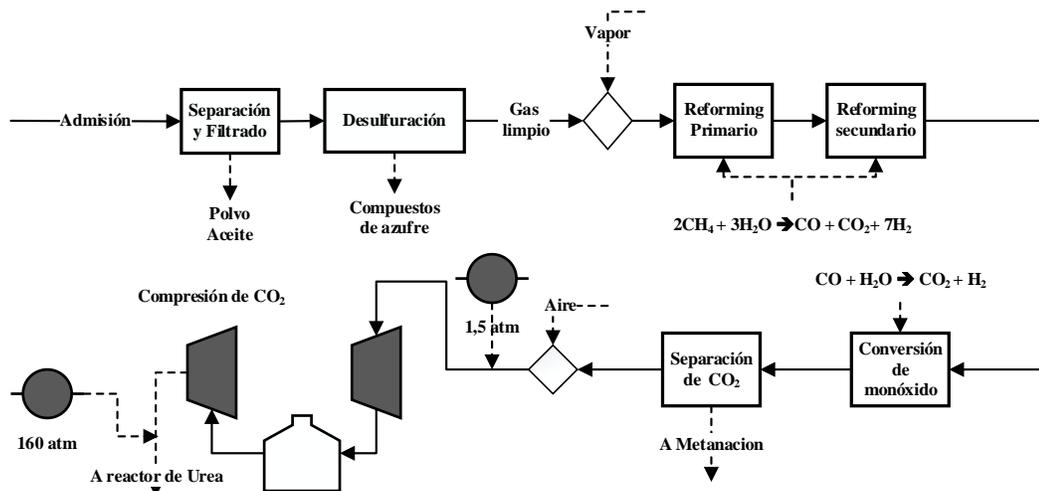


Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

### 1.3.2.1.1. Obtención de CO<sub>2</sub>

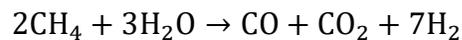
El CO<sub>2</sub> se obtiene a partir de gas natural, mediante la reacción conocida como reforming. Antes del reforming, deben separarse las impurezas del gas, tales como gotas de aceite, partículas de polvo, y sobre todo desulfurar el gas, ya que el azufre interfiere con la acción de los catalizadores.

Fig. 1-12. Diagrama de obtención de CO<sub>2</sub>.



Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

Luego de purificar el gas, se procede a la obtención de CO<sub>2</sub> mediante dos etapas de reforming catalítico con vapor de agua. El calor necesario para la reacción, la cual es endotérmica, proviene de la combustión del gas natural y de los gases parcialmente reformados. Se deja entrar aire al reactor para obtener la relación necesaria de H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> para la posterior obtención del amoníaco. La reacción es la siguiente:



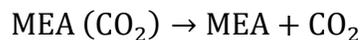
Las dos etapas de reforming se verifican según la reacción expuesta, y a la salida de la segunda etapa, se obtiene un gas con las siguientes proporciones:

- 56% H<sub>2</sub>,
- 12% CO,

- 8% CO<sub>2</sub>,
- 23% N<sub>2</sub>
- 0,5% CH<sub>4</sub>.

Para eliminar el CO y convertirlo en CO<sub>2</sub>, se realiza la conversión de CO haciendo que reaccione catalíticamente con vapor de agua para formar CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> usando hierro y cobre como catalizadores.

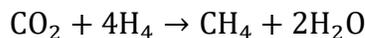
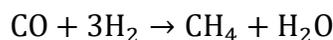
Del gas resultante se separa el CO<sub>2</sub> mediante una solución de mono etanol amina (MEA), mediante la siguiente reacción:



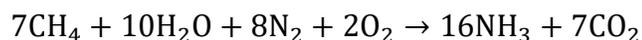
El dióxido resultante es enviado a dos etapas sucesivas de compresión en las cuáles se eleva la presión a 160 atmósferas absolutas. Al dióxido se le agregan pequeñas cantidades de aire pasivante para inhibir la acción corrosiva.

#### **1.3.2.1.2. Obtención de amoníaco**

El otro reactivo necesario para la producción de urea es el amoníaco. Éste se obtiene a partir del gas reformado separado del CO<sub>2</sub>. Se produce primeramente una etapa de Metanación para convertir a metano las bajas proporciones que quedan de CO y CO<sub>2</sub> en circulación, dado que éstos interferirían en la acción del catalizador en la etapa final de síntesis del amoníaco.

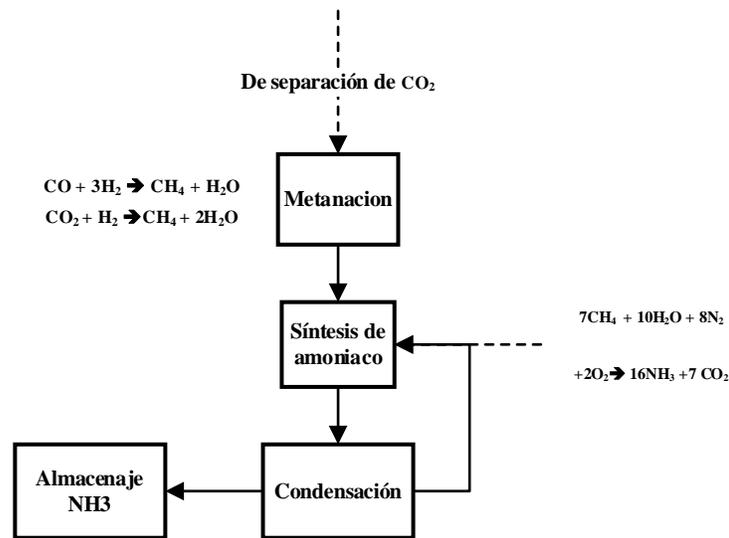


Luego de la Metanación, el gas circulante se compone de aire, metano y vapor de agua, los cuales reaccionan con catalizador de hierro para formar amoníaco en estado gaseoso según:



El amoníaco gaseoso se condensa por enfriamiento y se separa del gas para almacenarlo a presión de unas 13 atmósferas. El amoníaco gaseoso remanente es recirculado al loop de síntesis.

Fig. 1-13. Diagrama de obtención de amoniaco



Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

### 1.3.2.1.3. Formación de carbamato

La reacción de síntesis de Urea se lleva a cabo a altas presiones (200 bar) y el nivel térmico óptimo (190°C) en un reactor construido en acero inoxidable especial.

La reacción se produce entre el amoníaco, el CO<sub>2</sub> y la solución reciclada de carbamato, proveniente de la etapa de absorción.

El carbamato de amonio se forma a partir de CO<sub>2</sub> y NH<sub>3</sub> según la siguiente reacción (esta reacción genera calor):



Antes de ingresar al reactor, el CO<sub>2</sub> es comprimido hasta 200 atm, mediante un compresor eléctrico y el amoníaco hasta 145 atm.

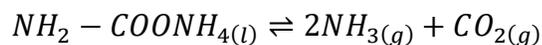
El  $\text{NH}_3$  y el  $\text{CO}_2$  reaccionan rápida y exotérmicamente, en una primera etapa, para formar el carbamato, que luego se deshidrata a urea + agua. Esta reacción logra cerca del 100% en condiciones normales.

#### 1.3.2.1.4. Degradación del carbamato y reciclado

No todo el Carbamato de Amonio se descompone en Urea y Agua. La fracción que se descompone para formar urea en relación a la cantidad total que ingresa al reactor se denomina conversión. La conversión de Carbamato en urea en el reactor está en el orden de 70%. Es decir que de cada 100 Kg de carbamato que se forman, sólo 70 Kg pasan a Urea. El resto debe reciclarse permanentemente y en forma continua al reactor para lograr una conversión total.

Como se había visto, el carbamato se forma mucho más rápido que la urea. Al ser altamente corrosivo, su manejo es muy difícil. Por esta razón, lo que se hace es degradarlo nuevamente a  $\text{NH}_3$  y  $\text{CO}_2$  para luego volver a formarlo.

La reacción de descomposición:



Se logra de dos formas:

- Bajando la presión y temperatura, se desplaza el equilibrio hacia los reactivos. Luego la mezcla gaseosa se vuelve a comprimir causando su recombinación. Si hay amoníaco en exceso, este se separa en forma gaseosa de la solución de carbamato. Para disminuir los costos totales de la recompresión, esta se realiza en dos etapas.
- La otra forma es mediante el stripping del amoníaco, desplazando la reacción hacia productos. Al bajar la presión parcial del reactivo, el sistema evoluciona hacia su equilibrio degradando el carbamato. Esta forma tiene la ventaja de poder hacerse a la presión de síntesis, lo que reduce el costo de recompresión.

### 1.3.2.1.5. Síntesis de urea

El carbamato se deshidrata a urea mediante la reacción:



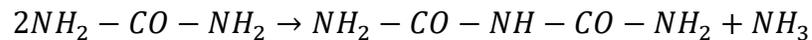
Como se ve, la reacción es endotérmica, y habíamos dicho que es mucho más lenta que la de producción de carbamato. La cinética de la reacción aumenta con la temperatura, con una mayor relación  $NH_3/CO_2$  y disminuye con una mayor presencia de agua.

La producción de la Urea se realiza en un reactor vertical, que opera a 188–190°C y 160 Kgf/cm<sup>2</sup> absoluta, una relación N/C de 3,6 – 3,8, un tiempo de residencia de alrededor de 45 minutos y un grado de conversión (en un paso) del 65 – 70 %.

Esta operación combina la formación de carbamato (exot., rápida) en su parte inferior, por la alimentación de  $CO_2$  y  $NH_3$  en exceso y la descomposición del carbamato en urea (mucho más lenta y endotérmica).

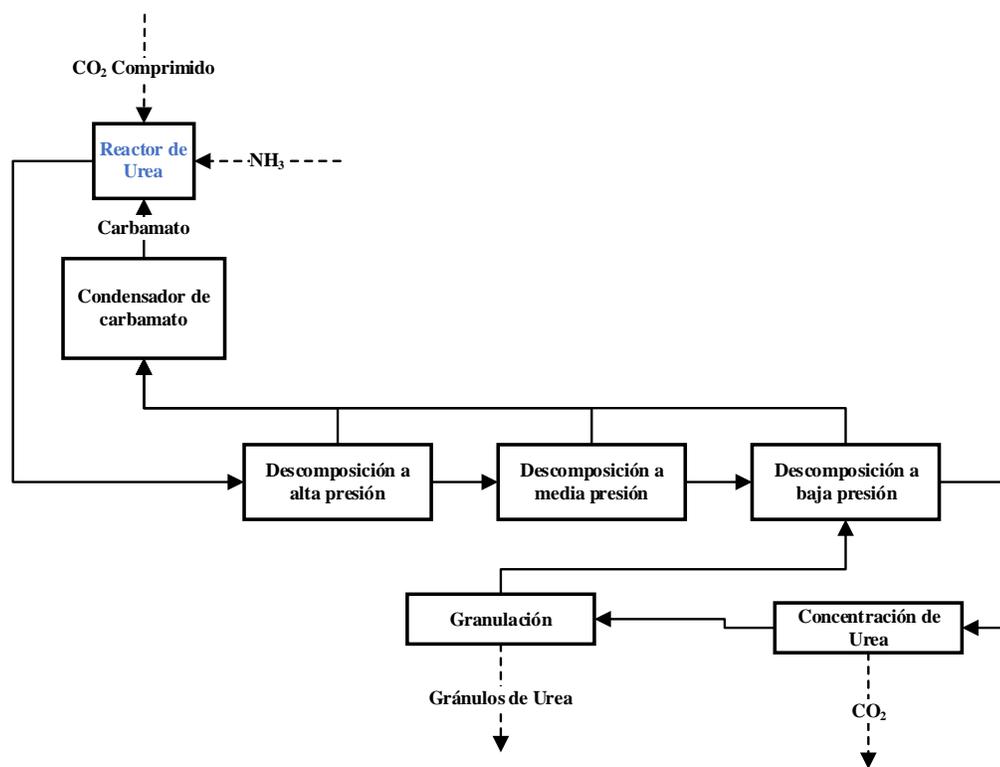
### 1.3.2.1.6. Formación de Biuret

El biuret se forma cuando dos moléculas de urea se unen liberando una molécula de amoníaco según



Se trata de una sustancia altamente tóxica para las plantas, por lo cual su concentración en la urea debe ser muy baja, menor al 0.4%. Para lograr bajas concentraciones se usa un exceso de amoníaco en la síntesis de urea.

Fig. 1-14. Diagrama de síntesis de Urea



Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

### 1.3.2.1.7. Deshidratación, concentración y granulación

#### I. Concentración

La corriente de Urea y agua obtenida en las etapas de Descomposición, la cual contiene aproximadamente 70% de Urea, es concentrada al 80% en un concentrador de vacío mediante la aplicación de calor externo utilizando vapor de agua. Esta corriente se denomina Urea de Síntesis, y es bombeada hacia la unidad de Evaporación.

#### II. Evaporación

La corriente proveniente del Concentrador se sigue concentrado en dos etapas de Evaporación, la primera de ellas (se concentra hasta 95 %) operando a 0.3 Kg/cm<sup>2</sup> absolutos y la segunda (se concentra hasta 99.8 %) a muy alto vacío, para lograr la evaporación del agua sin descomponer térmicamente la Urea. Un equipo clave de esta

etapa es un eyector de importantes dimensiones que permite lograr los niveles de vacío requeridos.

Se obtiene de este modo una corriente de Urea fundida a 132 °C con muy bajo contenido de agua, del orden de 0.5%. Esta corriente es enviada a la Torre de Prilling para la formación de perlas de Urea.

### **III. Granulación**

Luego se pasa al perlado de Urea (formación de pequeñas perlas del orden de 2 – 4 mm de diámetro) se realiza en la Torre de Perlado (Torre de Prilling).

La Urea fundida es bombeada a la parte superior de la torre de 80m de altura y 16m. de diámetro. Mediante un canasto giratorio con unas 6000 pequeñas perforaciones se logra obtener una lluvia de Urea fundida, cuyas gotas se van solidificando primero y enfriando luego durante su caída libre, a la vez que se hace circular aire en sentido contrario mediante grandes ventiladores ubicados en la parte superior de la torre.

Se obtiene de este modo el producto final, a unos 40 – 50°C de temperatura, el cual es transportado mediante elevadores y cintas a los silos de almacenaje.

#### **1.4. Planta de Bulo-Bulo Cochabamba**

##### **1.4.1. Historia de la planta de Bulo-Bulo**

El 24 de octubre de 2011, 16 meses después de la presentación del proyecto de Carrasco, el director de YPFB anunció la contratación de una empresa para construir la planta de amoniaco-urea en el municipio de Entre Ríos, provincia de Carrasco, en el departamento de Cochabamba. Esto incluía el diseño del paquete de procesos (PDP), el diseño final de ingeniería (FEED), así como la ingeniería de detalle, la procura, la construcción y la puesta en marcha. (YPFB, Directorio de YPFB aprueba licitación para el Proyecto Planta Urea y Amoniaco, 2011).

YPFB invitó a 20 empresas en el marco de la normativa especial emitida para las Empresas Públicas Nacionales Estratégicas (EPNE). De las empresas que respondieron, se preseleccionaron cinco, y finalmente se seleccionó a la empresa

coreana Samsung, que presentó una oferta de \$US 843,90 millones, lo que representaba \$US 256,10 millones menos que el precio referencial de \$US 1,100 millones. (La Razón, 2015).

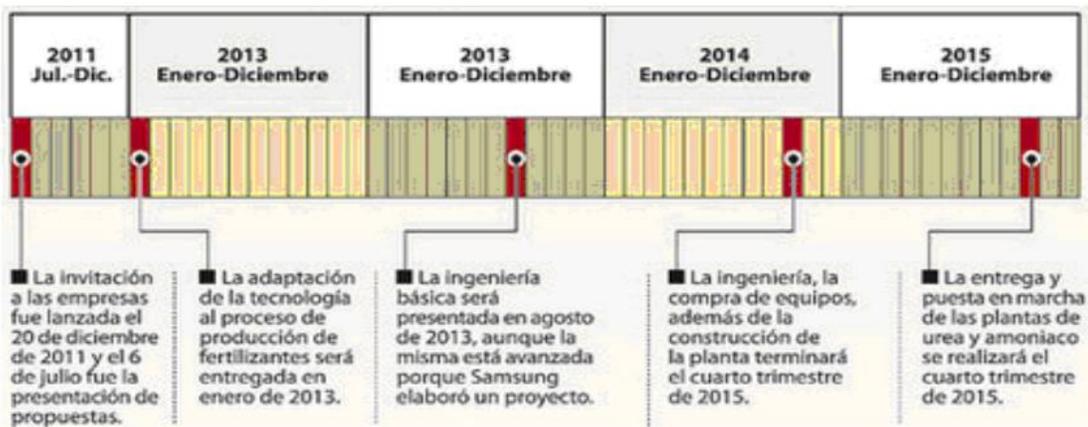
El 12 de septiembre de 2012 se firmó el contrato con modalidad de llave en mano y también se supo que la empresa adjudicataria está autorizada a incrementar hasta un 15% del monto ofertado (\$US 126,60 millones), lo que permitiría invertir un total de \$US 9700,48 millones, como se muestra en las *figuras 1-15 y 1-16*.

*Fig. 1-15. Empresas pre-seleccionadas*



*Fuente: (La Razón, 2015)*

*Fig. 1-16. Cronograma de implementación de amoníaco-urea de Bulobulo*



*Fuente: (Sol de Pando, 2015)*

La Planta de Amoniac y Urea (PAU) es uno de los proyectos más grandes de Bolivia en los últimos tiempos, con una inversión de \$US 953 millones y una capacidad de producción de 693,000 toneladas métricas al año de urea.

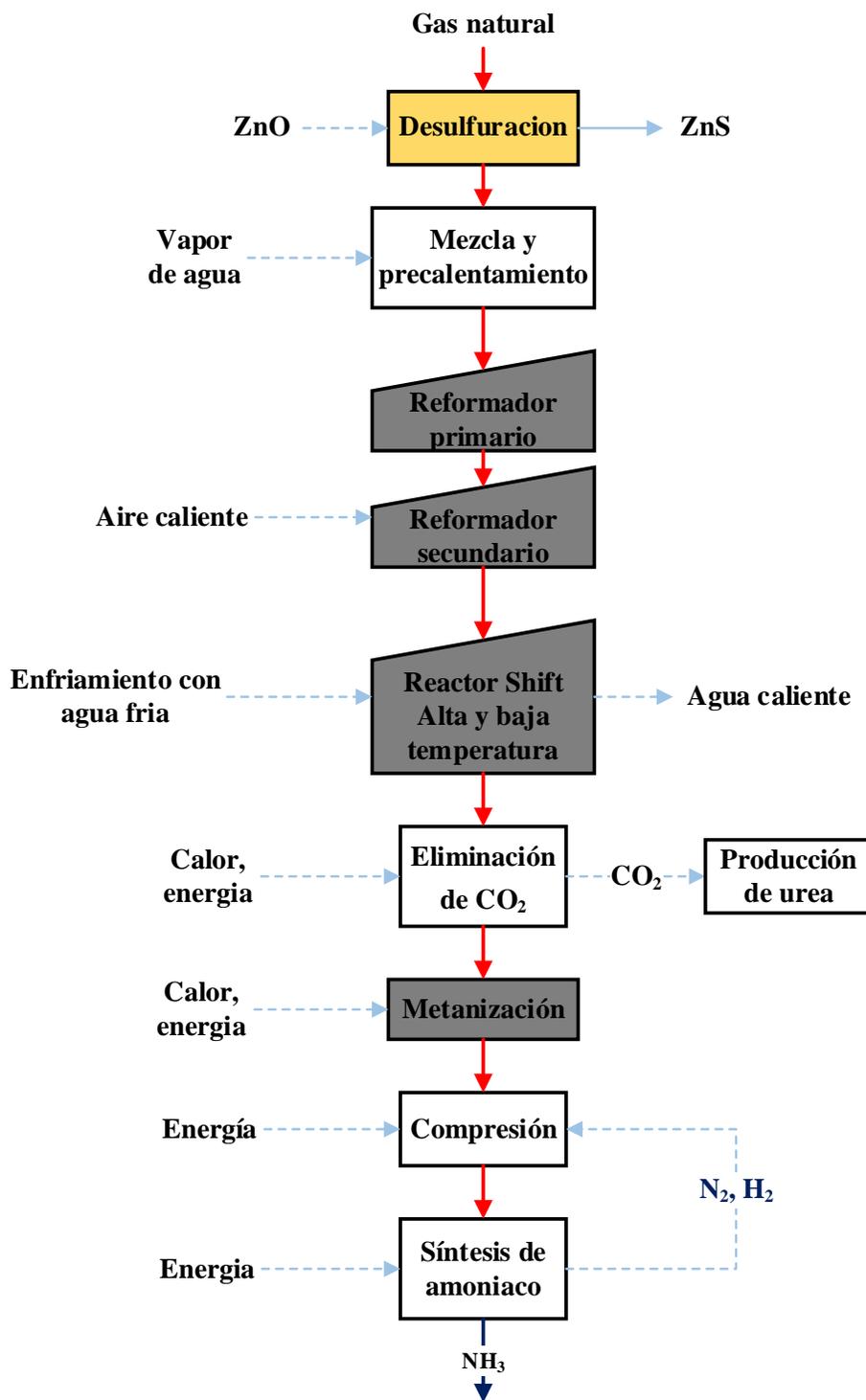
En 2023, YPFB registró una producción aproximada de 347,000 toneladas métricas de urea, lo que consolidó a Bolivia como el principal proveedor de urea granulada en la región. De esta producción, alrededor de 142,000 toneladas métricas fueron exportadas a países como Argentina, Brasil, Perú, Paraguay y Uruguay.

#### **1.4.2. Proceso de obtención de amoniac en la planta de Bulo-Bulo**

La planta de Bulo-Bulo utiliza el proceso de producción de amoniac conocido como "*Proceso de reformado con vapor*". Esta elección se debe al uso de gas natural como materia prima, un recurso natural abundante en el país. Este proceso ha sido detalladamente explicado en el punto "*1.3.1.1 Proceso de obtención de amoniac mediante reformado de vapor*". Ahora, procederemos a mencionar los subprocesos involucrados en la producción de amoniac mediante el "*Proceso de reformado con vapor*"

1. Desulfuración.
2. Reformador primario.
3. Reformador secundario.
4. Conversión catalítica.
5. Eliminación del CO<sub>2</sub>.
6. Metanación.
7. Compresión.
8. Síntesis de amoniac.

Fig. 1-17. Producción de amoníaco mediante el proceso KBR



Fuente: (Ducoy & Javier , 2018)

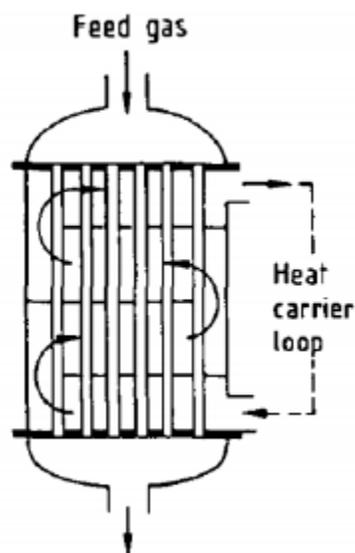
### 1.4.3. Equipos que intervienen en la producción de amoniaco

Para el proceso de obtención de amoniaco, la planta de bulo-bulo utiliza la tecnología y licencia “*KBR*”, una empresa sur coreana que diseñó el proceso que es utilizado en la planta, a partir de esto se explicaran los equipos más relevantes del proceso.

#### 1.4.3.1. Reformado primario y secundario (reactor de lecho fijo multitubular)

Estos reactores emplean cargas de catalizador y distribuyen el flujo de fluido a través de múltiples tubos. Se componen de una carcasa que alberga los tubos donde ocurre la reacción, mientras que el fluido que refrigera o aporta calor al proceso circula por fuera de los tubos. Su funcionamiento es análogo al de varios reactores de lecho fijo simples operando en paralelo. Este diseño ofrece la ventaja de un control de temperatura más eficaz debido al menor diámetro de los tubos, lo que reduce la formación de puntos calientes. Sin embargo, la limpieza y recarga de catalizador presenta dificultades debido a la complejidad geométrica del reactor y al gran número de tubos que deben ser mantenidos.

*Fig. 1-18. Reactor lecho fijo multitubular*



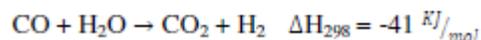
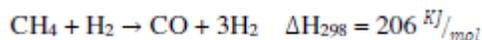
*Fuente: ( EIGENBERGER fixed bed reactors,, 1992)*

El gas de síntesis mediante reformado de gas natural con vapor de agua se produce en un reactor de lecho fijo multitubular, ya que es el que reúne las condiciones adecuadas para que pueda llevarse a cabo la reacción.

Las reacciones de reformado se llevan a cabo en reactores tubulares conocidos como hornos. Estos hornos contienen una serie de tubos rellenos de catalizador donde ocurre la reacción química. Debido a las altas temperaturas y presiones presentes dentro del reactor (aproximadamente 800-1000°C y 30 bar), es fundamental que los tubos estén fabricados con una aleación de acero inoxidable-cromo de alta calidad para garantizar la seguridad y estabilidad del proceso.

Los tubos donde ocurre la reacción catalítica se encuentran en la sección radiante de un horno, llamado reformador primario. En esta sección, varias llamas calientan las paredes de los tubos, lo que permite la transferencia de calor, principalmente por radiación, aunque también por convección, directamente entre la llama y la superficie del tubo. Los tubos están dispuestos verticalmente y en paralelo entre sí. El número típico de tubos varía de 40 a 400 unidades, con longitudes de 10 m o 18 m y diámetros interiores que oscilan entre 7,5 y 15 cm. Cada tubo se considera un reactor independiente, y cuando el gas sale de cada tubo, se combina para formar una corriente de salida común.

Al gas limpio de azufre, se le inyecta vapor de agua llegando al reformador primario y donde, pasado por un catalizador de níquel, se convierte cerca de un 70% de la alimentación de hidrocarburos en gas de síntesis. Las principales reacciones son:

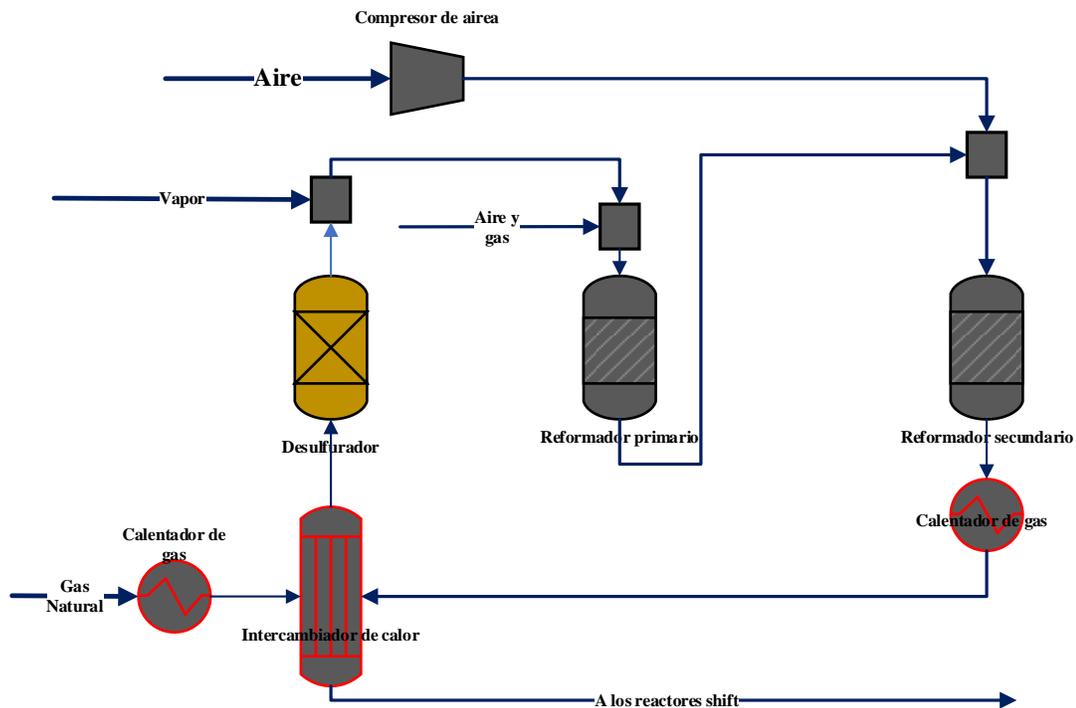


Las reacciones son endotérmicas, así el suministro de calor para el reformador es requerido para mantener la temperatura deseada de reacción (800°C) saliendo CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, y H<sub>2</sub>O con una presión entre 20-50bar.

En el reformador secundario, revestido con material refractario y equipado con un catalizador de níquel, se introduce aire previamente comprimido para proporcionar

nitrógeno y lograr una relación de 3:1 de hidrógeno a nitrógeno en el gas de síntesis. El gas que sale del reformador secundario, a una temperatura de 1000°C, se utiliza para precalentar el gas natural que entra recién en el desulfurador.

Fig. 1-19. Proceso de reformado primario y secundario



Fuente: (Gozaga, 2019)

Los objetivos del reformador primario son de:

- Producir  $H_2$  por reacción de gas natural pre-tratado de alimentación con vapor en presencia de un catalizador de níquel.
- La reacción ocurre en los tubos empacados de catalizador contenidos en la sección radiante.
- V/C es mantenida en 2,7.
- El flujo de gas de alimentación es controlado por el controlador de porcentaje.

(Emmanuel Sansusth, 2020)

Tabla I-7. Composiciones del gas de proceso en la entrada y salida del reformador primario

COMPOSICIÓN DEL GAS DE PROCESO DE ALIMENTACIÓN (%MOLAR) BASE SECA	COMPOSICIÓN DEL GAS DESPUÉS DE LA REFORMACIÓN PRIMARIA (%MOLAR) EN BASE SECA
H <sub>2</sub> :2,08	H <sub>2</sub> :54,22
N <sub>2</sub> :1,3	N <sub>2</sub> :0,54
CH <sub>4</sub> :94,67	CH <sub>4</sub> :29,22
AR:0,00	AR:0,00
CO:0,00	CO:4,52
CO <sub>2</sub> :1,95	CO <sub>2</sub> :11,44

Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Factores que afectan la reformación primaria

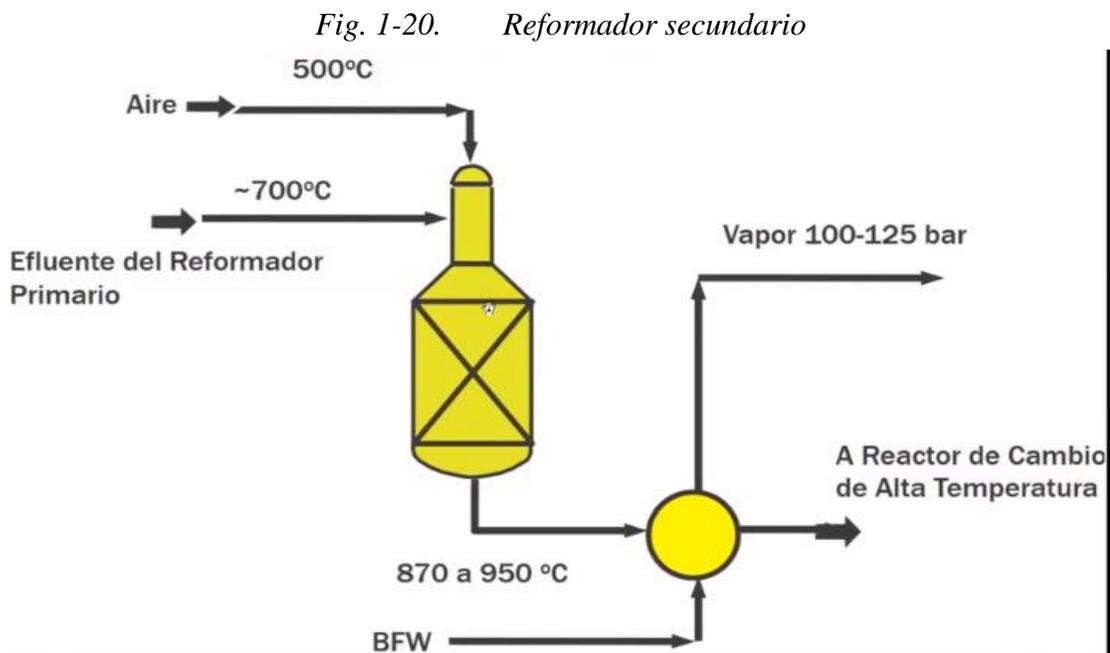
- Temperatura.
- Porcentaje de vapor a carbón (V:C).
- Presión.
- El horno de reformación está diseñado para alcanzar la máxima eficiencia térmica mediante la utilización del escape de la turbina de gas como aire de combustión precalentado.
- Utiliza los gases residuales de proceso como parte del combustible.
- El gas reformado sigue tomando calor en los tubos o tuberías colectoras al salir de la sección radiante.
- La temperatura de diseño de la pared del tubo 840°C.

- Baja T incrementa el deslizamiento de  $\text{CH}_4$  y por lo tanto reduce el  $\text{H}_2$ .
- Mayor T incrementa el riesgo de una falla prematura en el tubo.

#### Objetivos del reformador secundario

- Se necesita de  $\text{N}_2$  para hacer amoniaco.
- Se desea hacer el reformador primario tan pequeño como sea posible.
- Minimizar el exceso de metano; el metano es un inerte en el lazo de síntesis del amoniaco.
- Este proceso está hecho primeramente mezclando aire de proceso con el gas parcialmente reformado del reformador primario. El oxígeno en el aire combustiona, parte del gas de proceso, generando calor que suministra el calor necesario para su posterior reformación por vapor conforme el gas pasa abajo a través de la cama catalizadora de Níquel.

(Emmanuel Sansusth, 2020)



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Tabla I-8. Composición del gas de proceso en la entrada y salida del reformador secundario

COMPOSICIÓN DEL GAS DE PROCESO DE ALIMENTACIÓN (%MOLAR) BASE SECA	COMPOSICIÓN DEL GAS DESPUÉS DE LA REFORMACIÓN SECUNDARIA (%MOLAR) EN BASE SECA
H <sub>2</sub> :54,22	H <sub>2</sub> :48,68
N <sub>2</sub> :0,54	N <sub>2</sub> :29,64
CH <sub>4</sub> :29,22	CH <sub>4</sub> :1,75
AR:0,06	AR:0,38
CO:4,52	CO:11,29
CO <sub>2</sub> :11,44	CO <sub>2</sub> :8,25

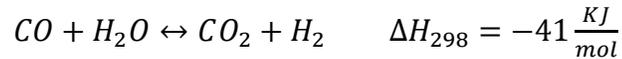
Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

#### 1.4.3.2. Conversión shift y metanización

La conversión shift involucra dos etapas:

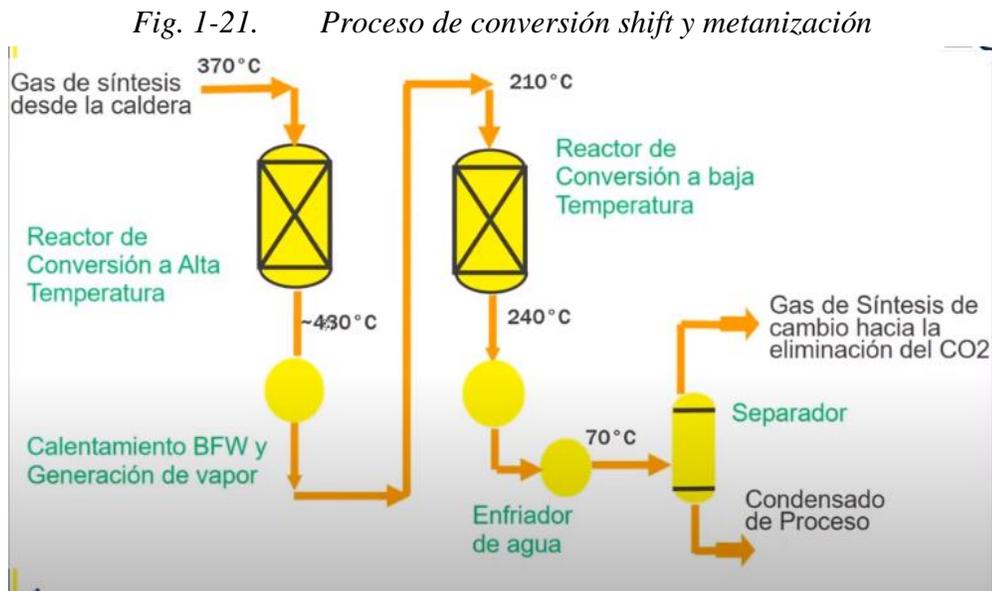
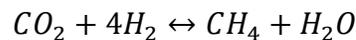
1. Shift a altas temperaturas: donde se tiene un catalizador de óxido de hierro y óxido de cromo.
2. Shift a bajas temperaturas: se tienen catalizadores de óxido de cobre y óxido de zinc.

Los convertidores eliminan el monóxido de carbono generado durante el reformado, convirtiéndolo en dióxido de carbono mediante la reacción:



Esta reacción proporciona hidrógeno adicional para la síntesis del amoníaco. El efluente del último convertidor se enfría y el agua condensada se separa. El gas se purifica en una planta de MEA mediante la eliminación del dióxido de carbono del gas de síntesis (también se puede utilizar carbonato caliente o Selexol).

Después de la purificación, todavía quedan trazas de CO y CO<sub>2</sub>, que se eliminarán en el metanador reaccionando:



*Fuente:* (Emmanuel Sansusth, 2020)

La mayor parte de la reacción de cambio se lleva a cabo en la primera fase (HTS). Aproximadamente 70% del CO en el efluente del reformador secundario se convierte en CO<sub>2</sub>.

En la conversión de alta temperatura se utiliza un catalizador de óxido de hierro.

El efluente del convertidor HTS se enfría por calentamiento de BFW y generando vapor a alta presión en el efluente HTS/Precalentador BFW y generador de vapor.

*Tabla I-9. Composición en la entrada y salida de la conversión shift a alta temperatura*

<b>COMPOSICIÓN DEL GAS DE ALIMENTACIÓN HACIA EL CONVERTIDOR HTS (%MOLAR) EN BASE SECA</b>	<b>COMPOSICIÓN DEL GAS DE DESPUÉS DEL CONVERTIDOR HTS (%MOLAR) EN BASE SECA</b>
H <sub>2</sub> :48,68	H <sub>2</sub> :52,46
N <sub>2</sub> :29,64	N <sub>4</sub> :27,46
CH <sub>4</sub> :1,75	CH <sub>4</sub> :1,62
AR:0,38	AR:0,35
CO:11,29	CO:3,11
CO <sub>2</sub> :8,25	CO <sub>2</sub> :15

*Fuente:* (Emmanuel Sansusth, 2020)

Características de la conversión de alta Temperatura:

- El catalizador HTS funciona típicamente a presiones entre la atmosférica y 655 psig (45 bar).
- Las temperaturas de entrada del reactor normales van de inicio de valores bajos como 315°C hasta 380°C.

- Debido a que la reacción de cambio de CO genera calor, se observará un aumento de la temperatura en toda la cama de catalizador.
- Para obtener la conversión de monóxido de carbono especificada con el catalizador HTS, las principales variables de operación son la temperatura y la relación vapor de agua-gas.
- Es costumbre mantener la temperatura de operación en o debajo de nivel de diseño para minimizar la desactivación del catalizador.
- Al aumentar el flujo de vapor aumenta la conversión de CO si la conversión ya está cerca del equilibrio.

#### Características de la conversión de baja Temperatura:

- Usado para convertir el restante de monóxido de carbono.
- El monóxido de carbono reacciona con vapor de agua para formar cantidades equivalente de hidrógeno y dióxido de carbono.
- La conversión es favorable termodinámicamente a temperaturas bajas.
- La temperatura se mantiene a 210°C.
- El convertidor LTS contiene catalizador de cobre/zinc.
- El catalizador es relativamente más caro que el catalizador en el convertidor HTS y también es más sensible a las impurezas tales como azufre en el gas de proceso.
- Un cambio de 0,1% en la salida de CO se traduce en 1,0% de producción de amoníaco adicional.
- El catalizador LTS se hace funcionar típicamente a presiones entre la atmosférica y 600 psig (41 bar).

- La temperatura de funcionamiento de entrada normales del reactor será desde 195°C hasta 225°C.

(Emmanuel Sansusth, 2020)

*Tabla I-10. Composición en la entrada y salida de la conversión shift a baja temperatura*

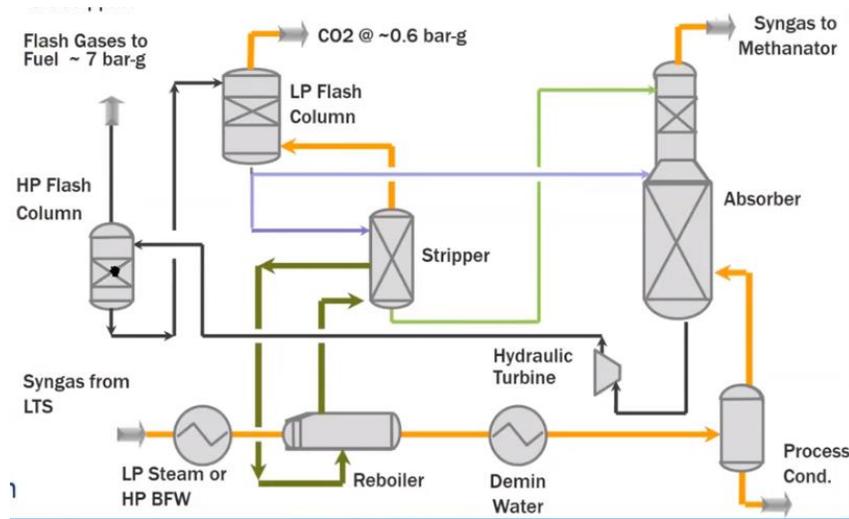
<b>COMPOSICIÓN DEL GAS DE ALIMENTACIÓN HACIA EL CONVERTIDOR LTS (%MOLAR) EN BASE SECA</b>	<b>COMPOSICIÓN DEL GAS DE DESPUÉS DEL CONVERTIDOR LTS (%MOLAR) EN BASE SECA</b>
H <sub>2</sub> :52,46	H <sub>2</sub> :53,76
N <sub>2</sub> :27,46	N <sub>2</sub> :26,71
CH <sub>4</sub> :1,62	CH <sub>4</sub> :1,57
AR:0,35	AR:0,34
CO:3,11	CO:0,29
CO <sub>2</sub> :15	CO <sub>2</sub> :17,32

*Fuente:* (Emmanuel Sansusth, 2020)

#### **1.4.3.3. Eliminación del CO<sub>2</sub>**

La eliminación del CO<sub>2</sub> se realiza a través del proceso de OASE- bajo la licencia de BASF, se seguiría el siguiente diagrama:

Fig. 1-22. Proceso de eliminación de CO<sub>2</sub>



Fuente: (Emmanuel Sansuth, 2020)

Este es un proceso que tiene que hacer su propio estudio a fondo, pero se va a mencionar cual es el funcionamiento del proceso.

Factores de eliminación del CO<sub>2</sub>:

- Flujos de solución pura y semi-pura.
- Temperatura de la solución pura y semi-pura.
- Temperatura de entrada de la alimentación de proceso.
- La tasa de purificación de la solución y la temperatura determinan el paso del CO<sub>2</sub>.
- La absorción de CO utilizando la solución semi-pura regenerada parcialmente a 79°C, donde el CO<sub>2</sub> en el gas de proceso se absorbe en la solución a una temperatura alta con una mayor velocidad de reacción.
- En la segunda etapa, temperatura más baja. 50°C y solución pura completamente regenerada se utiliza para cumplir con el paso requerido de CO<sub>2</sub> en el gas tratado.

*Fig. 1-23. Torre de absorción Bulo-Bulo*



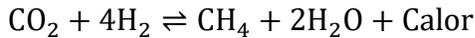
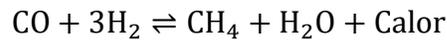
*Fuente: Elaboración propia*

#### **1.4.3.4. Metanización**

Es una etapa de purificación del gas de proceso en la que las pequeñas concentraciones residuales de monóxido de carbono (CO) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) se convierten catalíticamente en metano (CH<sub>4</sub>) mediante la reacción con hidrógeno. Este metano es eliminado corriente abajo mediante técnicas de purificación criogénica.

El alto contenido de dióxido de carbono hacia el purificador criogénico aguas abajo puede resultar en la solidificación del dióxido de carbono y obstruir la sección inferior de los intercambiadores de placas de aluminio del purificador criogénico. Esto se debe a que el CO<sub>2</sub> no se licua directamente, sino que pasa a estado sólido.

El monóxido de carbono es tóxico para el catalizador de síntesis descendente, por lo tanto, la eliminación de CO y CO<sub>2</sub> es obligatoria.



Características de la metanación:

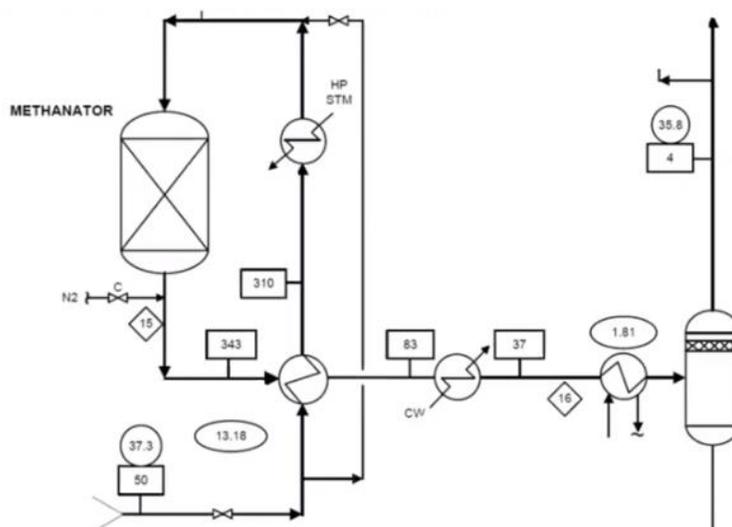
- Las reacciones son altamente exotérmicas.
- Las temperaturas deben mantenerse por encima de 300°C para iniciar la reacción de Metanación.
- El calor generado en la reacción es recuperado en el intercambiador de calor de alimentación del metanador/efluente.
- Los catalizadores de metanización consisten en óxido de níquel sobre alúmina.
- Temperaturas normales de operación varían entre 260-425°C.
- A causa del calor desprendido por la reacción y el consiguiente aumento de temperatura en la cama, la eliminación de las concentraciones de óxido de carbono en exceso de 2-3% en volumen no es recomendada.
- Operaciones prolongadas del metanador con temperatura de la cama por encima de 510°C puede causar una pérdida permanente de actividad.

Tabla I-11. Valores de temperatura máxima y mínima para la Metanación

<b>MÁXIMA</b>	510°C	Un funcionamiento continuo a alta temperatura causará la sinterización del catalizador y la pérdida permanente de la actividad
<b>ENTRADA MÍNIMA</b>	260°C	Operación a muy bajas temperaturas resulta en una actividad menor del catalizador y puede causar una fuga de óxido de carbono inaceptablemente alta

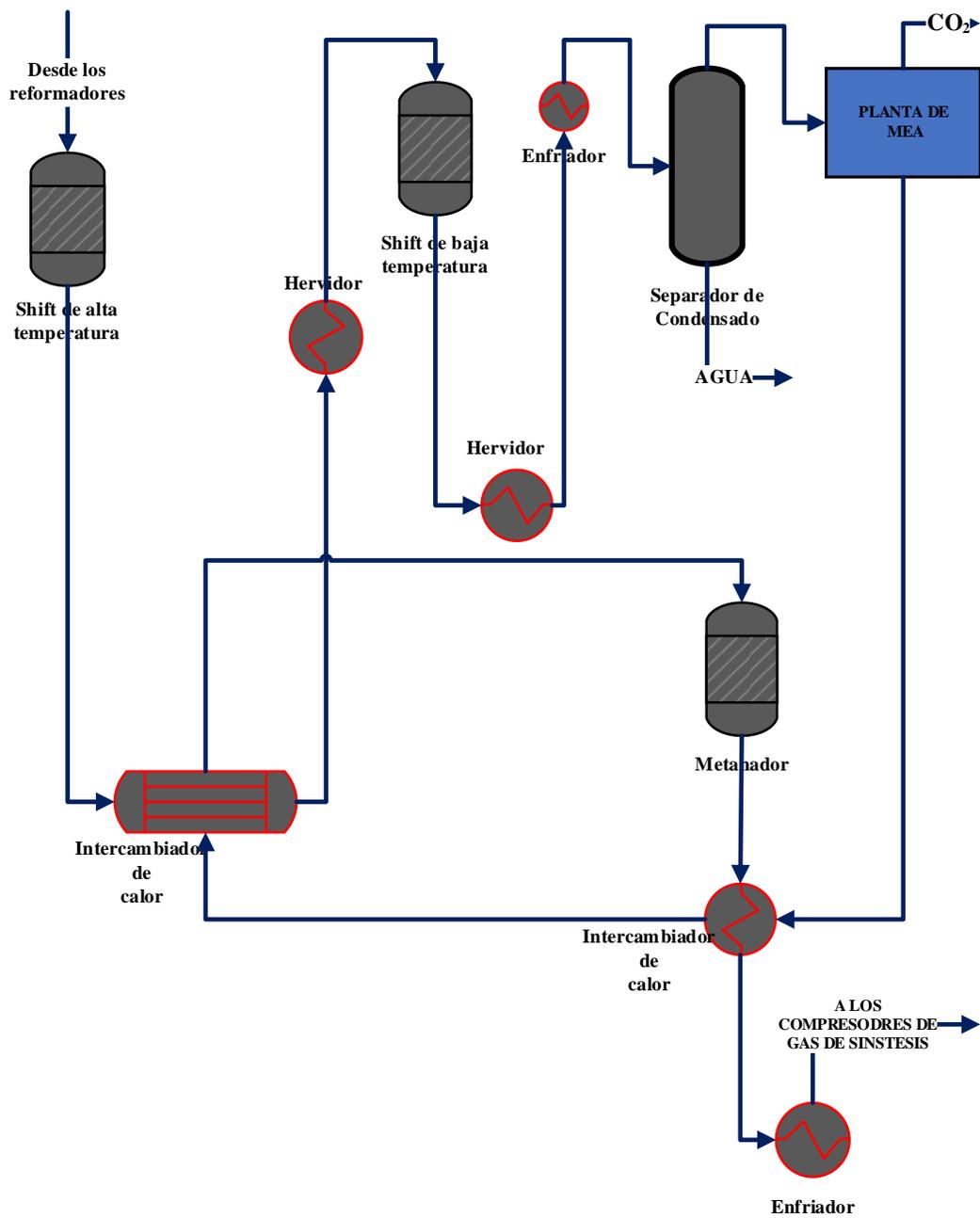
Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Fig. 1-24. Proceso de Metanación



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Fig. 1-25. Proceso de general de Shift, eliminación de  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  y metanador



Fuente: (Gozaga, 2019)

Tabla I-12. Tabla de composición del gas antes y después de la Metanación

<b>COMPOSICIÓN DEL GAS DE ALIMENTACIÓN AL METANADOR (MOLES%) EN BASE SECA</b>	<b>COMPOSICIÓN DEL GAS DE DESPUÉS DE LA METANACIÓN (MOLES%) EN BASE SECA</b>
H <sub>2</sub> :64,94	H <sub>2</sub> :64,94
N <sub>2</sub> :32,34	N <sub>2</sub> :32,75
CH <sub>4</sub> :1,90	CH <sub>4</sub> :2,34
AR:0,42	AR:0,42
CO:0,36	CO+CO <sub>2</sub> <5 PPMV

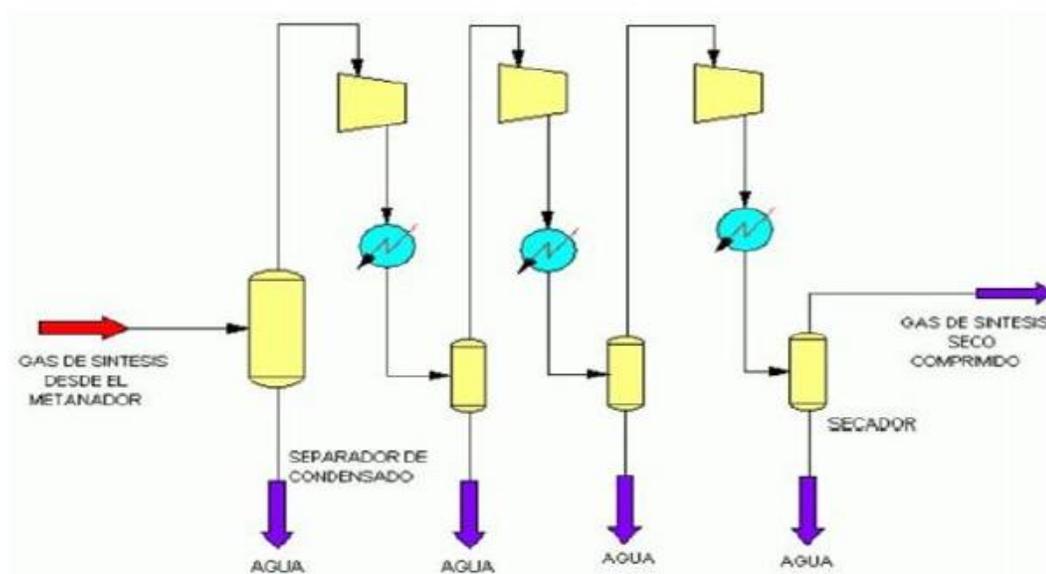
Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Factores que afectan a la metanización:

- Temperatura de entrada alta- óxidos de carbono residuales más bajos.
- CO y CO<sub>2</sub> en la alimentación del metanador.
- La Metanación debe operar con temperatura de salida por debajo de la temperatura de diseño del recipiente de 454°C.

Después del punto de metanización, se continua con la etapa de secado, donde se eliminará el agua generada durante la reacción de metanización utilizando compresores a 150 bar y enfriando después de cada etapa. No se entrará en detalle sobre esta parte del proceso, ya que no es el objetivo del presente proyecto.

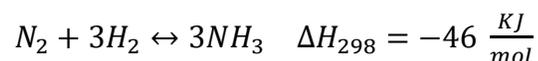
Fig. 1-26. Proceso de secado del gas de síntesis



Fuente: (Gozaga, 2019)

#### 1.4.3.5. Compresión del gas de síntesis

El vapor de gas de síntesis seco se calienta y se dirige al convertidor de amoníaco. La alimentación se precalienta dentro del convertidor antes de ingresarla al lecho catalítico. La reacción tiene lugar entre 400 y 600°C sobre un catalizador de óxido de hierro. La reacción de síntesis del amoníaco entre el nitrógeno es:

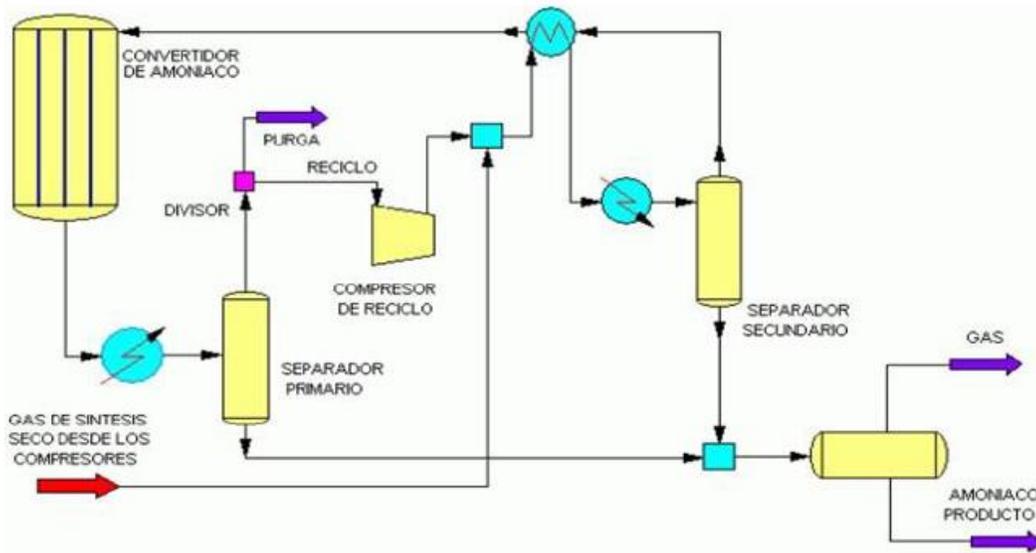


Las bajas temperaturas favorecen la producción de amoníaco, mientras que las altas presiones, superiores a 21 bares, son necesarias para alcanzar conversiones adecuadas de entre 20-25% de amoníaco por paso. Sin embargo, la conversión de hidrógeno por paso es considerablemente menor, lo que hace necesario un reciclaje extenso de los gases no reaccionados en el proceso.

El vapor que sale del convertidor se enfría mediante refrigeración con amoníaco en el separador primario para condensarlo. Se utiliza una corriente de purga para eliminar

los gases remanentes y evitar la acumulación de inertes (partículas de  $\text{CH}_4$  y  $\text{Ar}$ ) en el reactor de síntesis.

Fig. 1-27. Proceso de obtención de amoniaco



Fuente: (Gozaga, 2019)

Características del proceso:

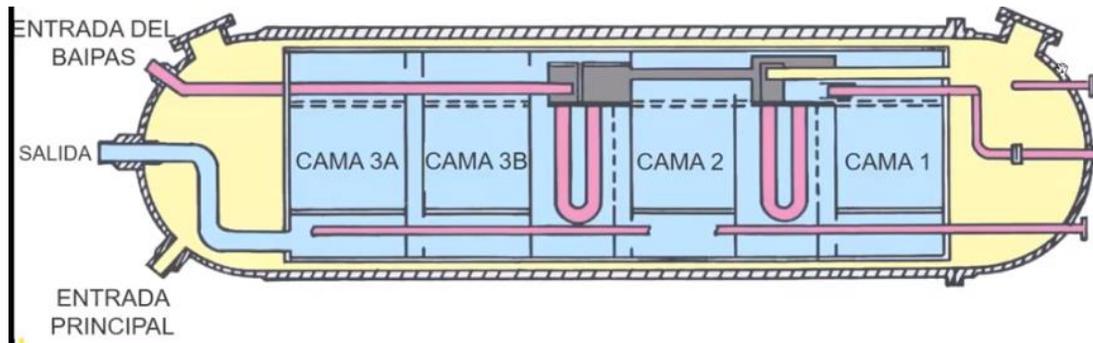
- La síntesis del amoniaco se lleva a cabo en un convertidor horizontal simple de 3 cámaras.
- La reacción es exotérmica, pero esta limitada por el equilibrio químico.
- Solamente una parte del  $\text{H}_2$  y el  $\text{N}_2$  se convierte en  $\text{NH}_3$ .
- El catalizador para la síntesis está hecho de óxido ferroso.

Características del reactor:

- El convertidor tiene un intercambiador térmico y 3 etapas de equilibrio.
- El convertidor contiene una canasta para el catalizador removible dentro de la carcasa de presión.
- Hay 2 intercambiadores térmicos integrados con la canasta.

- Hay un espacio entre la canasta cilíndrica para el catalizador y la carcasa de alta presión para tener un camino para que el gas de alimentación enfríe la carcasa.

Fig. I-28. Diagrama del reactor donde ocurre la reacción entre el  $N_2$  y  $H_2$



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

- Gas de síntesis del compresor descarga aproximada  $65^{\circ}\text{C}$  y es precalentado por intercambio de calor con el efluente del convertidor a  $168^{\circ}\text{C}$ .
- La alimentación al convertidor es separada en tres caminos antes de ser recombinada y entrar a la primera cama. Alrededor del 63% pasa a través del espacio anular entre la carcasa del convertidor y la canasta del catalizador.
- Otra parte es precalentada en el intercambiador de la cama 2 por intercambio de calor con efluente de la segunda cama.
- El resto va directamente a la primera cama sin ser recalentado según sea necesario para ajuste de la temperatura de entrada a la cama.

Tabla I-13. Cambio de temperatura en cada cama, contenido de amoníaco por cada cama

	Temp entrada ( $^{\circ}\text{C}$ )	Temp Salida ( $^{\circ}\text{C}$ )	Contenido de amoníaco (%)
<b>Cama 1</b>	360	510	10,7
<b>Cama 2</b>	388	468	16,1
<b>Cama 3</b>	395	436	19,9

Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

- El gas efluente del convertidor es enfriado aún más y condensado en el enfriador monobloque de amoníaco. Provee enfriamiento del efluente del convertidor mediante el intercambio de calor con el gas de síntesis reciclado del separador de amoníaco e hirviendo amoníaco líquido a 4 diferentes niveles de temperatura.
- Consiste de tubos concéntricos múltiples los cuales corren a través de los comportamientos de amoníaco hirviendo. El reciclado pasa a través de los tubos centrales contracorriente respecto al efluente del convertidor mientras fluye a través del espacio anular entre tubos.
- La temperatura del gas condensado que sale del enfriador monobloque es menos de  $17,8^{\circ}\text{C}$ , con el producto, amoníaco líquido, librado del gas de síntesis en el separador de amoníaco inmediatamente corriente abajo del intercambiador.
- El valor de reciclaje del separador de amoníaco es recalentado en el enfriador monobloque de  $-17,8^{\circ}\text{C}$  a  $31^{\circ}\text{C}$  aproximadamente.
- El vapor de reciclaje recalentado es dirigido a el compresor de gas de síntesis y recirculado para reusarse como alimentación para el convertidor.
- El amoníaco líquido es despresurizado aproximadamente de  $19\text{ kg/cm}^2$  en el tanque de amoníaco descendente.

#### **1.4.4. Proceso de obtención de urea en la planta de bulo-bulo**

El proceso de producción de urea utilizado por PAU es el "*Proceso de Thermo-Urea*", ya que emplea como materia prima el amoníaco proveniente de la planta de amoníaco, como se explicó anteriormente en el punto "*1.3.2.1. Proceso de obtención de urea por el proceso thermo-urea*". Ahora se procederá a enumerar los subprocesos:

1. Formación de carbamato.
2. Purificación.
3. Síntesis de urea.

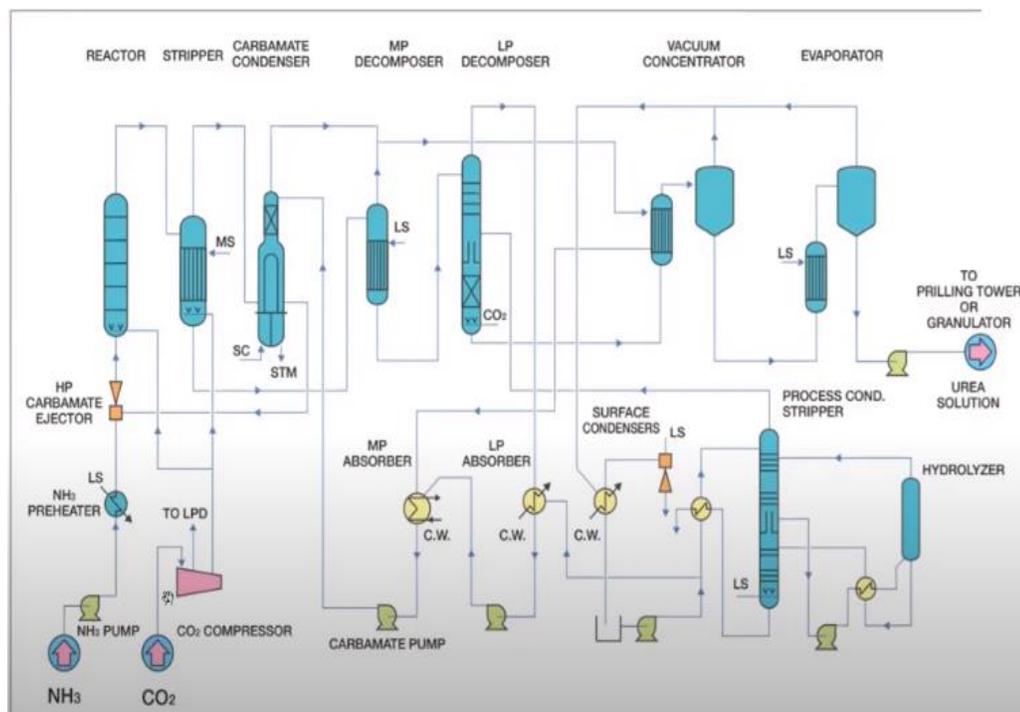
## 4. Deshidratación concentración y granulación.

Fig. 1-29. Proceso de obtención de Urea en la planta de amoniaco-urea



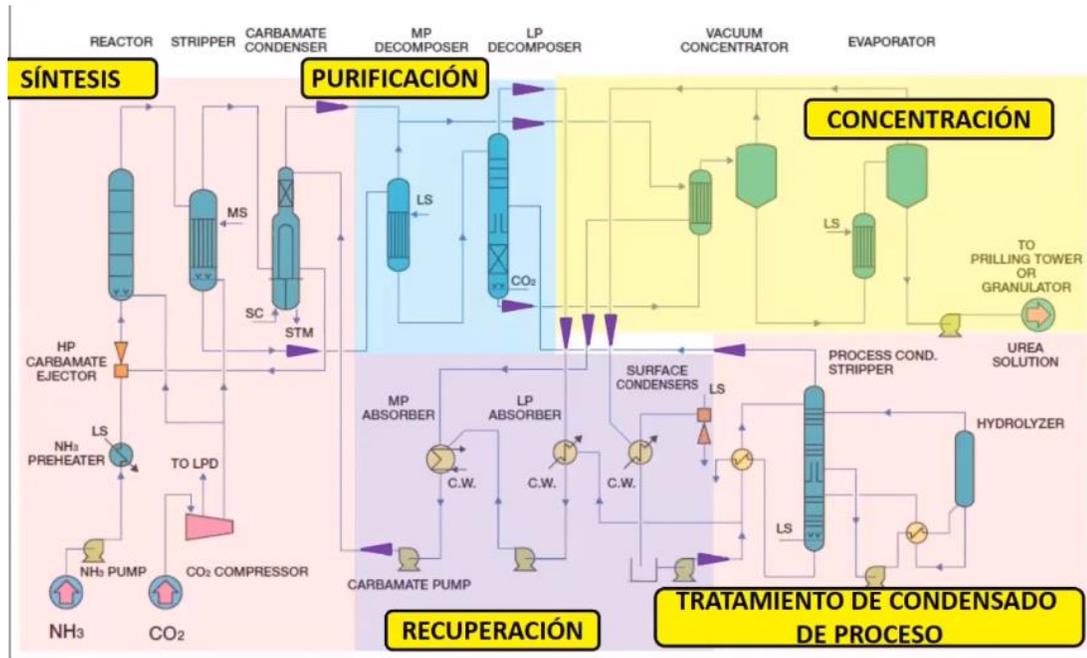
Fuente: (Emmanuel Sansuth, 2020)

Fig. 1-30. Diagrama de flujo del proceso de obtención de urea



Fuente: (TOYO ACES 21, 2021)

Fig. 1-31. Diagrama de producción de urea dividido por secciones



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Se tiene que mencionar que para el presente trabajo no se buscará simular la sección de recuperación, la cual opera con absorbentes y se considera que merece un estudio más detallado por separado. Además, la sección de tratamiento de condensado no será estudiada ni simulada, ya que se trata de una parte del tratamiento de los líquidos y gases que se separan en el proceso de urea, lo cual es un proceso complejo que también merece su propio estudio. Este no es el objetivo del presente trabajo, por lo que se concentrará más en la parte del producto final.

Recomendaciones:

- Asegurar que fluya vapor a través del troceado y la camisa de las válvulas de seguridad, discos de rupturas, etc.
- Los equipos en operaciones deben ser verificados frecuentemente para detectar señales de fugas, sobrecalentamiento y corrosión.

- Lavar las líneas y equipos de soluciones de carbamato y urea, con agua o vapor, siempre que el flujo sea interrumpido.
- Antes de comenzar con las operaciones, comprobar los dispositivos de seguridad para asegurar de que funcionan correctamente.

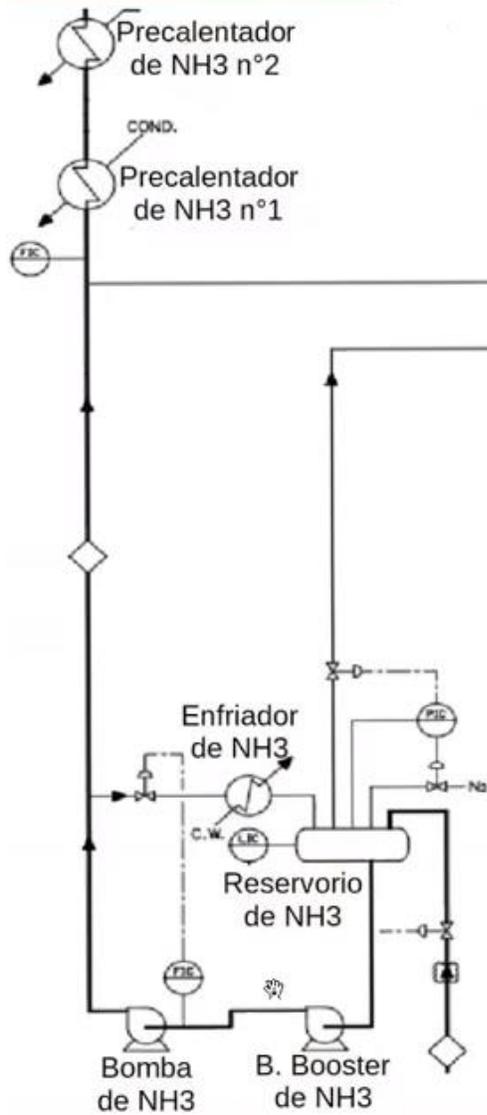
#### **1.4.5. Equipos que intervienen en la producción de Urea**

Para el proceso de obtención de urea, la planta de bulo-bulo utiliza la tecnología y licencia “*TOYO*”, una empresa con sede en Estados Unidos que al igual que el proceso de amoníaco diseñó el proceso que es utilizado en la planta, a partir de esto se explicarán los equipos más relevantes del proceso.

##### **1.4.5.1. Reactor de síntesis de carbamato**

Antes de iniciar la reacción, es necesario bombear el amoníaco desde una presión de 17,65 Bar a 196,13 Bar. Además, se debe precalentar el amoníaco de 38°C a 137°C.

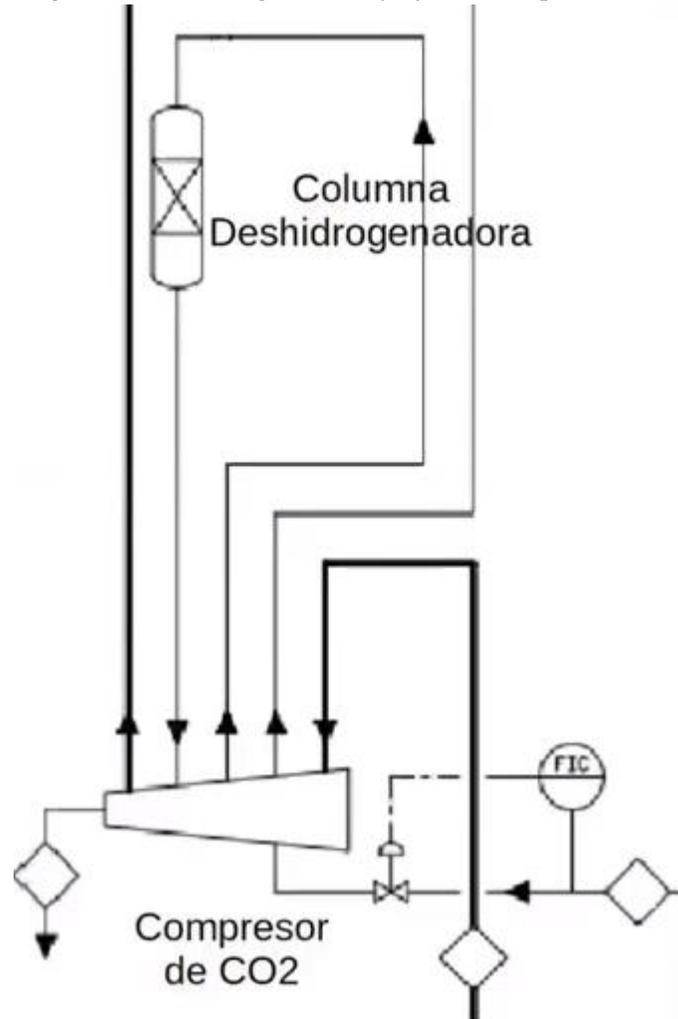
Fig. 1-32. Diagrama de flujo del bombeo de amoníaco



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

Lo siguiente es comprimir el CO<sub>2</sub> desde una presión de 0,69 Bar hasta una presión de 196,133 Bar.

Fig. 1-33. Diagrama de flujo de compresión de CO<sub>2</sub>

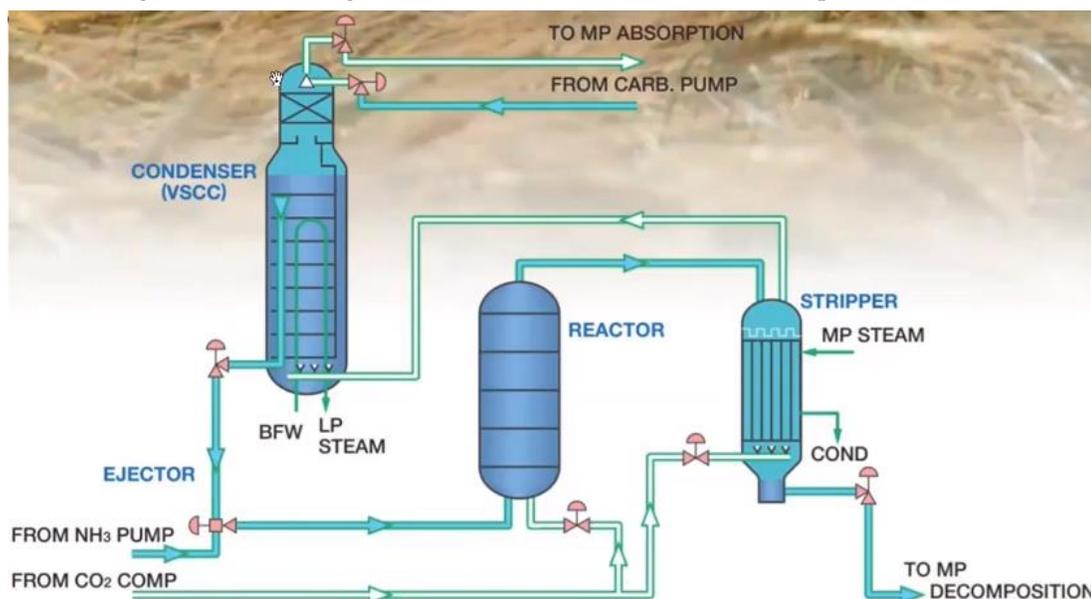


Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

#### 1.4.5.2. Sección de síntesis condensador de carbamato-reactor y stripper

Para el presente proyecto, se van a analizar los equipos más importantes del proceso, los cuales en la sección de síntesis son el condensador de carbamato, el reactor y el stripper. El diagrama de flujo es el siguiente:

Fig. 1-34. Diagrama de la sección de síntesis de la planta de urea



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

En relación al equipo de condensación, es importante destacar que se trata de un dispositivo especializado que no sigue los estándares comunes de otros equipos industriales. Este equipo fue diseñado específicamente para el proceso en cuestión, con condiciones operativas bien definidas, y fabricado por la empresa *TOYO*. Su característica distintiva radica en su capacidad para manejar la reacción altamente exotérmica entre el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y el amoníaco (NH<sub>3</sub>). Una particularidad relevante es que, en su funcionamiento, se introduce agua en la parte inferior del equipo para enfriar los tubos donde tiene lugar la reacción, generando vapor que puede ser reciclado para otros fines. (Emmanuel Sansusth, 2020).

En referencia al proceso de reacción, este opera mediante reciclaje debido a que la eficiencia de la reacción no alcanza el 100%. Bajo las condiciones previamente mencionadas, tanto el amoníaco como el CO<sub>2</sub> son dirigidos hacia el reactor. Parte del amoníaco se mezcla con una porción de la solución de carbamato proveniente del condensador, mientras que el CO<sub>2</sub> inyectado es distribuido entre el reactor y el stripper. Esta disposición facilita la recolección del amoníaco no reactivo. (Emmanuel Sansusth, 2020).

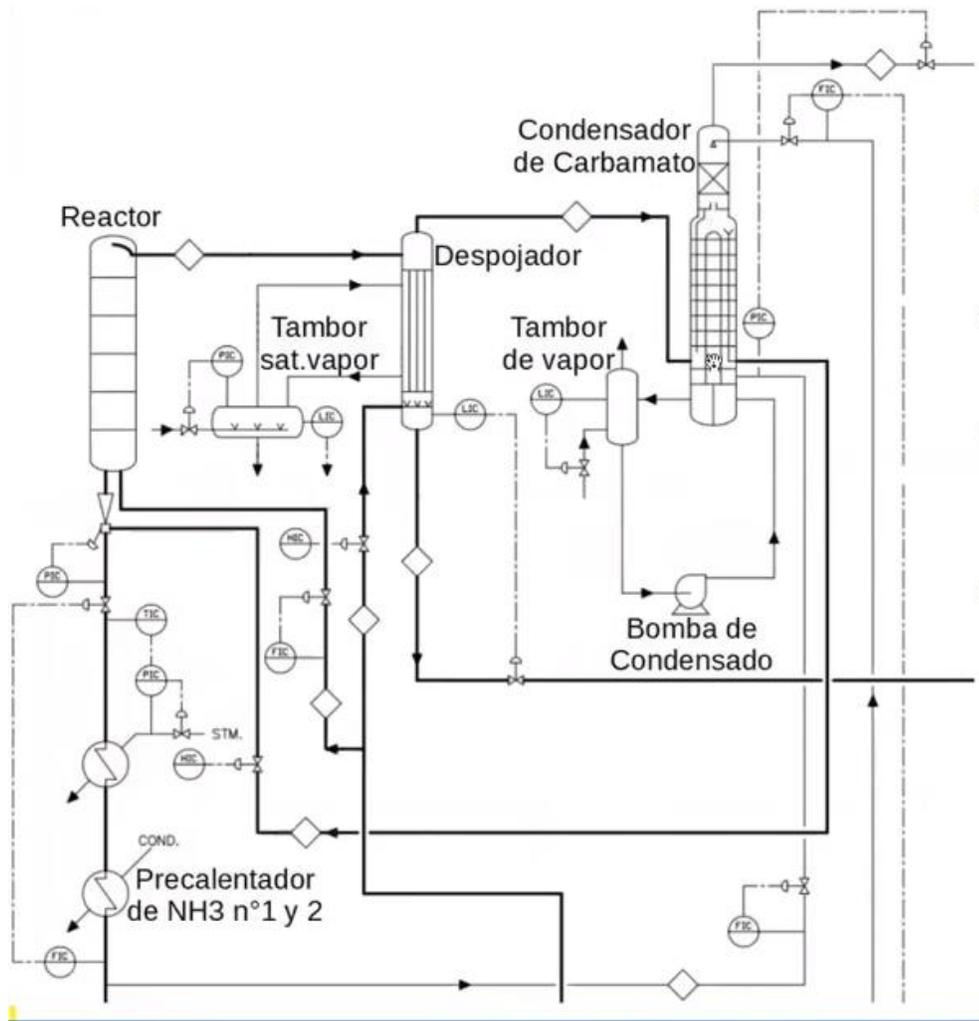
En el reactor, se produce la formación de carbamato y urea, así como la presencia de amoníaco y dióxido de carbono que no han participado en la reacción. Esta corriente se dirige hacia el Stripper, donde, con la asistencia del  $\text{CO}_2$  y la introducción de energía adicional, los gases son separados. Los componentes gaseosos, como el amoníaco, el carbamato y el  $\text{CO}_2$ , son eliminados por la parte superior, mientras que el agua formada y la urea se extraen por la parte inferior. Cabe destacar que, debido a la introducción de energía, parte del carbamato se convierte también en urea durante este proceso. (Emmanuel Sansusth, 2020).

Los gases que se liberan por la parte superior del Stripper son dirigidos al Condenser, donde experimentan una reacción entre sí para formar carbamato, un proceso altamente exotérmico. Esta reacción es controlada mediante la introducción de una corriente de agua en la parte inferior del equipo, que se encarga de extraer el producto resultante. Todos estos productos se mezclan utilizando un eyector con el amoníaco fresco que se está introduciendo, dando inicio a un nuevo ciclo del proceso. Los gases que no han reaccionado en esta etapa son recuperados en la parte superior del equipo. (Emmanuel Sansusth, 2020).

Algunas características de esta sección:

- ACES21: Síntesis en 2 etapas, despojado con  $\text{CO}_2$  y eyector.
- Presión 152 Bar, Temperatura de  $183^\circ\text{C}$ .
- Relación molar en el reactor  $\text{NH}_3/\text{CO}_2$ : 3,7 y 2,9.
- Generación de vapor de baja en el condensador de carbamato.

Fig. 1-35. Diagrama de la sección de síntesis de urea

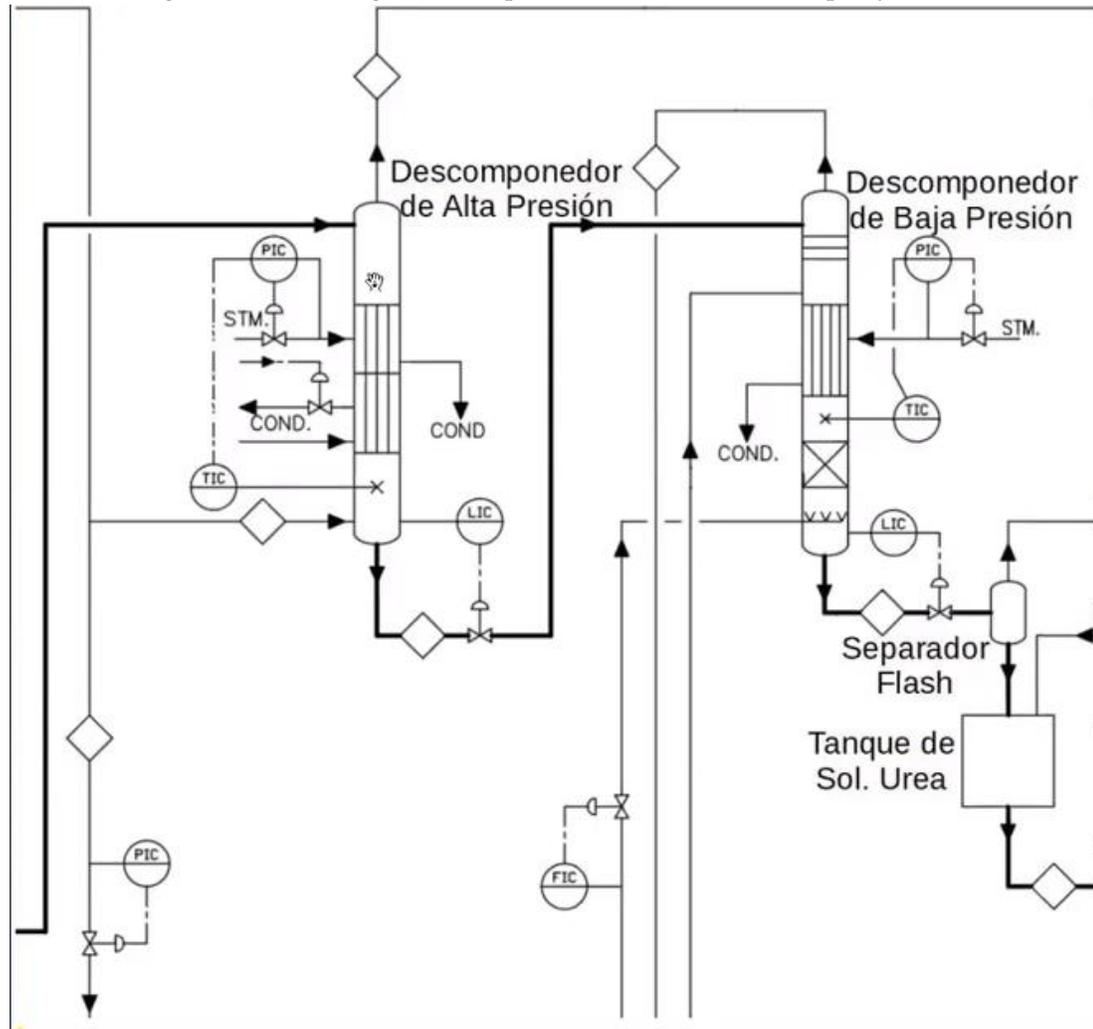


Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

#### 1.4.5.3. Sección de purificación: descomponedor de alta presión, descomponedor de baja presión, separador flash, tanque de sol urea

En la sección de purificación, como su nombre indica, su función es descomponer el carbamato para obtener urea utilizando dos descomponedores de alta y baja presión. Además de descomponer el carbamato, vamos a separar el amoníaco del dióxido de carbono.

Fig. 1-36. Diagrama del proceso de la sección de purificación



Fuente: (Emmanuel Sansuth, 2020)

El proceso en el descomponedor de alta presión se lleva a cabo a una presión de 16,18 bar y una temperatura de 152°C. En esta etapa, el carbamato se descompone en urea, amoníaco y dióxido de carbono. Estos últimos gases se eliminan por la parte superior del descomponedor de alta presión y se dirigen hacia una zona de recuperación. Por otro lado, por la parte inferior del descomponedor de alta presión, se transporta una mezcla de urea, carbamato y agua hacia el descomponedor de baja presión.

El descomponedor de baja presión opera bajo condiciones de 2,45 bar y 138°C. En esta fase del proceso, se aplica calor para descomponer el carbamato y producir urea, agua, amoníaco y dióxido de carbono. Estos últimos componentes son eliminados por la parte

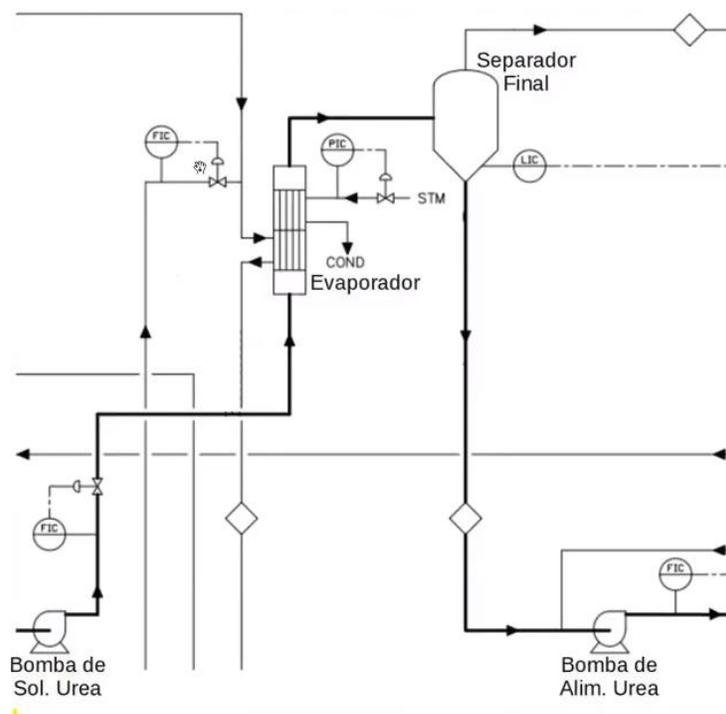
superior del descomponedor. Además, se introduce dióxido de carbono adicional en la parte inferior del equipo para proporcionar energía adicional y eliminar el amoníaco no reaccionado por la parte superior.

La corriente que se descarga por la parte inferior se dirige a un separador flash, el cual opera a baja presión (430 mmHg), permitiendo la separación de los gases más livianos. La corriente resultante que sale por debajo del separador flash es transferida a un tanque de dos compartimentos. En este tanque, se obtiene una solución que consiste en un 70% de urea y el resto de agua.

#### 1.4.5.4. Sección de concentración: evaporador y separador final

Esta etapa representa la conclusión del proceso. Como se indicó en la fase de purificación, se alcanza una concentración del 70% de urea, sin embargo, el objetivo es alcanzar un nivel del 96%. Para lograr esta concentración deseada, se implementará un evaporador que eliminará el exceso de agua presente en la solución, incrementando así la concentración de urea hasta alcanzar el nivel requerido del 96%.

Fig. 1-37. Diagrama de proceso de concentración



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

El evaporador funciona introduciendo una solución de urea al 70% que debe ser calentada con los gases que vienen del descomponedor de alta presión, esta se mezclará con el absorbente de una columna de lavado, se absorberá el dióxido de carbono y amoníaco para que se forme carbamato, como se menciona esta reacción es exotérmica entonces se va a aprovechar este calor para calentar la solución de urea al 70%, todo este pasa en la cámara bajo del evaporador, mientras que en la cámara alta se utilizará vapor de agua para calentar. A la salida del proceso se tendrá la solución de urea a unos 132°C.

Pasado ya el evaporador se llevará a un separador final el cual opera a una presión de vacío 250mm Hg, esto se hace porque se quiere evitar la formación de biuret, un compuesto muy corrosivo, la formación de este compuesto se ve favorecido por 3 factores:

- Altas temperaturas.
- Altos tiempos de retención.
- Baja presión parcial de amoníaco.

Estas son las razones de porque se trabaja a vacío, para evitar tener que elevar la temperatura de trabajo evitando la formación de Biuret.

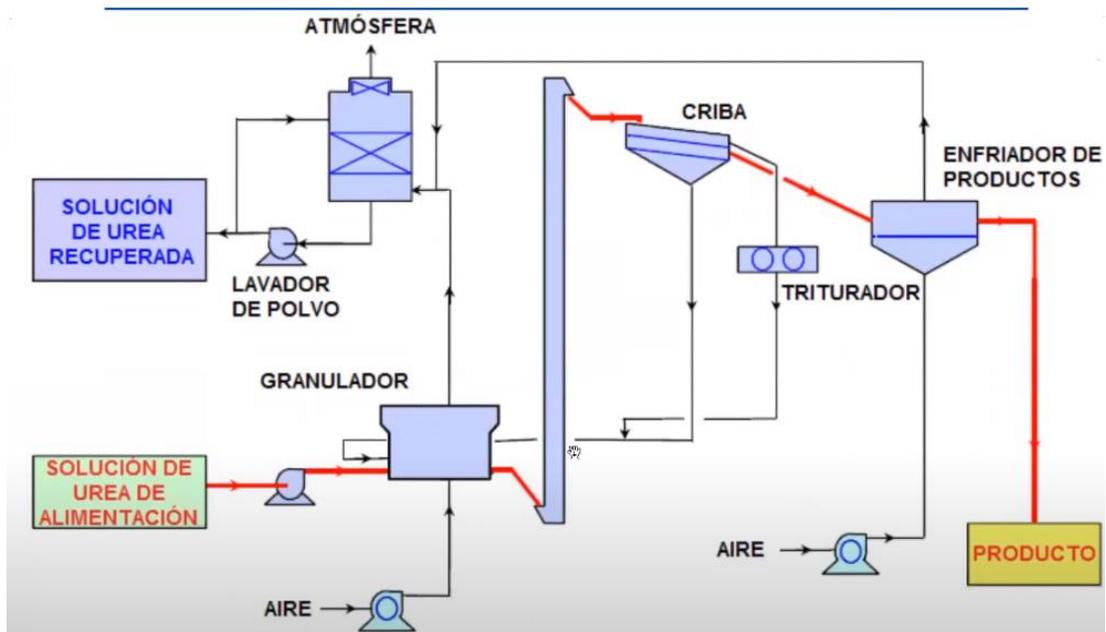
Por la parte inferior sale la urea fundida la cual se encuentra a 96% de concentración, la cual sería el producto final.

#### **1.4.5.5. Sección de granulación**

Ahora se va a abordar el proceso de granulación de la urea. Aunque no sea parte de la simulación, es importante mencionar cómo se prepara la urea para su comercialización.

El proceso de granulación en la Planta de Amoníaco Urea (PAU) se ilustra en la *Figura N.º 1-38*:

Fig. 1-38. Diagrama del proceso de granulación de urea en la planta de amoníaco urea



Fuente: (Emmanuel Sansusth, 2020)

- La urea se bombea desde el área de separación hasta el granulador, donde se mezcla con aire a una temperatura de 110-120°C y a una presión de vacío de 0,0098-0,020 bar.
- El propósito del granulador es producir un producto con forma redonda y un tamaño de partícula de 2-4 mm, garantizando además una distribución uniforme.
- Otra función clave del granulador es enfriar y secar la urea, dejándola con un contenido de agua del 0,3%.
- El granulador captura todo el polvo de urea generado durante la formación de los gránulos, así como durante el proceso de trituración y cribado.
- La resistencia a la compresión de los gránulos al salir del granulador es de 2.94 Bar.

- Los gránulos se transportan hacia la criba, donde, mediante vibraciones, aquellos que sean más pequeños que el tamaño requerido es devuelto al granulador.
- Los gránulos que sean más grandes que el tamaño necesario serán dirigidos al triturador, donde se ajustarán al mismo tamaño que la entrada del granulador.
- Los gránulos que pasan la criba se dirigen hacia una etapa de enfriamiento utilizando aire previamente enfriado con amoníaco proveniente de la misma planta. Una vez enfriada, la urea se traslada para su posterior empaquetado y distribución.
- El aire introducido tanto en el granulador como en el enfriador arrastra parte de la urea. Estas dos corrientes se dirigen a un separador donde, utilizando agua como solvente, se recupera el amoniaco para luego someterlo a un tratamiento y reintegrarlo al proceso.

### **1.5. Simuladores de procesos químicos**

Un simulador de procesos es un tipo de software utilizado para modelar cómo se comporta un proceso químico en un estado estacionario, determinando factores como presiones, temperaturas y flujos. Actualmente, los programas informáticos empleados en la simulación de procesos han ampliado su alcance para incluir el estudio del comportamiento dinámico de los procesos, así como de los sistemas de control y su respuesta a las perturbaciones inherentes a la operación. Además, en el mercado ya se pueden encontrar software diseñados para realizar tareas como dimensionamiento de equipos, estimación de costos, análisis de propiedades, evaluación de operatividad y optimización de procesos, todas estas características se pueden encontrar en Aspen Engineering Suite. (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016).

Los simuladores de procesos permiten:

- Predecir el comportamiento de un proceso.
- Analizar de forma simultánea diferentes casos, cambiando los valores de las principales variables operativas.

- Optimizar las condiciones de operación de plantas nuevas o existentes.
- Seguimiento de una planta química durante toda su vida útil, con el fin de prever ampliaciones o mejoras de procesos.

El surgimiento y avance de la informática digital han dejado una marca significativa en diversos campos del conocimiento humano. La ingeniería química, en particular, ha experimentado un progreso notable gracias a este desarrollo, especialmente en lo que respecta a la simulación de procesos. Los primeros intentos de crear modelos matemáticos se remontan a la década de 1950, coincidiendo con la introducción del lenguaje FORTRAN (FORmula TRANslating).

Durante la década de 1970, se desarrolló el primer simulador de procesos conocido como FLOWTRAN, iniciando así un proceso continuo de investigación, principalmente liderado por instituciones académicas y ocasionalmente respaldado financieramente por la industria. Este esfuerzo se centró en mejorar la eficiencia y rentabilidad de las operaciones de procesos al permitir la evaluación de diversas alternativas en un período de tiempo relativamente corto. (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016).

Los simuladores de procesos están compuestos por bibliotecas de subrutinas o modelos, habitualmente desarrollados en FORTRAN, C++ o Visual Basic, que contienen algoritmos para resolver ecuaciones. Estas subrutinas o modelos, también llamados "procedimientos", "modelos" o "bloques", son fundamentales para el funcionamiento del simulador. Para utilizar eficazmente estos simuladores, los ingenieros de procesos deben comprender los principios y supuestos de los modelos proporcionados por cada simulador, los cuales están detallados en los manuales de usuario. Además, es esencial considerar los criterios utilizados en la especificación del equilibrio de fase y los modelos asociados, ya que la precisión de los resultados de la simulación depende en gran medida de ellos.

Actualmente, entre los simuladores de procesos más utilizados y conocidos, tanto en el ámbito comercial como académico, se encuentran: SPEED UP, ASPEN PLUS®, DESIGN II, HYSYS, ASPEN HYSYS, CHEMCAD y PRO II, entre otros.

### **1.5.1. Aplicaciones de la simulación de procesos**

La simulación de procesos es una herramienta para ingenieros químicos y de procesos que puede ser utilizada en la ejecución de tareas repetitivas o en actividades de alta complejidad que deben ser resueltas en tiempos relativamente cortos.

Las diversas aplicaciones que ha encontrado la simulación de procesos son resultado de la necesidad de:

- Aprovechar mejor los recursos energéticos.
- Minimizar los costos de operación y la emisión de corrientes residuales que puedan ser contaminantes.
- Aumentar el rendimiento y la eficiencia del proceso.
- Mejorar la controlabilidad del proceso .
- Impulsar la enseñanza del diseño de procesos.

Algunas de las principales aplicaciones de la simulación de procesos se analizan a continuación.

#### **1.5.1.1. Diseños asistidos por ordenador**

La simulación en estado estacionario de los balances de masa y energía constituye en sí misma la pieza central del diseño asistido por computadora. Las principales razones son: (a) los resultados de los cálculos en la etapa de diseño son necesarios para etapas posteriores; (b) durante el diseño, para cumplir con las restricciones económicas y de operación, la información cambia dinámicamente, de tal manera que es necesario ajustar y actualizar el resultado de los balances de forma continua; (c) se genera tal cantidad de información que la única forma de administrarla es si se consolida a través de las simulaciones de procesos y los casos de estudio desarrollados con las simulaciones. (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016).

### **1.5.1.2. Optimización de procesos**

La optimización de procesos químicos tiene su origen en la programación lineal a principios de los años 60. Esta tarea tiene como objetivo fundamental la comparación de diferentes alternativas para seleccionar la mejor de acuerdo a unos criterios de respuesta del proceso. En un proceso de optimización es importante identificar las características independientes que conducen a diferentes resultados (variables independientes) y las variables que hacen posible la medición de la excelencia relativa de una solución (variable dependiente). El conjunto de interacciones entre las variables dependientes que conducen a una respuesta se conoce como función objetivo, en la cual los parámetros del sistema se relacionan entre sí.

De manera general, la optimización de un proceso conlleva la minimización de los costos de operación, el consumo de energía y las emisiones contaminantes, o la maximización de los rendimientos y productividad de operación.

### **1.5.1.3. Solución de problemas de funcionamiento**

Una planta de proceso nunca opera bajo las condiciones de operación de diseño, ya sea porque la composición de las materias primas es diferente a la considerada inicialmente, porque las condiciones ambientales no están contempladas en el diseño o porque se modifica la configuración de la planta o de algún equipo según sea necesario, consecuencia de la disponibilidad de materiales o costos. A menudo se utiliza un sobrediseño en las etapas de ingeniería para tener capacidad adicional para futuras modificaciones de la planta.

La simulación de procesos permite predecir el efecto de cambios en las condiciones de operación sobre otras variables del proceso y, de esa forma, establecer puntos de control más favorables, a través de la simulación dinámica. Asimismo, simplifica la supervisión de las condiciones cambiantes en largos periodos de tiempo; por ejemplo, el deterioro del relleno aleatorio en una columna de destilación, el ensuciamiento en intercambiadores de calor o la desactivación del catalizador.

#### **1.5.1.4. Otras aplicaciones**

La comercialización de procesos llave en mano exige la demostración (por parte de las empresas) de las capacidades de las tecnologías que están comprando. Dichas demostraciones se realizan mediante simulaciones de procesos, ya que es imposible encontrar prototipos o plantas piloto similares al diseño a comercializar.

La enseñanza del diseño de procesos es una acción que puede resultar más enriquecedora cuando se utiliza un simulador, ya que permite evaluar diferentes alternativas y resolver varios casos de estudio sin recurrir a una gran cantidad de cálculos que hacen la tarea tediosa y poco práctica. Adicionalmente, se logra la integración de la creatividad y la aplicación de conceptos de ingeniería en la solución de cada uno de los casos de estudio.

##### **1.5.1.4.1. Análisis de convergencia**

Como se mencionó anteriormente, la estrategia de solución para un problema de simulación de procesos se define por la forma en que se aborda el cálculo sobre el diagrama de flujo del proceso. En esta tarea, una de las acciones más importantes es el establecimiento de la convergencia de la simulación, lo que implica que todas las unidades de proceso, las corrientes y el balance de masa global han alcanzado la convergencia. Esto requiere la selección de la mejor secuencia de cálculo y la identificación de los flujos sobre los cuales se debe realizar el proceso iterativo para lograr la convergencia. A continuación, se comentan brevemente algunos aspectos relacionados con las metodologías disponibles para alcanzar la convergencia en las simulaciones de procesos y la forma de determinar las corrientes lagrimales en un diagrama de flujo.

##### **1.5.1.4.2. Análisis de sensibilidad**

En Aspen Plus se incorpora un algoritmo para la selección de corrientes, de tal forma que se seleccionan automáticamente. Sin embargo, no todas las veces la selección es la mejor, y es preciso revisar y corregir la selección de aquellas corrientes, según sea el caso. En el caso de Aspen HYSYS, la selección de las variables la hace el usuario y

está determinada por la ubicación de las operaciones de Reciclaje en el diagrama. Utilizando un proceso simulado de enfriamiento y separación de una corriente de gas caliente proveniente de una reacción altamente exotérmica, donde el objetivo es reciclar parte del líquido que sale del separador de fases para enfriar por contacto directo los gases en la alimentación. Ahora se realizará un análisis de sensibilidad para establecer el efecto que tiene la fracción de flujo dividido (tamaño de reciclado) sobre la temperatura a la entrada del separador de fases y el calor a remover en ese equipo. Esta información puede ser importante para determinar el punto de operación más eficiente para el reciclaje. Posteriormente se realizará una especificación de diseño que permita establecer un flujo de gas a la salida del separador de fases.

### **1.5.2. Tipos de simuladores de procesos**

Los simuladores de procesos se clasifican según la estrategia de simulación que utilizan para establecer el modelo matemático que representa el proceso a simular. La estrategia de simulación se refiere a la forma en que se aborda el problema de solución del modelo. Generalmente la estrategia depende de la complejidad del modelo y del modo de cálculo. La primera, entendida como las diferentes posibilidades existentes, desde modelos lineales hasta modelos sofisticados con ecuaciones de tasas de transferencia de masa, energía y cantidad de movimiento. La segunda, referida a la información (variables de entrada) que es necesario especificar para resolver el modelo en términos de la información restante (variables de salida). (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016).

Las funciones dentro de un simulador de procesos son programas de computadora que, al principio, reciben vectores que contienen datos sobre los flujos de alimentación y algunos parámetros del proceso. Estas funciones analizan los vectores, interpretan la información y seleccionan el modelo adecuado para resolver el problema. Fundamentalmente, los resultados que se obtienen son las corrientes de productos del proceso. Por lo tanto, estas funciones posibilitan operar en dos modos de cálculo dentro del simulador de procesos.

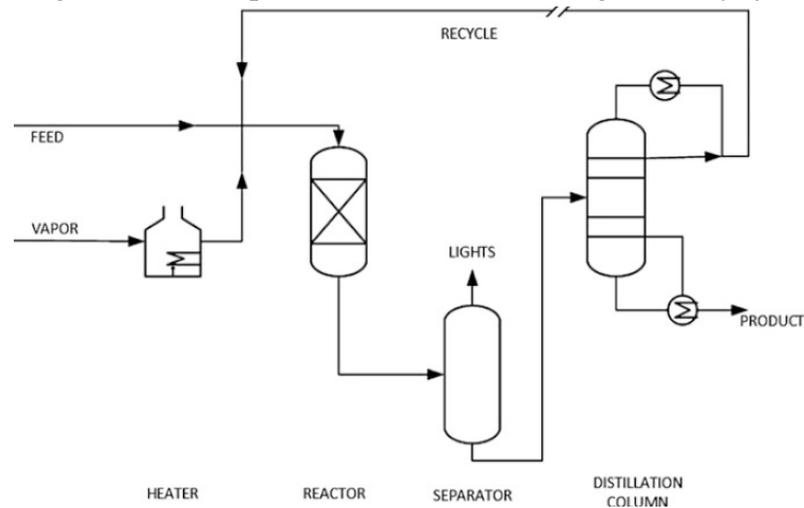
- Modo de diseño: de acuerdo con las condiciones requeridas del proceso, se utiliza un desempeño deseado como punto de partida para encontrar las especificaciones del proceso o equipo que permitan el cumplimiento de esas condiciones.
- Modo de calificación: de acuerdo con algunas especificaciones de diseño proporcionadas al simulador, se evalúa el desempeño del proceso o equipo para cumplir con algunas condiciones específicas del proceso.

(Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

Las dos estrategias fundamentales utilizadas en la solución de problemas de simulación son la estrategia secuencial y la estrategia simultánea.

El concepto de simulación secuencial surge de la necesidad de calcular las diversas unidades de proceso presentes en un diagrama de flujo de manera secuencial. En este enfoque, es fundamental tener conocimiento de algunos valores de las corrientes de alimentación y las especificaciones de los parámetros de cada unidad. Dado que resulta poco práctico especificar simultáneamente todos los flujos que ingresan a cada unidad, se vuelve necesario utilizar los valores de salida de una unidad como entrada para la siguiente. Esto establece un orden secuencial de cálculo para resolver cada unidad del proceso una a una. El simulador determina automáticamente este orden de cálculo para asegurar su coherencia con el flujo de información. En la mayoría de los casos, los cálculos comienzan en el equipo para el cual se conocen los valores de las corrientes de alimentación y los parámetros del equipo. En la Figura 1-38, se muestra el orden de cálculo típico en un diagrama de flujo mediante flechas. Este orden generalmente sigue la dirección del flujo másico y puede ser ajustado o interrumpido cuando aparecen reciclados, lo que requiere la implementación de un proceso iterativo.

Fig. 1-39. Esquema de cálculo de un diagrama de flujo.



Fuente: (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

A medida que aumenta el número de reciclados, una simulación se vuelve más compleja y más difícil de implementar con éxito. Por esta razón, una alternativa para resolver el modelo es tomar todas las ecuaciones a la vez y construir un único modelo de simulación mediante la solución simultánea de todas las ecuaciones. De esta manera, no es necesario evaluar todas las unidades del equipo a partir de los valores de entrada y sus parámetros, lo que permite la manipulación de especificaciones de diseño o evaluación sin distinción alguna.

#### 1.5.2.1. Simuladores de secuencia modular

Son simuladores en los que cada unidad de proceso se representa con un módulo en el que se incluye el modelo de operación y el algoritmo numérico utilizado para el cálculo de los flujos de salida. Los módulos son totalmente independientes entre sí y el flujo de información para el cálculo en la simulación coincide con el “flujo físico” en planta. La ventaja de utilizar módulos es que cada sistema de ecuaciones se resuelve con su propia metodología. (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

El módulo de cada unidad de proceso debe contener rutinas con los modelos y procedimientos para la solución a partir de un conjunto de variables predeterminadas. Adicionalmente, cuando el proceso a simular tiene varios reciclados causados por

corrientes de recirculación y operaciones a contracorriente, el módulo ejecutor sigue una metodología compuesta por tres etapas:

- Particionamiento: detección de reciclaje
- Lagrimeo: selección de chorros de lágrimas, sobre los que se realiza el proceso iterativo
- Ordenamiento: establecimiento de una secuencia lógica para las unidades de operación

Los reciclados deben su existencia a todos aquellos procesos en los que tienen lugar reacciones reversibles y fenómenos competitivos. En los simuladores existen subrutinas específicas para el cálculo de reciclados y la búsqueda de convergencia.

Entre ellos se establece un valor de inicialización para el flujo lagrimal, se ejecuta el cálculo y, finalmente, se comparan los valores y se dan nuevos valores de inicialización hasta lograr la convergencia. Los métodos de convergencia más conocidos en los simuladores son Wegstein, sustituciones sucesivas (o iteración directa), Newton-Raphson y Broyden Quasi-Newton. El método de Wegstein se emplea en aquellas situaciones en las que fallan las “sustituciones sucesivas” o se requiere un elevado número de iteraciones.

Los reciclados constituyen una unidad extra en los diagramas de flujo de la simulación. Cabe señalar que debe existir un algoritmo de convergencia que permita el ajuste de los reciclados y, por tanto, su cómputo debe realizarse separadamente de las unidades de cálculo normales asociadas a las operaciones unitarias. Generalmente, los recicladores no están instalados, es decir, no deben especificarse como bloques de cálculo en una simulación, en el caso específico de Aspen Hysys se deben definir unos bloques que denotan las corrientes de reciclaje sobre las que se ejecuta la iteración, es decir, las corrientes de lágrimas seleccionadas para la solución del problema.

Resumiendo, las principales características de un simulador modular secuencial son las siguientes:

- Contiene bibliotecas y rutinas de cálculo.
- Las variables de iteración están en los flujos de reciclaje.
- Los modelos individuales se resuelven de manera eficiente.
- Es fácilmente comprensible para ingenieros que no son “especialistas en simulación” debido a la correspondencia existente entre el caudal másico y la secuencia de cálculo.
- Implica métodos complejos de convergencia (sustitución directa, Wegstein, etc).
- La información ingresada por el usuario (relacionada con flujos y equipos) es fácilmente verificable.
- Los problemas de diseño son más fáciles de resolver (selección de parámetros).

#### **1.5.2.2. Simuladores simultáneos u orientados a ecuaciones**

En este tipo de simuladores se establece el modelo matemático que representa el proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas. Aquí también pueden existir módulos que representan unidades de proceso o subsistemas, pero estos no contienen métodos numéricos para el cálculo de valores de salida; por el contrario, poseen la información requerida para proporcionar las ecuaciones que representan el modelo matemático.

El modelo de proceso está formado por la suma de los modelos de todas las unidades que componen el proceso o planta en la simulación. Debido a la filosofía de compilación y agrupamiento de todas las ecuaciones que construyen el proceso, a este tipo de simuladores se les conoce como “Orientados a ecuaciones” o “Basados en ecuaciones”. Aquí se mantiene el concepto de módulos para facilitar la interacción con el usuario y permitir la especificación de la información requerida por el problema.

El principal problema asociado al concepto de solución simultánea u orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las soluciones encontradas. Así, los sistemas altamente no ideales que corresponden a los modelos de

plantas químicas podrían, por ejemplo, producir soluciones múltiples. Además, la solución numérica de problemas que consisten en grandes sistemas de ecuaciones requiere una inicialización adecuada; esto está cerca de un entorno de solución (estado).

Resumiendo, las principales características de los simuladores orientados a ecuaciones son:

- Cada unidad está representada por las ecuaciones que la modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- Desaparece la distinción entre variable de proceso y parámetros operativos. En consecuencia, los problemas de diseño se simplifican.
- Solución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineales)
- Mayor velocidad de convergencia.
- Necesitan una mejor inicialización (cuanto mayor sea la complejidad del problema a resolver mejor será la inicialización que se proporcionará).
- A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin significado físico).
- Más fácil de usar para "no especialistas".

### **1.5.2.3. Simuladores híbridos**

Este tipo de simuladores utiliza una estrategia mezcla de secuenciales y simultáneas. Cada iteración consta de dos pasos: una primera solución del modelo empleando una estrategia secuencial y la actualización de los coeficientes lineales para encontrar una solución con una estrategia simultánea.

La simulación comienza con un paso secuencial en el que las variables de salida se determinan a partir de la información y los parámetros de entrada en un escaneo inicial del diagrama de flujo. Luego se inicia un paso simultáneo para la solución de modelos linealizados en un segundo escaneo del proceso.

Algunos simuladores de alta aplicación industrial apelan a una estrategia híbrida para asegurar la convergencia, incluso en los peores casos.

### **1.5.3. Aspen Plus y Aspen Hysys**

Aspen Plus y Aspen Hysys son simuladores de procesos en estado estacionario y dinámico utilizados en la predicción del comportamiento de un proceso o un conjunto de operaciones unitarias, a través de las relaciones existentes entre ellos. Las relaciones y conexiones existentes en el proceso determinan, sobre los balances de masa y energía, el equilibrio químico y de fases y las tasas de transformación química. De esta forma, es posible simular el comportamiento de plantas existentes o proyectadas, con el objetivo de mejorar las especificaciones de diseño o incrementar la rentabilidad y eficiencia de una operación en proceso.

Entre las principales funciones que se pueden encontrar en estos simuladores se encuentran:

- Generación de gráficos y tablas.
- Realización de análisis de sensibilidad y casos de estudio.
- Dimensionamiento y calificación del equipo.
- Ajuste de datos experimentales.
- Análisis de componentes puros y propiedades de mezclas.
- Estudio de mapas de curvas de residuos.
- Optimización de procesos.
- Estimación y regresión de propiedades fisicoquímicas.
- Análisis dinámico de procesos.

Aspen Plus se ubica entre el grupo de simuladores que utilizan la estrategia secuencial, al igual que otros simuladores como PRO II y CHEMCAD. Así, está compuesto por un conjunto de unidades de simulación o programa (subrutinas o modelos) representados a través de bloques e iconos, a los que se les debe proporcionar la

información pertinente para resolver los balances de masa y energía. Sin embargo, es importante mencionar que en las últimas versiones de este simulador se ha incluido la posibilidad de trabajar con la estrategia simultánea u orientada a ecuaciones, lo que permite modelar sistemas y procesos mucho más complejos, altamente integrados y con un alto número de ciclos.

Aspen Hysys es un simulador de procesos ampliamente utilizado a nivel industrial, especialmente en las etapas de diseño conceptual e ingeniería de detalle, control, optimización y seguimiento de procesos en un proyecto. Las aplicaciones más importantes de Aspen Hysys corresponden a las industrias de procesamiento de petróleo y gas, refinerías y algunas industrias de separación de aire. Todas estas prácticas aprovechan esta arquitectura de simulador que permite integrar los modelos estacionario y dinámico en una única unidad. De esta forma, es posible conjugar las etapas de diseño de procesos con el análisis riguroso del comportamiento dinámico y el control de los mismos, para evaluar de manera directa los efectos que las decisiones en la etapa de diseño detallado tienen sobre la dinámica y controlabilidad del proceso.

#### **1.5.4. Paquetes termodinámicos**

##### **1.5.4.1. Ecuaciones de estado**

Las ecuaciones de estado son modelos que corresponden a correlaciones PVT (Presión Volumen-Temperatura) que permiten estimar las propiedades de una sustancia pura o de una mezcla utilizando las Relaciones de Maxwell; en el caso de mezclas, se emplean reglas de mezcla diseñadas para tal fin.

Las ecuaciones de estado más importantes son las ecuaciones cúbicas, ya que combinan la simplicidad matemática con una buena aproximación de los valores teóricos de las propiedades estimadas.

Algunas de las ecuaciones de estado más utilizadas son:

- Soave–Redlich–Kwong.
- Peng–Robinson.

#### 1.5.4.2. Modelos de coeficiente de actividad

Los modelos de coeficientes de actividad surgieron ante la incapacidad del modelo ideal para representar adecuadamente el comportamiento de las mezclas. Estos modelos se basan en la evaluación del exceso de energía libre de Gibbs.

Entre los modelos de coeficientes de actividad que se pueden encontrar en los paquetes de simulación de procesos se encuentran los siguientes:

- Modelo de Van Laar.
- Modelo de Wilson.
- NRTL (dos líquidos no aleatorios).
- UNIQUAC.
- UNIFAC.

#### 1.5.5. Selección del modelo termodinámico

La mayoría de los manuales de usuario de los paquetes de simulación tienen un capítulo que hace referencia a la importancia de la termodinámica en la simulación de procesos y cómo rige los resultados obtenidos. Sin embargo, estos capítulos generalmente no se tienen en cuenta, hecho que debe cambiarse. Aquí en el árbol de la estación basado en uno que se encuentra en la referencia de la literatura se presenta.

*Tabla I-14. Algunos modelos integrados disponibles en Aspen Plus*

<b>Modelo Termodinámico</b>	<b>DESCRIPCION</b>
<b>NTRL-RK</b>	Modelo NRTL para la fase líquida y Redlich-Kwong para la fase vapor
<b>NRTL-HOC</b>	Modelo NRTL para la fase líquida y Hayden O'Connell para la fase vapor
<b>UNIQ-RK</b>	Modelo UNIQUAC para la fase líquida y Redlich-Kwong para la fase vapor
<b>UNIQ-HOC</b>	Modelo UNIQUAC para la fase líquida y Hayden-O'Connell para la fase vapor

*Fuente:* (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

### **1.5.6. Selección del Modelo de Propiedades**

Previamente se discutió la selección del modelo, y algunos aspectos restantes se analizan a continuación.

#### **1.5.6.1. Validar las propiedades físicas**

El primer paso en cualquier proyecto de simulación es verificar que las propiedades sean representativas. Para ello, el simulador debe generar tablas y gráficos con las propiedades calculadas para cada uno de los componentes (independientemente de que estén o no en la base de datos) y se comparan con información experimental y fuentes bibliográficas fiables.

Esta prueba también es importante para observar el comportamiento de las propiedades físicas como la densidad, la capacidad calorífica, la entalpía, etc., con los cambios de presión, temperatura y composición. También se puede observar su tendencia cuando se extrapolan los valores.

De manera similar, dicha validación se puede realizar con datos generados para el equilibrio líquido-líquido (LLE), el equilibrio líquido-vapor (VLE) y el equilibrio líquido-líquido de vapor (VLLE). Algunos simuladores pueden generar curvas de residuos para análisis de las operaciones de destilación de mezclas ternarias.

Si se encuentran algunas discrepancias en las propiedades, se pueden observar las propiedades de la sustancia pura para establecer qué componente es responsable del error.

El número de fases también debe seleccionarse adecuadamente para estimar el equilibrio adecuado para cada situación. Por ejemplo, si se quiere modelar una columna de destilación utilizada para la separación de una mezcla que presenta miscibilidad parcial, es preciso especificar si se pueden producir o no dos fases líquidas y una fase vapor, por lo que el simulador incorpora el equilibrio ternario en sus rutinas de cálculo.

### **1.5.7. Componentes Hipotéticos**

Si bien existe una gran cantidad de compuestos cuyas propiedades están registradas en la base de datos de los simuladores, también existen casos en los que no se reportan las propiedades de algunos componentes y, además, falta información experimental para realizar una regresión, siendo necesario el uso de componentes hipotéticos. Estos constituyen una poderosa herramienta que, utilizando diferentes métodos, permite predecir propiedades de compuestos utilizando información reducida como estructura química, peso molecular, temperatura y presión críticas, entre otras. De esa forma, el compuesto hipotético puede ser utilizado en la simulación y obtener una primera aproximación al comportamiento del sistema.

Esta herramienta también es muy útil en el análisis de mezclas multicomponentes. En este caso, los componentes hipotéticos se pueden utilizar para predecir mezclas de varios componentes con propiedades relativamente similares. Un ejemplo de esta aplicación es el modelado de fracciones de petróleo, caso en el que existe una gran cantidad de componentes pesados en la mezcla en muy bajas proporciones. Dichos componentes, con fines de simulación, se pueden modelar como un componente hipotético que los agrupa.

### **1.5.8. Selección del modelo de propiedad**

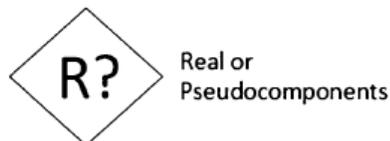
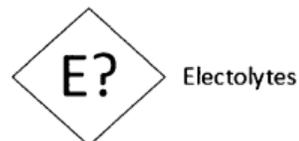
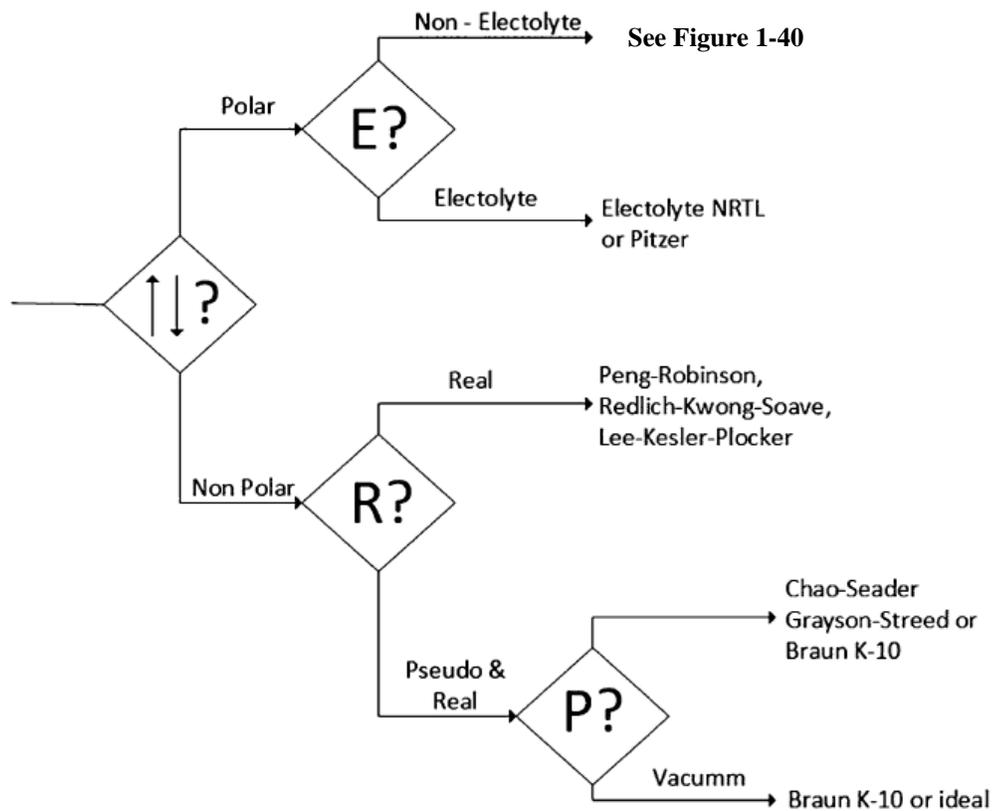
El modelo termodinámico también se denomina paquete de propiedades, porque son aspectos de las ecuaciones utilizadas para la determinación de las propiedades físicas de los componentes para simular la referencia.

Para realizar una adecuada selección, se proponen sus distintos parámetros a tener en cuenta, y cada ingeniero tiene su propio criterio. Con el objetivo de realizar una selección adecuada y responsable, se han publicado numerosos artículos y libros sobre este tema. El método más reconocido es el desarrollado por el ingeniero de símbolos de tecnología de Aspen, Eric Carlson, quien resume algunos parámetros principales para la selección en varios árboles de decisión que se muestran como la siguiente referencia.

En la *figura 1-39* se indican los primeros criterios a tener en cuenta para la selección de los modelos termodinámicos. La polaridad es un aspecto importante, ya que determina el tipo de interacción molecular que puede tener lugar entre las sustancias. Se puede deducir que, si la polaridad es alta, la interacción es fuerte. Se debe seleccionar el camino polar, incluso si solo uno de los componentes es polar. El segundo parámetro que se tiene en cuenta depende del primero; significa que la mezcla es polar (o al menos uno de los componentes), debe considerarse que la sustancia no es un electrolito. Este parámetro es relevante porque las mezclas electrolíticas están compuestas por iones obtenidos a partir de sales.

Su comportamiento genera la necesidad de incorporar rutinas de cálculo en equilibrio iónico, cuando estas estén disponibles. Las aplicaciones de este tipo de mezclas son varias: Lavado de cenizas, neutralizaciones, producción de ácido y precipitación de sales.

Fig. 1-40. Primeros pasos para la sección del modelo de propiedad



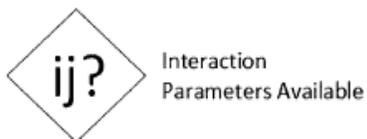
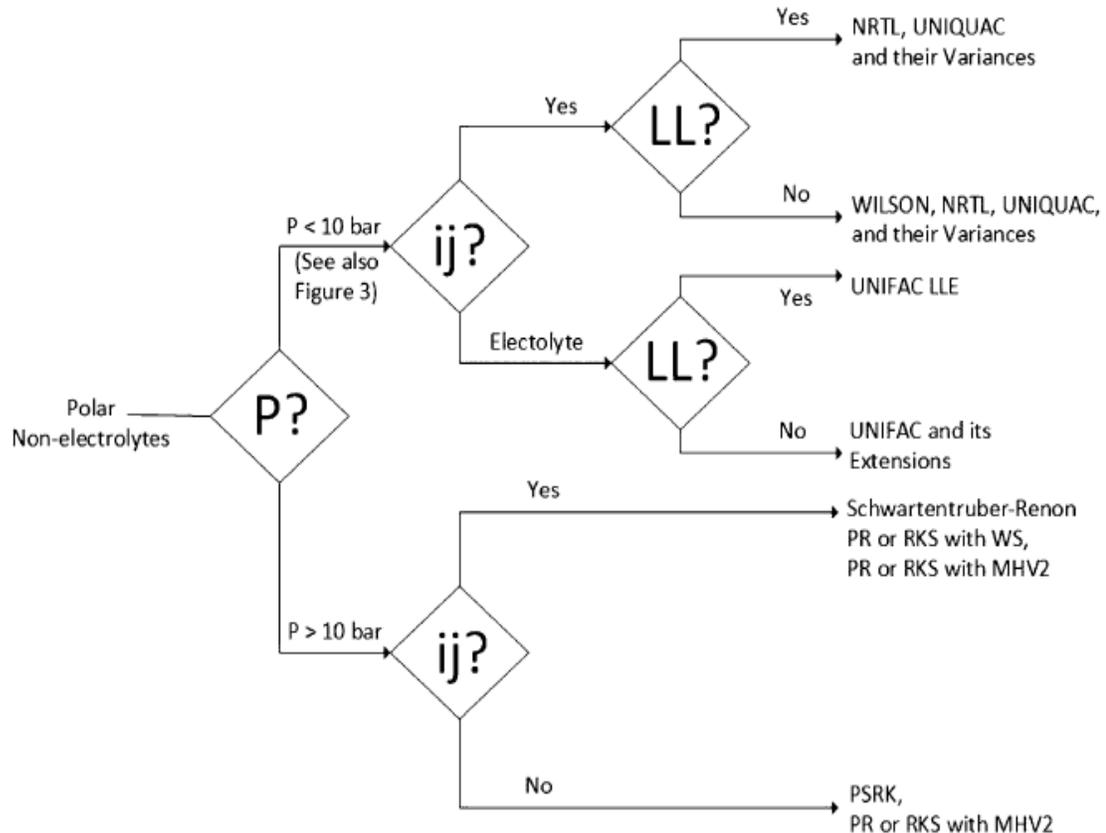
Fuente: (Carlson EC, 1996)

Para sustancias apolares se debe considerar la existencia de pseudocomponentes. Estos se emplean en mezclas no polares muy complejas, como es el caso del petróleo, en el que, al no poder identificarse algunos componentes, se genera la representación de un conjunto de componentes, generalmente clasificados por propiedades similares, como el punto de ebullición, para reducir el número de ellos. (Gil, Guevara, García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016).

Las propiedades de estos pseudocomponentes se obtienen como la media de las propiedades del componente.

En la *figura 1-40*, está presente el árbol de decisión subsiguiente para una mezcla polar de no electrolitos.

*Fig. 1-41. Procedimiento para compuestos polares no electrolíticos.*



*Fuente:* (Carlson EC, 1996)

La Figura 1-40 se utiliza cuando se trabaja con uno o más componentes polares no electrolíticos, es decir, sustancias que no se descomponen en iones al mezclarse con un solvente. Este diagrama de flujo considera una serie de parámetros para guiar el proceso de toma de decisiones.

**1. Presión de trabajo**

- Mayor a 10 bar
- Menor a 10 bar

**2. Parámetros de interacción disponibles (IJ)**

**3. Mezcla líquido/líquido (LL)**

**4. Para el caso de presiones menores a 10 bares**

- 3.1. Si la respuesta es "sí" en el punto **IJ**, se plantea una última pregunta. Si la mezcla es *líquido/líquido (LL)*, con esa información se puede determinar cuáles son los modelos termodinámicos apropiados.
- 3.2. Si la respuesta es "no" en el punto **IJ**, esto indica que se trata la mezcla como electrolítica. Luego, se responde si la mezcla de componentes es *líquido/líquido (LL)*, y con esa información se puede determinar cuáles son los modelos termodinámicos adecuados.

**5. Para el caso de presiones mayores a 10 bares**

- 4.1. Si la respuesta es "sí" en el punto **IJ**, ya se puede determinar cuáles son los modelos termodinámicos adecuados.
- 4.2. Si la respuesta es "no" en el punto **IJ**, ya se puede determinar cuáles son los modelos termodinámicos adecuados.

En general, se mencionan cinco tareas principales para la representación adecuada de las propiedades físicas:

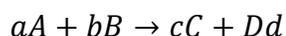
1. Seleccionar un método de propiedad física adecuado
2. Validar las propiedades físicas
3. Describir correctamente los componentes que no están presentes en la base de datos y los parámetros que faltan

4. Obtener y utilizar datos experimentales.
5. Estime cualquier parámetro faltante

Este proceso puede no ser secuencial y, hasta cierto punto, puede ser concurrente. Adicionalmente a la correcta selección del modelo, tiene que ser correctamente implementado, pues hay situaciones, como en el caso de las propiedades molares parciales, que el modelo no contempla y que pueden ser de importancia para el modelado de una operación o proceso.

### **1.5.9. Reacciones químicas**

Una reacción química es un proceso mediante el cual una o más sustancias, llamadas reactivos, se transforman en una o más sustancias con diferentes propiedades, a las que se les conoce como productos. En una reacción química se rompen los enlaces entre los átomos que forman los reactivos. Luego, los átomos se reorganizan de manera diferente, formando nuevos enlaces y dando lugar a una o más sustancias diferentes de las sustancias iniciales. (Harriot P, 2003)



Donde las sustancias que se encuentran a la izquierda de la flecha son los reactivos, y las otras ubicadas a la derecha de la flecha, son los productos.

#### **1.5.9.1. Estequiometría**

La estequiometría (del griego stoicheion, "elemento" y métr on, "medida") es el cálculo de las cantidades de reactivos y productos en el curso de la reacción química.

Estas relaciones se pueden deducir de la teoría atómica, aunque históricamente se ha planteado sin referencia a la composición de la materia, según diversas leyes y principios.

### 1.5.9.2. Conversión

La conversión está relacionada con la eficiencia de la reacción y teniendo como medida una de las sustancias presentes en la reacción, generalmente el reactivo limitante. La definición de la conversión se muestra a continuación:

$$x = \frac{\text{Moles de A que reaccionaron}}{\text{Moles totales de A}}$$

Por lo tanto, la conversión da una idea de qué tan eficiente fue la reacción a partir de la cantidad de A que se ha consumido para generar otras sustancias. Sin embargo, sólo sirve para referirse al consumo del reactivo A, independientemente del producto que se esté produciendo, en la mayoría de los casos ocurriendo más de una reacción simultáneamente; en tales casos también es necesario incluir el concepto de Selectividad. *Fuente:* (Fogler HS, 2008).

### 1.5.9.3. Selectividad

Existen cuatro categorías distintas de reacciones: reacciones en paralelo, reacciones en serie, reacciones complejas y reacciones independientes. Puede haber múltiples reacciones ocurriendo simultáneamente junto con la reacción principal, la cual debe ser favorecida sobre las demás.

La selectividad indica qué tan favorable es la producción de un producto sobre otro. Esto se debe a que la velocidad de ambas reacciones puede estar relacionada. Por ejemplo, considere que la reacción A es la reacción de producción de interés (D) y la reacción (B) es una reacción colateral que produce (U). Entonces la selectividad se puede expresar como:

$$r_{D/U} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{\text{Tasa de formacion de D}}{\text{Tasa de formacion de U}}$$

Sin embargo, para fines de cálculo, generalmente se emplea la selectividad total que relaciona las corrientes de productos en lugar de las velocidades de reacción.

$$r_{D/U} = \frac{F_D}{F_U}$$

La evidencia experimental muestra que existe una relación inversa entre la conversión y la selectividad. Para una mayor conversión, se disminuye la selectividad del producto de interés (D) ya que la reducción de la conversión favorece la selectividad. *Fuente:* (Levenspiel , 2004).

### **1.5.10. Ecuaciones para el diseño de reactores**

Las ecuaciones de diseño juegan un papel importante en el diseño de reactores, ya que representan su balance de materia y permiten el diseño preliminar del reactor. Pueden ser:

- Reactor de tanque agitado continuo.
- Reactor de flujo pistón (PFR=Plug Flow Reactor).
- Reactor por lotes o discontinuo.

#### **1.5.10.1. Modelos disponibles en Aspen Plus**

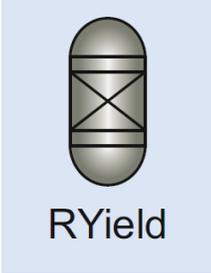
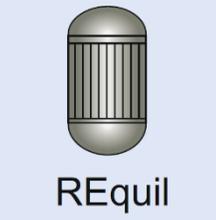
Hay tres tipos de módulos de reactores en los paquetes de simulación: pueden estar basados en balances, en equilibrio termodinámico o en cinética. El de equilibrio, realiza un balance de materia y energía para calcular la salida del reactor, el de equilibrio calcula las condiciones de salida minimizando la energía libre de Gibbs, y los reactores cinéticos se calculan teniendo en cuenta la cinética de reacción. Sin embargo, cabe señalar que los simuladores Aspen Plus® y Aspen HYSYS® NO realizan el diseño del reactor; simplemente calculan la conversión usando los datos de flujos, condiciones de operación, volumen del reactor y cinética de reacción usando las ecuaciones de diseño correspondientes a cada reactor.

En Aspen Plus®, existen dos módulos basados en el balance: RYield y RStoic. Hay dos módulos basados en el equilibrio: RGibbs y Requil, y tres módulos basados en la cinética: RCSTR, RPlug y RBatch.

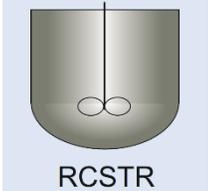
El ingreso de las reacciones se debe realizar en la sección Reacciones donde se selecciona el tipo de reacción y los parámetros requeridos dependiendo de su

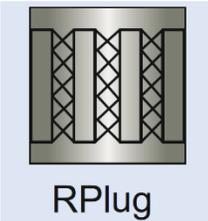
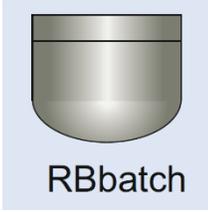
aplicación. En la ruta *Reactions>Chemistry* se puede ingresar como reacciones químicas especiales como disociación o precipitaciones de sal.

Tabla I-15. Resumen de módulos disponibles en Aspen Plus

Icono	Nombre	Descripción
	RYield	Permite realizar la simulación en base al rendimiento individual del componente, en kg o kmol de producto por kg de alimentación, tiene dos características: no es necesaria la inclusión de reacciones y no asegura un equilibrio atómico en el reactor, aunque los rendimientos estén normalizados para permitir el balance de masa.
	RStoic	Permite realizar la simulación de reacciones proporcionando una extensión molar (flujo de producto) o cualquier conversión molar fraccionaria de uno de los reactivos, proporciona el balance de masa en el equipo y hace una estimación del calor de reacción.
	REquil	Este módulo realiza el cálculo de la condición de equilibrio químico y termodinámico para reacciones proporcionadas por una estequiometría de aproximación, evalúa la carga térmica y la constante de equilibrio para las reacciones involucradas. No puede resolver la vaporización trifásica.

 <p>RGibbs</p>	RGibbs	<p>Calcula el equilibrio químico y de fases minimizando la energía libre de Gibbs, este módulo no requiere la provisión de reacciones y por lo tanto no calcula las constantes de equilibrio químico.</p>
---	--------	---

<b>Reactores Cinéticos</b>		
 <p>RCSTR</p>	RCSTR	<p>El módulo RCSTR modela reactores de tanque rigurosamente agitados, utilizando el supuesto de mezcla perfecta, es decir, el reactor tiene la misma composición de la corriente de producto, puede manejar reacciones cinéticas y de equilibrio.</p>

 <p>RPlug</p>	RPlug	<p>El módulo Rplug modela reactores rigurosamente tubulares con y sin embalaje, el módulo supone una mezcla perfecta en dirección radial y que no hay mezcla en dirección axial, permite la inclusión de refrigerante que fluye en contracorriente o en paralelo, y requiere conocimientos de la cinética de la reacción.</p>
 <p>RBatch</p>	RBatch	<p>El modelo RBatch permite simular reacciones discontinuas donde se debe conocer información cinética. Las corrientes de alimentación pueden ser continuas o discontinuas. Se requiere programación específica de lote.</p>

*Fuente: Aspen Plus*

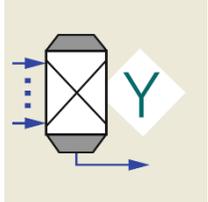
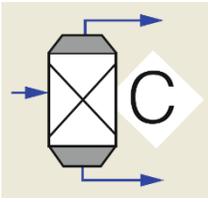
### **1.5.10.2. Módulos disponibles en Aspen Hysys**

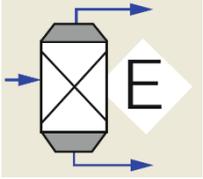
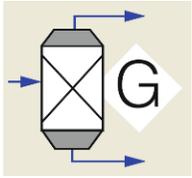
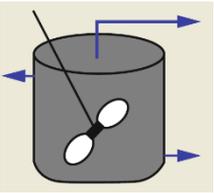
Para el caso de Aspen HYSYS existen dos módulos basados en el equilibrio: Yield Swift Reactor y Conversion Reactor. También existen dos módulos basados en el equilibrio: Equilibrium Reactor y Gibbs Reactor. Y dos módulos basados en la cinética: Plug Flow Reactor y CSTR. Cabe señalar que HYSYS® no cuenta con ningún módulo para reacciones por lotes, aunque el módulo CSTR puede ejecutarse en modo dinámico para tal fin.

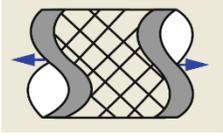
Al igual que en Aspen Plus ®, es necesario configurar las reacciones en un sitio específico de la interfaz y organizarlas en grupos. Para el caso de Aspen HYSYS®, los datos de reacción deben ingresarse al comienzo de la simulación cuando los componentes y propiedades del modelo están configurados en la pestaña Reacciones. Sin embargo, debe organizarse en conjuntos manualmente y debe asociarse en reacciones grupales a las propiedades del modelo para que el simulador pueda hacer los cálculos apropiados.

Una vez realizado este paso, el módulo del reactor puede seleccionar qué grupo de reacciones utilizar. Cabe señalar que los grupos deben contener el mismo tipo de reacciones (Equilibrio, cinética, conversión o equilibrio).

Tabla I-16. Resumen de módulos disponibles en Aspen Hysys

Icono	Modelo	Características
	Yield swift reactor	<p>Yield Shift Reactor se apoya en el uso de tablas de datos para el modelado de reactores y realiza cálculos de salto. La operación se puede utilizar en reactores complejos donde hay un modelo. Hay dos métodos para establecer el cambio de rendimiento de la reacción en un reactor: solo rendimiento o porcentaje de conversión. Según la información que proporcione, el reactor utiliza automáticamente la ecuación adecuada para resolver la reacción.</p>
	Conversión reactor	<p>El reactor de conversión es un recipiente en el que se llevan a cabo reacciones de conversión, solo se permite unir grupos de reacción que incluyen reacciones de conversión. Cada reacción del conjunto ocurre hasta que se alcanza la conversión especificada o hasta que se consume por completo un reactivo límite.</p>

	<p>Equilibrium reactor</p>	<p>El reactor de equilibrio es un módulo apropiado para reacciones de equilibrio. Las corrientes de salida del reactor están en equilibrio químico y físico. El grupo de reacciones que unen el módulo puede contener un número ilimitado de reacciones de equilibrio, que se resuelven simultánea o secuencialmente. Tampoco es necesario que los componentes o el proceso de mezcla sean ideales porque Aspen HYSYS® puede calcular la actividad de cada componente en la mezcla en función de la fugacidad de la mezcla y los componentes puros.</p>
	<p>Gibbs reactor</p>	<p>El reactor de Gibbs es único porque puede funcionar con o sin un conjunto de reacción. Calcula las composiciones de salida como el equilibrio químico y de fase, no requiere especificar la estequiometría para calcular la composición del producto. La condición de mínima energía libre de Gibbs se utiliza para calcular la composición de la mezcla de productos.</p>
	<p>CSTR</p>	<p>Equivalente al módulo RCSTR del Aspen Plus. Puede simular un reactor discontinuo utilizando el modo dinámico del módulo.</p>

	Plug flow reactor	Equivalente al módulo RPLug del Aspen Plus. Simula reacciones químicas que ocurren en reactores tubulares realizando el cálculo a lo largo de su longitud.
---	-------------------	--

*Fuente: Aspen Hysys*

**CAPÍTULO II**  
**ANÁLISIS Y SELECCIÓN DE VARIABLES**

## 2.1. Análisis de las variables del proceso

Para comprender las variables del proceso de obtención de amoníaco y urea, se requirió un análisis preliminar de los compuestos empleados y sus respectivas condiciones de trabajo (sólido, líquido, vapor). Por ende, se presenta a continuación una tabla que detalla todos los compuestos involucrados en el proceso, indicando el estado de la materia correspondiente.

*Tabla II-1. Compuestos involucrados en el proceso de obtención de Amoníaco*

<b>Compuestos</b>	<b>Estado</b>
Oxígeno	Gaseoso
Nitrógeno	Gaseoso
Hidrogeno	Gaseoso
Metano	Gaseoso
Monóxido de carbono	Gaseoso
Dióxido de carbono	Gaseoso
Amoníaco	Líquido/Gaseoso
Amina	Solución acuosa

*Fuente: Elaboración propia*

Tabla II-2. *Compuestos involucrados en el proceso de obtención de Urea*

<b>Compuestos</b>	<b>Estado</b>
Amoniacó	Líquido
Dióxido de carbono	Gas
Carbamato de amonio	Solución acuosa
Urea	Solución acuosa

*Fuente: Elaboración propia*

### 2.1.1. Variables del Proceso de obtención de amoniacó

Con los compuestos ya mostrados en la *tabla II-1* y teniendo en cuenta las recomendaciones sobre las condiciones de trabajo descritas en el subtítulo "**1.4.3. Equipos que intervienen en la producción de amoniacó**", se procede a enumerar las variables del proceso, incluyendo las dependientes, independientes y constantes, utilizadas en la obtención de amoniacó.

#### Dependientes

- Rendimiento del proceso de obtención de amoniacó.
- Porcentaje de conversión en los reactores flujo pistón.

#### Independientes

- Presión.
- Temperatura.
- Dimensiones de los reactores.
- Caudal de alimentación.
- Relación de alimentación  $H_2/N_2$ .

### **Constantes**

- Dimensiones de los reactores reformadores, shift de alta, baja temperatura y metanización.
- Porcentaje de conversión en los reactores de reformación de gas natural y reactores de obtención de carbamato y urea.
- Composición molar del gas natural de alimentación.
- Composición molar del aire de alimentación.
- Composición másica de la solución de urea al final del proceso de obtención de urea.

### **2.1.2. Variables del proceso de obtención de Urea**

Con los compuestos ya mostrados en la *tabla II-2* y tomando en cuenta las recomendaciones de condiciones de trabajo, como se presenta en el subtítulo “1.4.5. Equipos que intervienen en la producción de Urea”, se procede a mostrar las variables del proceso, incluyendo las dependientes, independientes y constantes del proceso de obtención de urea que se utilizaron.

#### **Dependientes**

- Rendimiento del proceso de obtención de urea.
- Temperatura de vacío en el concentrador de Urea.

#### **Independientes**

- Presión.
- Temperatura.
- Caudal de alimentación de gas natural al inicio del proceso.
- Presión de vacío en el concentrador de urea.
- Relación de alimentación de  $\text{CO}_2$ :  $\text{NH}_3$

## Constantes

- Composición molar de la corriente de amoníaco que entra al inicio del proceso de obtención de urea.
- Composición molar de la corriente de dióxido de carbono que entra al inicio del proceso de obtención de urea.
- Composición másica a la salida del reactor de urea.
- Composición másica a la salida del separador al vacío.

## 2.2. Selección de variables independientes y de respuesta dependientes

### 2.2.1. Selección de variables independientes del proceso de obtención de amoníaco

A continuación, se va a mencionar y explicar cuáles fueron las variables independientes seleccionadas para el análisis realizado en nuestra simulación de obtención de amoníaco.

- Presión.
- Temperatura.
- Dimensiones de los reactores flujo pistón.
- Relación de alimentación de  $H_2:N_2$
- Relación de alimentación Gas Natural: Vapor de agua

#### 2.2.1.1. Presión y temperatura

Dado que se está trabajando con compuestos en estado gaseoso, es crucial considerar la influencia significativa de la presión y la temperatura en las propiedades de dichos compuestos. Además de estos factores, valores como el porcentaje de conversión en los reactores, la absorción en los absorbedores y la desorción en los desorbedores varían considerablemente en función de las condiciones de entrada y salida. Por otra parte, en los reactores se emplean catalizadores altamente sensibles al aumento de temperatura, lo que requiere un control preciso de estas variables.

### **2.2.1.2. Dimensiones de los reactores flujo pistón**

Se tiene que tener en cuenta que, para los reactores de flujo pistón, el valor del porcentaje de conversión depende de las dimensiones del reactor. Es por eso que se debe considerar estos valores al realizar la simulación de la planta de amoniaco.

### **2.2.1.3. Caudal de alimentación de gas natural y vapor de agua al inicio del proceso**

La producción de amoniaco, los porcentajes de conversión de los reactores flujo pistón, así como las concentraciones de las corrientes de salida de los otros reactores, tienen una gran dependencia en la cantidad de gas natural y vapor de agua que ingresa al proceso. Por lo tanto, es crucial encontrar valores óptimos de alimentación que maximicen la producción de amoniaco.

### **2.2.2. Variables de respuesta dependientes del proceso de obtención de amoniaco**

Se va a mencionar y explicar cuáles fueron las variables dependientes seleccionadas en la simulación de obtención de amoniaco; estas pueden mostrar qué tan cercanos son los datos obtenidos de la simulación con los datos de campo.

- Porcentaje de conversión en los reactores flujo pistón.
- Rendimiento del proceso de obtención de amoniaco.

#### **2.2.2.1. Porcentaje de conversión de los reactores flujo pistón**

Los reactores de flujo pistón son uno de los equipos más importantes, dado que es donde se produce el amoniaco. Considerando que la reacción que ocurre en estos reactores tiene un bajo porcentaje de conversión, resulta crucial investigar cómo varía este valor en relación con las variables independientes. El objetivo es alcanzar un valor cercano o igual a los datos de campo y, además, determinar si es posible mejorar el porcentaje de conversión.

#### **2.2.2.2. Rendimiento del proceso de obtención de amoniaco**

Cuando se habla del rendimiento del proceso, se refiere a cómo cambia la cantidad de producto obtenido en función de las variables. Se busca las condiciones de trabajo más

favorables que permitan obtener altos rendimientos del producto final, con el fin de determinar si el proceso es tanto económica como técnicamente viable.

### **2.2.3. Selección de variables independientes del proceso de obtención de urea**

Se va a mencionar y explicar cuáles fueron las variables independientes seleccionadas para el análisis realizado en la simulación de obtención de urea.

- Presión.
- Temperatura.
- Caudal de alimentación de gas natural al inicio del proceso.
- Presión de vacío en el concentrador de urea.
- Relación de alimentación de  $\text{CO}_2$ :  $\text{NH}_3$

#### **2.2.3.1. Presión y temperatura**

Es importante tener en cuenta que en el proceso de obtención de urea se cuenta con reacciones heterogéneas (líquido/gas), las cuales son reacciones de equilibrio de descomposición. Tanto el aumento como la disminución de presión o temperatura pueden influir en que las reacciones produzcan el producto deseado o aumenten la cantidad de reactivo, lo que podría provocar una acumulación en los reactores y, además, reducir la eficiencia del proceso.

#### **2.2.3.2. Caudal de alimentación de gas natural y de vapor de agua**

En el subtítulo de las variables independientes de la producción de amoníaco, mencionamos que los caudales de alimentación de gas natural y de vapor de agua influyen considerablemente en la cantidad de amoníaco obtenido, pudiendo aumentar o incluso disminuir la producción. Dado que la producción de urea depende tanto de la cantidad de amoníaco como del dióxido de carbono, es necesario analizar cómo varía esta producción en función de las corrientes de entrada del proceso de obtención de amoníaco.

### **2.2.3.3. Relación de alimentación de CO<sub>2</sub>: NH<sub>3</sub>**

El dióxido de carbono en la planta de urea cumple dos funciones principales. Por un lado, actúa como reactivo en la obtención de carbamato, que es la sustancia intermedia para la producción de urea. Por otro lado, actúa como agente absorbedor del carbamato para su separación de la urea, recirculación y descomposición posterior en nitrógeno y dióxido de carbono. Por lo tanto, es necesario variar la relación de flujo del dióxido de carbono y observar cómo afecta a la producción de carbamato y urea, y determinar si la cantidad restante de dióxido de carbono actuando como absorbedor del carbamato no descompuesto es suficiente.

### **2.2.3.4. Presión de vacío en el concentrador de urea**

Por último, para concentrar la urea se requiere el uso de presiones de vacío, lo cual ayuda a evitar las altas temperaturas necesarias para evaporar el agua. Estas altas temperaturas podrían ocasionar la fundición de la urea, lo que sería perjudicial para el producto. Por lo tanto, es necesario analizar cómo varía la temperatura en función de los pequeños cambios que se realizan en la presión de vacío.

### **2.2.4. Selección de variable de respuesta dependientes del proceso de obtención de urea**

A continuación, se va a mencionar y explicar cuáles fueron las variables dependientes seleccionadas en nuestra simulación de obtención de urea. Estas variables pueden mostrar qué tan cercanos son los datos obtenidos de la simulación con los datos de campo, demostrando que las variaciones que se realice en las variables independientes generan respuestas reales en las variables dependientes.

- Rendimiento del proceso de obtención de urea.
- Temperatura de vacío en el concentrador de Urea.

#### **2.2.4.1. Rendimiento del proceso de obtención de urea**

Cuando mencionamos el rendimiento del proceso, se refiere a cómo varía la cantidad de producto obtenido en función de diferentes variables. El objetivo es encontrar las condiciones de trabajo más óptimas que permitan lograr altos rendimientos del producto final, para así evaluar la viabilidad económica y técnica del proceso.

#### **2.2.4.2. Temperatura de vacío en el concentrador de urea**

La variable directamente afectada por el cambio en la presión de vacío es la temperatura de salida de la urea. Esta debe mantenerse lo más baja posible para prevenir la fusión de la urea, sin embargo, es importante tener en cuenta que crear este vacío es un desafío tanto técnico como económico.

### **2.3. Selección del programa de simulación de procesos (Aspen Hysys-Aspen Plus)**

Como se expuso en el punto "*1.5. Simuladores de procesos químicos*", existen dos programas líderes en la simulación de procesos químicos: Aspen Plus y Aspen Hysys. Ambos programas son muy similares entre sí, pero presentan algunas diferencias que pueden ser relevantes. Por esta razón, se realizó una matriz comparativa con parámetros y puntajes evaluados bajo propio criterio.

Los parámetros son los siguientes:

- Base de datos de compuestos.
- Variedad de equipos de proceso.
- Facilidad de uso.
- Creación de moléculas hipotéticas.
- Análisis de líquidos, gases e hidrocarburos.

Tabla II-3. Matriz comparativa de los simuladores de procesos químicos

PARAMETROS		Programas de simulación de procesos químicos			
		Aspen Hysys		Aspen Plus	
Base de datos de compuestos	25	8	200	10	250
Variedad de equipos de proceso	25	9	225	10	250
Facilidad de uso	20	10	200	7	140
Creación de moléculas hipotéticas	15	9	135	7	105
Análisis de líquidos, gases e hidrocarburos	15	10	150	8	120
		Total	910	Total	865

Fuente: Elaboración propia

Como se puede observar en la matriz comparativa, la mejor opción para el trabajo de simulación es el programa **Aspen Hysys**.

**CAPITULO III**

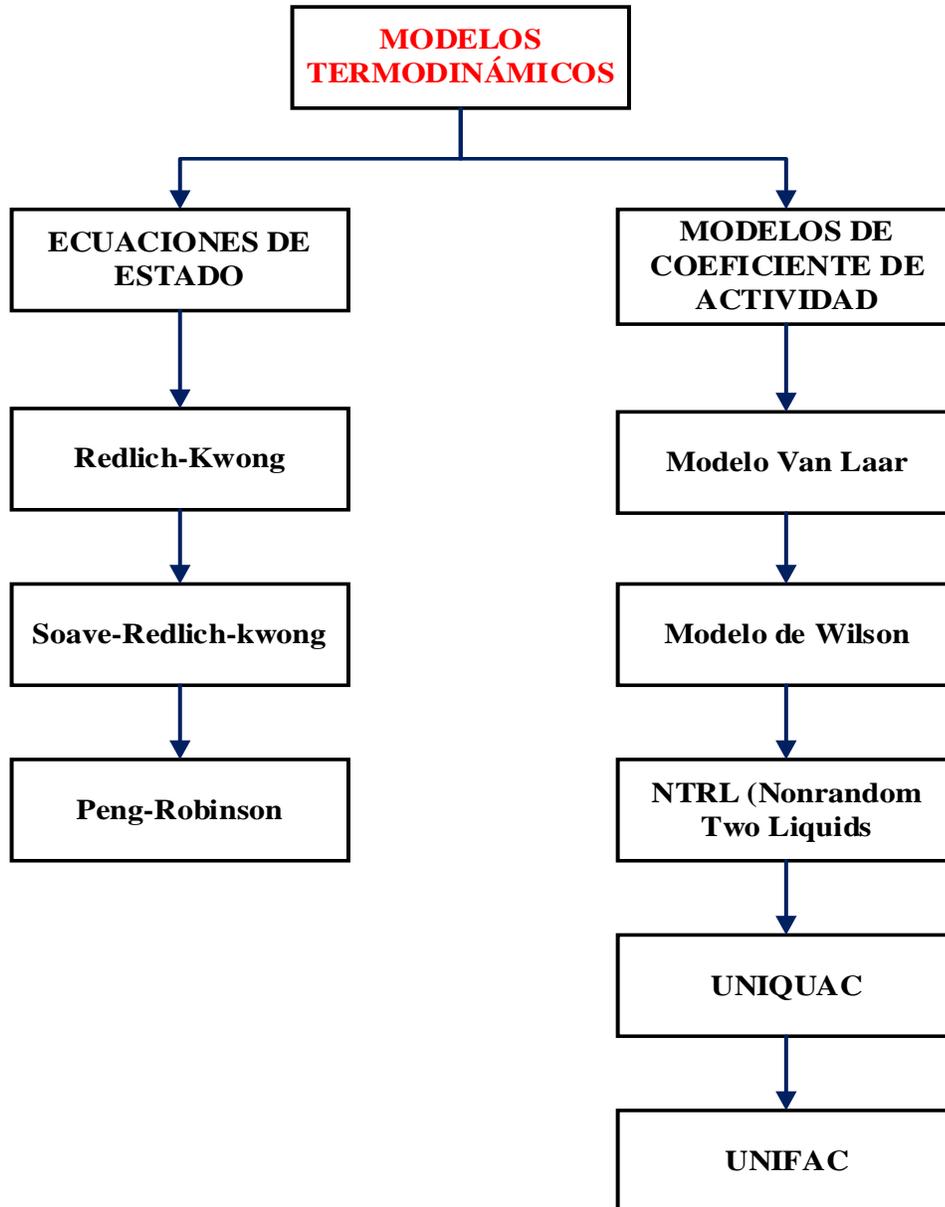
**IDENTIFICACIÓN Y SELECCIÓN DEL**

**MODELO**

### 3.1. Identificación de modelos termodinámicos

Durante la etapa de simulación, se llevó a cabo la selección del tipo de ecuaciones a utilizar. En este sentido, se presentarán algunos de los modelos termodinámicos más comúnmente empleados en el software Aspen Hysys.

Fig. 3-1. Modelos termodinámicos más comunes empleados en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

### 3.1.1. Ecuaciones de estado

#### 3.1.1.1. Redlich–Kwong

Introducida en 1949, la ecuación de Redlich-Kwong (RK) supuso una mejora sustancial con respecto a otras ecuaciones de su época. Sigue siendo el centro de atención debido a su expresión relativamente simple.

Aunque es mejor que la ecuación de Van der Waals, no proporciona buenos resultados para la fase líquida y, por lo tanto, no se puede utilizar para cálculos de equilibrios vapor-líquido. Sin embargo, en tales casos se puede emplear junto con expresiones concretas para la fase líquida.

La ecuación de Redlich-Kwong es adecuada para determinar las propiedades de la fase de vapor cuando la relación entre la presión y la presión crítica es inferior a la mitad de la relación entre la temperatura y la temperatura crítica.

El modelo correspondiente se presenta de la siguiente manera:

$$P = \frac{RT}{V_m} - \frac{a}{\sqrt{T}V_m(V_m + b)}$$

$$a = \frac{0,42748R^2T_c^{2,5}}{P_c}$$

$$b = \frac{0,08664RT_c}{P_c}$$

Donde:

$$R = 8,314 \text{ j/mol}$$

$$V_m = \text{Volumen molar}$$

*Fuente:* (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

#### 3.1.1.2. Soave–Redlich–Kwong

En 1972, Soave reemplazó el término  $\frac{a}{\sqrt{T}}$  de la ecuación de Redlich-Kwong por la expresión  $\alpha(T,\omega)$ , función de la temperatura y el factor acéntrico. La función  $\alpha$  fue

concebida para encajar con los datos de presión de vapor de los hidrocarburos; esta ecuación describe con precisión el comportamiento de esas sustancias. Se puede utilizar para representar correctamente las fases líquidas y de vapor.

El modelo con la corrección correspondiente se muestra a continuación:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m(V_m + b)}$$

$$a = \frac{0,42748R^2T_c^{2,5}}{P_c}$$

$$b = \frac{0,08664RT_c}{P_c}$$

$$\alpha = \{1 + (0,48508 + 1,55171\omega - 0,156613\omega^2)(1 - T_r^{0,5})\}^2$$

$$T_r = \frac{T}{T_c}$$

Las ventajas de utilizar este modelo en un paquete de simulación son:

- Es una modificación del modelo de Redlich-Kwong.
- Se pueden obtener resultados similares al modelo de Peng-Robinson (PR) pero con un desarrollo menor que en Aspen Hysys®.
- Tratamiento especial para componentes clave.
- Amplio Banco de Datos de parámetros binarios.

### 3.1.1.3. Peng–Robinson

La ecuación de Peng-Robinson se desarrolló en 1976 para lograr los siguientes objetivos:

- Los parámetros tuvieron que ser extrapolados con respecto al factor acéntrico y las propiedades críticas.

- El modelo debe ser razonablemente preciso cerca del punto crítico, particularmente para los cálculos del factor de compresibilidad y la densidad del líquido.
- Las reglas de mezcla no deben emplear más que un parámetro con respecto a las interacciones binarias que debe ser independiente de la presión, temperatura y composición.
- La ecuación debería ser aplicable para todos los cálculos de todas las propiedades de los fluidos en procesos que involucran el uso de gas natural.

Generalmente la ecuación de Peng-Robinson proporciona resultados similares a los de la ecuación de Soave, aunque es mejor predecir las densidades de muchos componentes en la fase líquida, especialmente aquellos que son no polares.

El modelo mencionado anteriormente se presenta de la siguiente manera:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m^2 + 2abV_m - b^2}$$

$$a = \frac{0,42748R^2T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0,07780RT_c}{P_c}$$

$$\alpha = \{1 + (0,37464 + 1,5422\omega - 0,26992\omega^2)(1 - T_r^{0,5})\}^2$$

Las ventajas de utilizar este modelo en un paquete de simulación son:

Es el modelo más desarrollado en Aspen Hysys.

- Alta precisión en un amplio rango de temperatura y presión.
- Tratamiento especial para componentes clave.
- Amplio Banco de Datos de parámetros binarios.

### 3.1.2. Modelos de coeficiente de actividad

Los modelos de coeficientes de actividad surgieron ante la incapacidad del modelo ideal para representar adecuadamente el comportamiento de las mezclas. Estos modelos se basan en la evaluación del exceso de energía libre de Gibbs. *Fuente:* (Gil, Guevara, García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

Entre los modelos de coeficientes de actividad que se pueden encontrar en los paquetes de simulación de procesos se encuentran los siguientes:

#### 3.1.2.1. Modelo Van Laar

El modelo de Van Laar se desarrolló a partir de la ecuación de Van der Waals para soluciones regulares. Tiene la particularidad de ser un modelo simple, con pocos parámetros, permitiendo un ajuste aceptable para aplicaciones de ingeniería. Además, puede considerarse como un modelo pionero en este tema y la base para investigaciones posteriores en el campo.

El modelo para un sistema binario se presenta a continuación:

$$\frac{G^{ex}}{x_1 x_2 RT} = \frac{A_{12} A_{21}}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2}$$

De lo anterior, las expresiones para los coeficientes de actividad se pueden deducir de la siguiente manera:

$$\ln \gamma_1 = A_{12} \left( 1 + \frac{A_{12} x_1}{A_{21} x_2} \right)$$

$$\ln \gamma_2 = A_{21} \left( 1 + \frac{A_{21} x_2}{A_{12} x_1} \right)^{-2}$$

Sin embargo, los parámetros de este modelo no dependen de la temperatura, algo que se corrige en los siguientes modelos. En la formulación se puede incluir la presencia de dos fases líquidas.

### 3.1.2.2. Modelo de Wilson

En 1964, Wilson fue uno de los primeros contribuyentes al desarrollo moderno de los coeficientes de fase líquida, incluido el concepto de composición local, trabajando con sistemas binarios.

Este concepto se debe a la interacción entre pares de sustancias, por lo que es necesario evaluar la energía involucrada en la interacción de las moléculas mediante la siguiente expresión:

$$\frac{x_{12}}{x_{11}} = \frac{x_2 \exp(-\gamma_{12}/RT)}{x_1 \exp(-\gamma_{11}/RT)}$$

Dichas energías se determinan cuando hay un exceso de sustancia 1 en presencia de sustancia 2 y viceversa. Las posibles combinaciones de esas energías se denominan  $\lambda_{11}$ ,  $\lambda_{22}$ ,  $\lambda_{12}$  y  $\lambda_{21}$ . Posteriormente, Wilson definió que las constantes de su modelo debían ser función de las energías mencionadas, y propuso las siguientes relaciones:

$$A_{12} = \frac{v_{2L}}{v_{1L}} \exp\left(-\frac{\lambda_{12} - \lambda_{11}}{RT}\right)$$

$$A_{21} = \frac{v_{1L}}{v_{2L}} \exp\left(-\frac{\lambda_{21} - \lambda_{22}}{RT}\right)$$

$$\lambda_{11} \neq \lambda_{22} \text{ y } \lambda_{12} = \lambda_{21}$$

Del mismo modo se obtuvieron las ecuaciones para la estimación de los coeficientes de actividad:

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + x_2 A_{12}) + x_2 \left( \frac{A_{12}}{x_1 + x_2 A_{12}} - \frac{A_{21}}{x_2 + x_1 A_{21}} \right)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + x_1 A_{21}) + x_1 \left( \frac{A_{12}}{x_1 + x_2 A_{12}} - \frac{A_{21}}{x_2 + x_1 A_{21}} \right)$$

Este modelo, que involucra la energía implicada en las interacciones, incluye indirectamente el efecto de la temperatura en los fenómenos moleculares responsables del equilibrio de fases. Sin embargo, el modelo de Wilson no toma en cuenta la

presencia de dos fases líquidas, por lo que se recomienda utilizar otro modelo para sistemas que reporten inmiscibilidad.

### 3.1.2.3. NRTL (Nonrandom Two Liquids)

El modelo NRTL fue desarrollado por Renon y Prausnitz en 1968. Es una extensión del concepto de composición local que tiene en cuenta la no aleatoriedad de las interacciones. La expresión correspondiente para el exceso de energía libre de Gibbs es:

$$\frac{G^{ex}}{RT} = x_1 x_2 \left( \frac{\tau_{21} G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} - \frac{\tau_{12} G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)$$

Los términos  $\tau_{ij}$  representan las diferencias entre las energías de interacción,  $\tau_{21} = g_{ij} - g_{ii}/RT$ . Los parámetros  $G_{ij}$  permiten la ausencia de aleatoriedad, con la ayuda del parámetro  $\alpha$  de la siguiente forma:

El parámetro  $\alpha$  puede considerarse ajustable; sin embargo, es mejor ajustarlo de acuerdo con los siguientes valores sugeridos.

Las ecuaciones que permiten el cálculo de los coeficientes de actividad son las siguientes:

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[ \frac{\tau_{21} G_{21}^2}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} - \frac{\tau_{12} G_{12}^2}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right]$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[ \frac{\tau_{12} G_{12}^2}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} - \frac{\tau_{21} G_{21}^2}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right]$$

De esta forma, el modelo NRTL requiere tres parámetros para un sistema binario.

### 3.1.2.4. UNIQUAC

UNIQUAC proviene de UNiversal QUAsi-Chemical y fue desarrollado por Abrams y Prausnitz en 1975. Mientras que para el modelo NRTL y Wilson se requiere información sobre la fracción de volumen local, el método UNIQUAC utiliza la fracción de superficie local como parámetro  $\theta_{ij}$ .

Cada molécula se caracteriza por dos parámetros experimentales:  $r$ , el número relativo de segmentos en la molécula (parámetro de volumen), y  $q$ , el área de superficie relativa (parámetro de superficie). Los valores de estos parámetros se obtuvieron principalmente mediante estadística mecánica. Otra particularidad es que para mezclas con alcoholes es posible incluir un parámetro  $q'$  para mejorar la precisión de los cálculos en una tercera fase.

*Tabla III-1. Valores sugeridos para el parámetro  $\alpha$  en el modelo NRTL*

Valor	Sistema
0,2	Hidrocarburos saturados con sustancias polares no asociadas.
0,3	Componentes no polares, también para agua y componentes polares no asociados.
0,4	Hidrocarburos saturados y CFS
0,47	Alcoholes y otros compuestos autoasociados no polares.

*Fuente:* (Gil, Guevara , García, Leguizamón, & Rodríguez, 2016)

El cálculo del exceso de energía libre de Gibbs se ejecuta a través de dos aportes: un término combinatorio que representa la influencia de parámetros estructurales como tamaño (parámetro  $r$ ) y forma (parámetro  $q$ ), y un término residual, que considera la energía de interacción entre los segmentos. En el caso de un sistema binario, la expresión para el exceso de energía libre de Gibbs es la siguiente:

- Término combinatorio:

$$\frac{G^{ex}}{RT} = x_1 \ln \left( \frac{\phi_1}{x_1} \right) + x_2 \ln \left( \frac{\phi_2}{x_2} \right) + \frac{z}{2} (q_1 x_1 \ln \left( \frac{\theta_1}{\phi_1} \right) + q_2 x_2 \ln \left( \frac{\theta_2}{\phi_2} \right))$$

- Término residual

$$\frac{G^{ex}}{RT} = q_1 x_1 \ln(\theta_1 + \theta_1 \tau_{21}) - q_2 x_2 \ln(\theta_2 + \theta_1 \tau_{21})$$

Los parámetros involucrados en la ecuación se explican a continuación:

- Fracción de segmento promedio  $\phi_i$

$$\phi_i = \frac{x_1 r_1}{x_1 r_1 + x_2 r_2}$$

- Fracción de superficie promedio ( $\theta_i$ )

$$\theta_i = \frac{x_1 q_1}{x_1 r_1 + x_2 r_2}$$

- Energía de interacción binaria ( $\tau_{21}$ )

$$\tau_{21} = \exp\left(-\frac{u_{ji} - u_{ii}}{RT}\right)$$

- Número de coordinación ( $z$ ) que es igual a 10.

El modelo UNIQUAC es igualmente eficaz que el modelo de Wilson. Además, como valor agregado, permite durante los cálculos determinar las situaciones en las que se alcanza el equilibrio líquido-líquido-vapor, es decir, la miscibilidad parcial en la fase líquida. En este caso, es posible que se requiera información adicional del sistema. La calidad de los datos de interacción binaria es crucial para obtener resultados suficientemente precisos; en ese sentido se debe prestar mucha atención durante la regresión de parámetros.

#### 3.1.2.4. UNIFAC

UNIFAC proviene del Coeficiente de Actividad Funcional UNiVersal, y es uno de los modelos predictivos existentes. Es una extensión del modelo UNIQUAC en el que los parámetros se estiman mediante el método de contribución grupal. Esto significa que se consideran los grupos funcionales y los enlaces que componen la molécula para estimar cómo se comporta una sustancia en presencia de otra.

En consecuencia, las ecuaciones de este modelo tienen la misma forma que el modelo UNIQUAC, y los parámetros se calculan mediante las siguientes fórmulas:

- Parámetros de volumen y área molecular del término combinatorio:

$$r_i = \sum_k V_k^i R_K$$

y

$$q_i = \sum_k V_k^i Q_K$$

donde  $V_k^i$  es el número de grupos funcionales  $k$  en la molécula  $i$  y  $R_K$  y  $Q_K$  son los parámetros del grupo funcional  $k$ .

- El término residual se reemplaza por:

$$\ln \gamma_i^R = \sum_k V_k^i (\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^i)$$

Donde  $\Gamma_k$  es el coeficiente de actividad del grupo funcional  $k$  para la mezcla actual, y  $\Gamma_k^i$  es el coeficiente de actividad residual del grupo funcional  $k$  en una mezcla de referencia.

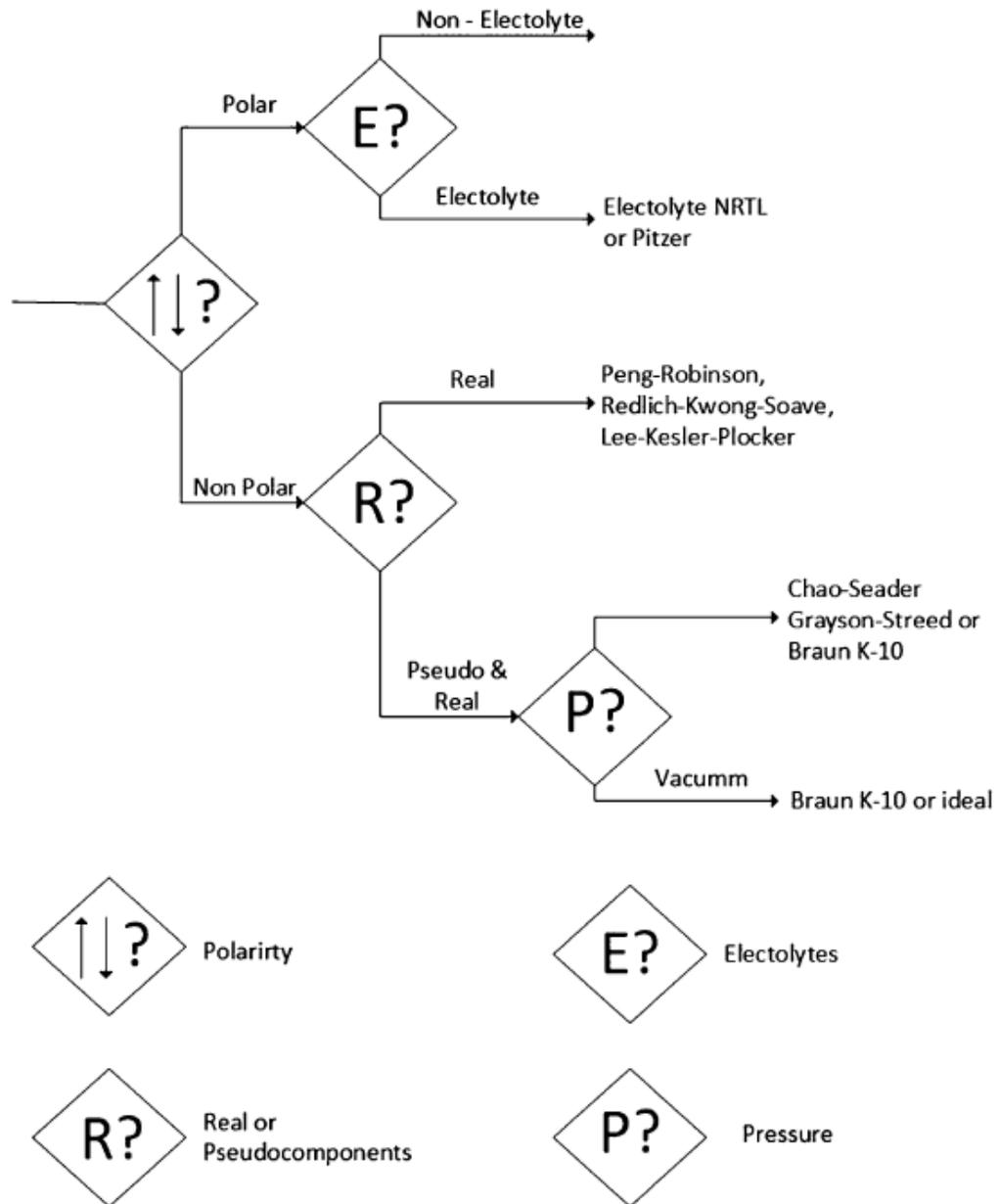
### 3.2. Selección del modelo termodinámico

Para la selección del modelo termodinámico adecuado, se consideraron al menos tres tipos diferentes de modelos para abordar los siguientes casos:

- Producción de amoníaco
- Uso de aminas
- Producción de urea

Además, se llevó a cabo la identificación del tipo de compuestos, clasificándolos como polar o no polar, con el fin de utilizar la *figura 3-2 Primeros pasos para la sección de modelo de propiedad* como guía para la selección del modelo termodinámico adecuado.

Fig. 3-2. Primeros pasos para la sección de modelo de propiedad.



Fuente: (Carlson EC, 1996)

### 3.2.1. Selección del modelo termodinámico para la producción de Amoniaco

Para la selección del modelo adecuado, se identificaron los compuestos relevantes y se clasificaron según el tipo de molécula. Los detalles se presentan en la **Tabla III-2** *Compuestos polar y no polares en el proceso de obtención de amoniaco.*

*Tabla III-2. Compuestos polares y no polares en el proceso de obtención de amoniaco*

<b>Compuesto</b>	<b>Polar/No Polar</b>
Metano	no polar
Agua	polar
CO	Polar
Hidrógeno	no polar
CO <sub>2</sub>	no polar
Oxígeno	no polar
Nitrógeno	no polar
Amoniaco	polar

*Fuente: Elaboración propia*

Como se observa en la **Tabla III-2** *Compuestos polares y no polares en el proceso de obtención de amoniaco*, la mayoría de los compuestos tratados son no polares. Es importante tener en cuenta que los compuestos polares identificados no están siendo utilizados en un proceso de medio electrolítico.

Otra consideración importante es que se está trabajando con compuestos reales en lugar de pseudo-compuestos.

Tomando en cuenta los datos presentados y el diagrama previamente mostrado, se concluye que los siguientes tres modelos termodinámicos podrían ser apropiados para la simulación:

- Peng-Robinson.
- Redli-Kwong-Soave.
- Lee-Kesler-Plocker.

Debido a su eficacia en el tratamiento de procesos que involucran hidrocarburos, su idoneidad como modelo para gases y su capacidad de interactuar efectivamente con compuestos no polares, se seleccionó el modelo termodinámico "*Peng-Robinson*" para el proceso de obtención de amoníaco.

### **3.2.1. Selección del modelo termodinámico para el uso de la amina en el proceso de obtención de amoníaco**

Durante el proceso de obtención de amoníaco, se requirió la selección de un modelo específico para el uso de la amina "Metil-etilAmina" como absorbente de dióxido de carbono en el "Splitter". No fue necesario realizar un análisis exhaustivo de la amina, dado que el software Hysys cuenta con un modelo termodinámico especializado para aminas denominado "*Acid Gas-Liquid Treating*" (Tratamiento de Gas Ácido-Líquido).

### **3.2.2. Construcción del componente hipotético carbamato de amonio**

Antes de realizar el análisis del modelo termodinámico para el proceso de obtención de urea, se llevó a cabo la construcción de un compuesto hipotético denominado "Carbamato de amonio". Esta medida fue necesaria debido a que Aspen Hysys no incluye este compuesto en su base de datos. El "Carbamato de amonio" es de suma importancia en el proceso, dado que la deshidratación de este compuesto es fundamental para la obtención de urea.

La molécula se construyó utilizando los siguientes datos:

Tabla III-3. Comparación de las estructuras del carbamato de amonio

Componente	Estructura actual de la molécula	Estructura hipotética UNIFAC
Carbamato de amonio		

Fuente: (Binti Sazali, 2007)

Tabla III-4. Información requerida para crear el componente hipotético

Componente	Peso Molecular (g/mol)	Punto de ebullición normal (°C)	Densidad (kg/m <sup>3</sup> )	Estructura UNIFAC
Carbamato de amonio	78,07	600	1100	

Fuente: (Binti Sazali, 2007)

Con la molécula construida, se prosigue con el análisis del modelo termodinámico para el proceso de obtención de urea.

### 3.2.3. Selección del modelo termodinámico para el proceso de obtención de Urea

Para la selección del modelo, se identifica los compuestos involucrados y el tipo de molécula al que pertenecen. Esta información se presenta detalladamente en la “*Tabla III-5 Compuestos polares y no polares en el proceso de obtención de urea*”

Tabla III-5. *Compuestos polares y no polares en el proceso de obtención de urea*

Compuesto	Polar/NoPolar
Urea	Polar
Agua	Polar
CO <sub>2</sub>	No polar
Amoniaco	Polar
Hidrogeno	No polar
Carbamato de amonio (seudo-componente)	Polar

*Fuente: Elaboración propia*

Como se observado, la mayoría de los compuestos involucrados son polares y reales. Además, es importante destacar que el carbamato genera un medio electrolítico.

Es importante tener en cuenta que Aspen Hysys cuenta con un asistente que sugiere los modelos termodinámicos más adecuados para los compuestos presentes en nuestra simulación. Además, para el proceso de obtención de urea, el cual ha sido ampliamente estudiado, AspenTech recomienda utilizar el modelo Electrolyte NRTL si se desea simular el proceso en Aspen Hysys. (Aspentech, 2011).

El modelo Electrolyte NRTL consiste en lo siguiente:

El modelo de coeficiente de actividad Electrolyte NRTL (GMENRTL) es un modelo versátil para el cálculo de coeficientes de actividad. Utilizando parámetros binarios y de pares, el modelo puede representar sistemas de electrolitos acuosos, así como sistemas de electrolitos de disolventes mixtos en todo el rango de concentraciones de electrolitos. Este modelo puede calcular coeficientes de actividad para especies iónicas y especies moleculares en sistemas de electrolitos acuosos, así como en sistemas de electrolitos con disolventes mixtos. El modelo se reduce al conocido modelo NRTL cuando las concentraciones de electrolitos llegan a ser cero. (Aspentech, 2011).

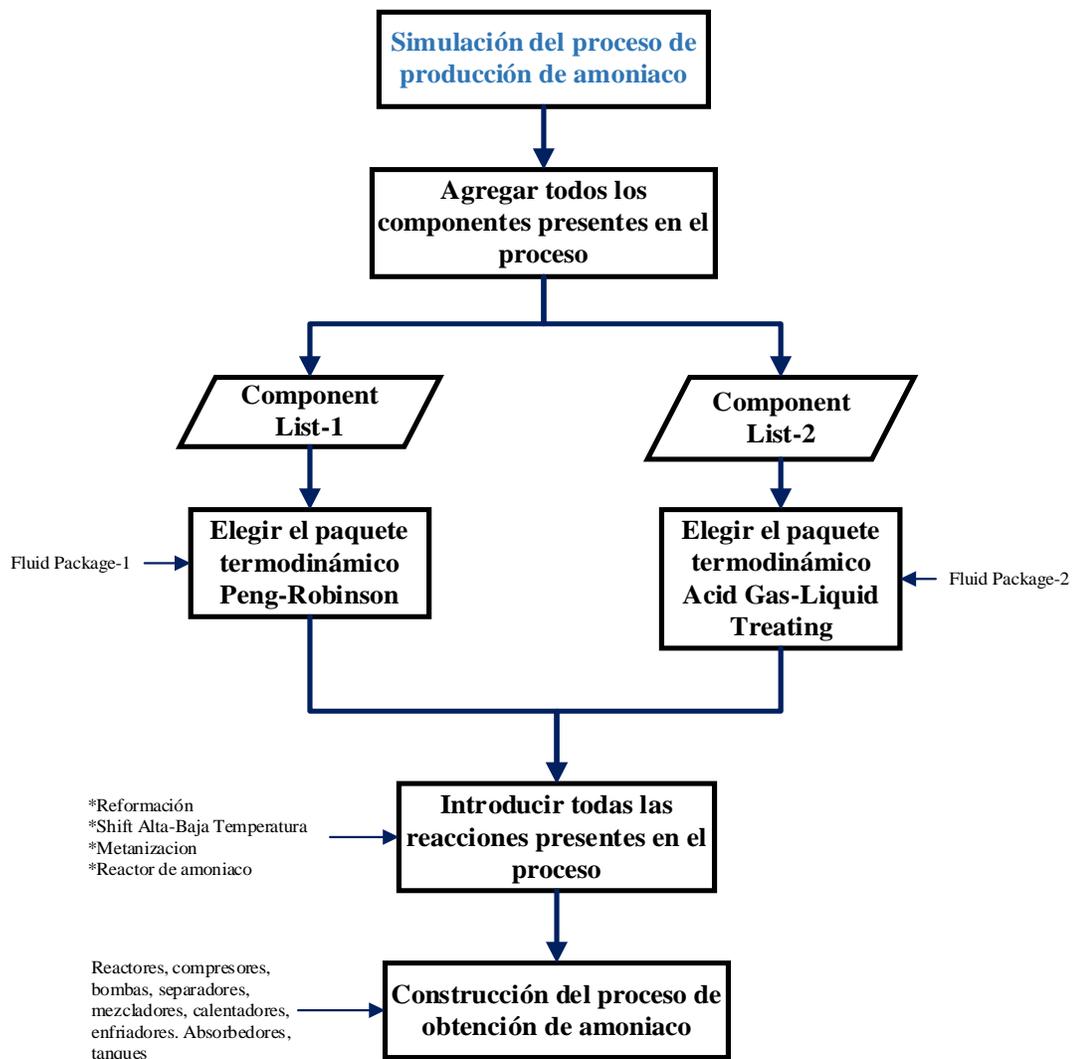
Considerando todos estos criterios, se concluye que el modelo seleccionado para la simulación del proceso de obtención de urea será el modelo **Electrolyte NRTL (GMENRTL)**.

**CAPÍTULO IV**  
**DESARROLLO DEL MODELO DE**  
**SIMULACIÓN**

#### 4.1. Desarrollo del modelo

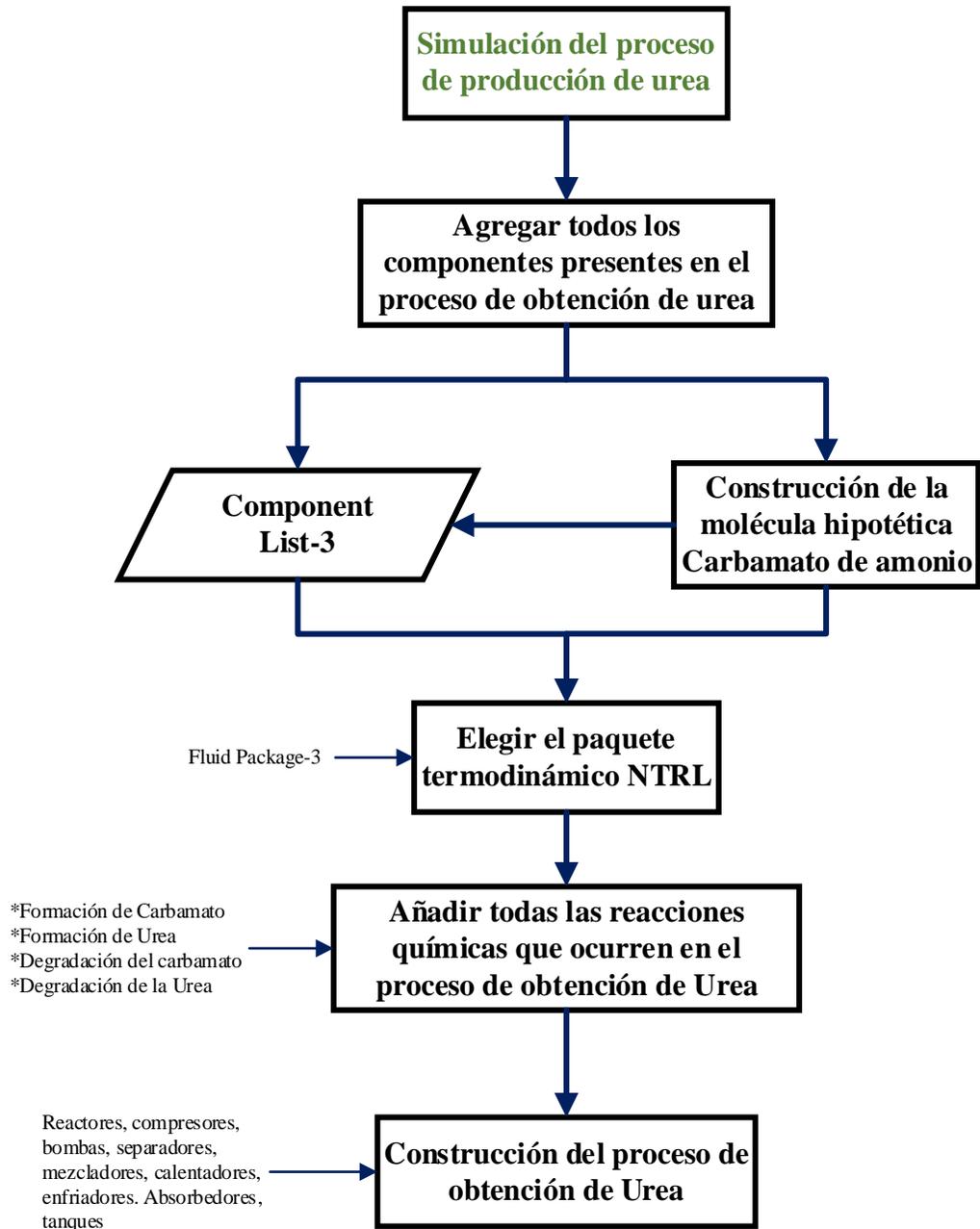
En los siguientes diagramas de bloques “Fig 4-1 Diagrama de bloques para la construcción de la simulación de obtención de amoniaco” y “Fig 4-2 Diagrama de bloques para la construcción de la simulación de obtención de urea” se presenta una visión general del proceso para la construcción de la simulación de obtención de amoniaco y urea.

Fig. 4-1. Diagrama de bloques para la construcción de la simulación de obtención de amoniaco



Fuente: Elaboración propia

Fig. 4-2. Diagrama de bloques para la construcción de la simulación de obtención de urea



Fuente: Elaboración propia

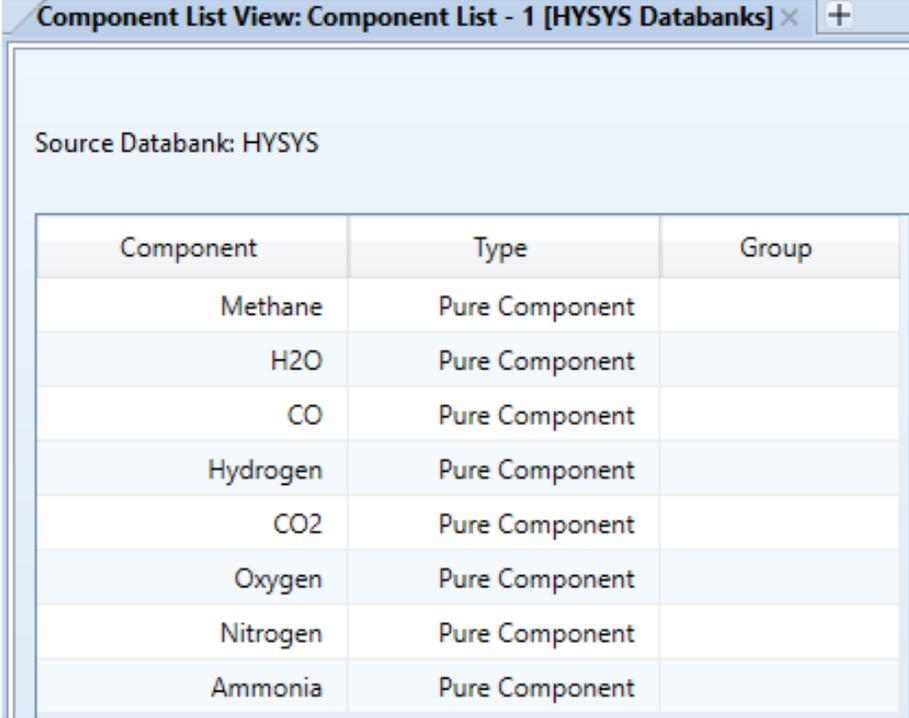
#### 4.1.1. Desarrollo del modelo de producción de amoniaco

##### 4.1.1.1. Componentes para la simulación de producción de amoniaco (I)

En primer lugar, en el proceso de simulación se elaboraron dos listas de componentes. Una de estas listas comprende los compuestos involucrados en la producción de amoniaco, mientras que la otra lista contiene la amina. Esta distinción fue necesaria debido a la utilización de dos modelos termodinámicos diferentes para cada una de las listas.

La lista de componentes son las siguientes:

*Fig. 4-3. Lista de componentes uno para la producción de amoniaco*

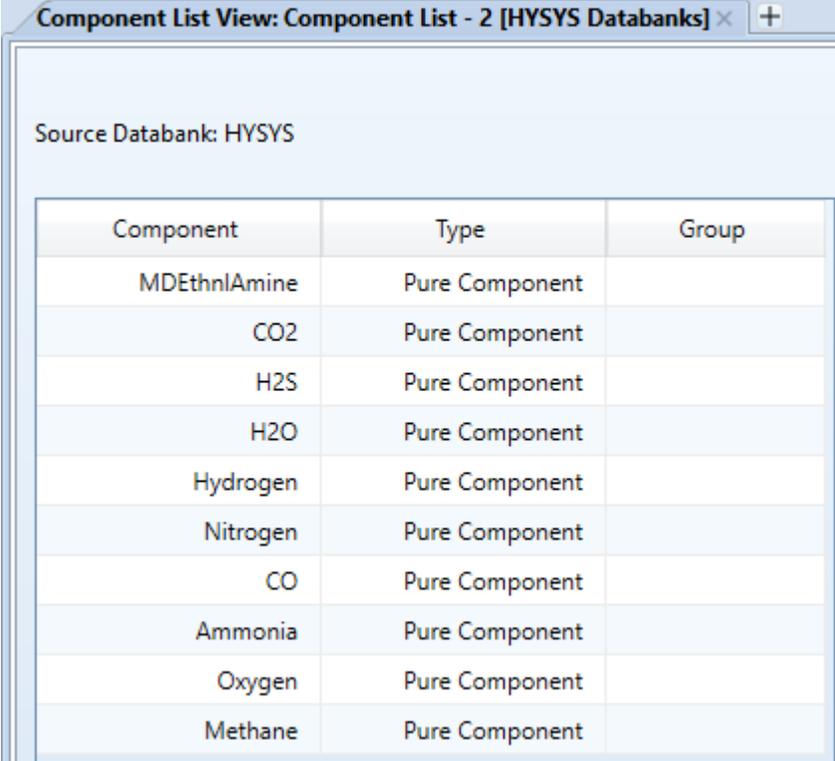


The screenshot shows a window titled "Component List View: Component List - 1 [HYSYS Databanks]". Below the title bar, it indicates "Source Databank: HYSYS". The main content is a table with three columns: "Component", "Type", and "Group". The table lists the following components, all of which are "Pure Component" type:

Component	Type	Group
Methane	Pure Component	
H2O	Pure Component	
CO	Pure Component	
Hydrogen	Pure Component	
CO2	Pure Component	
Oxygen	Pure Component	
Nitrogen	Pure Component	
Ammonia	Pure Component	

*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 4-4. Lista de componentes para el uso de la amina



The screenshot shows a window titled "Component List View: Component List - 2 [HYSYS Databanks]". Below the title bar, it indicates "Source Databank: HYSYS". The main content is a table with three columns: "Component", "Type", and "Group". The table lists the following components, all of which are "Pure Component" type:

Component	Type	Group
MEthnlAmine	Pure Component	
CO2	Pure Component	
H2S	Pure Component	
H2O	Pure Component	
Hydrogen	Pure Component	
Nitrogen	Pure Component	
CO	Pure Component	
Ammonia	Pure Component	
Oxygen	Pure Component	
Methane	Pure Component	

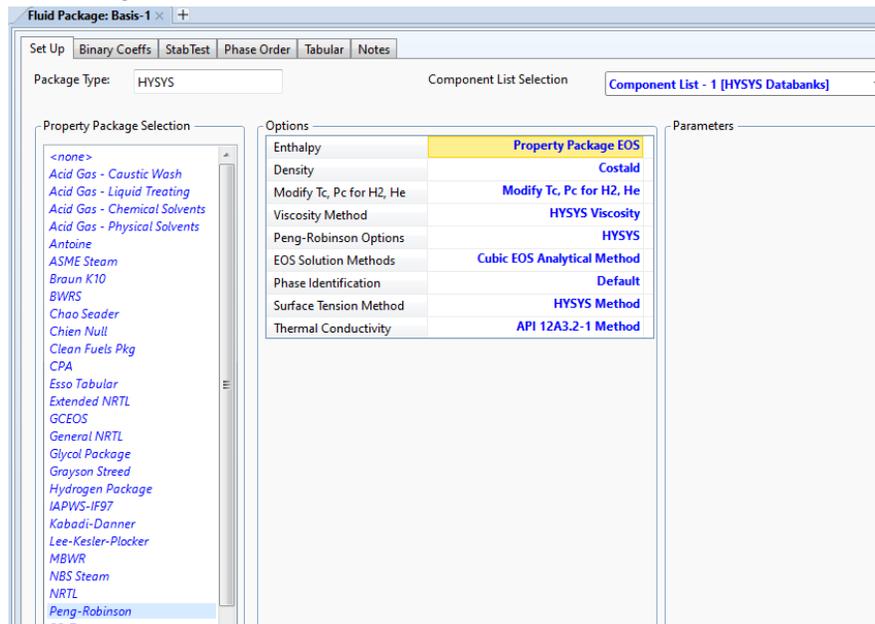
Fuente: Elaboración propia

En la segunda lista de componentes, el ácido sulfhídrico se incorpora automáticamente como parte del paquete termodinámico utilizado para modelar la amina. Es importante destacar que esta inclusión automática no tiene impacto alguno en el proceso en cuestión.

#### 4.1.1.2. Paquetes termodinámicos en la simulación de producción de amoniac

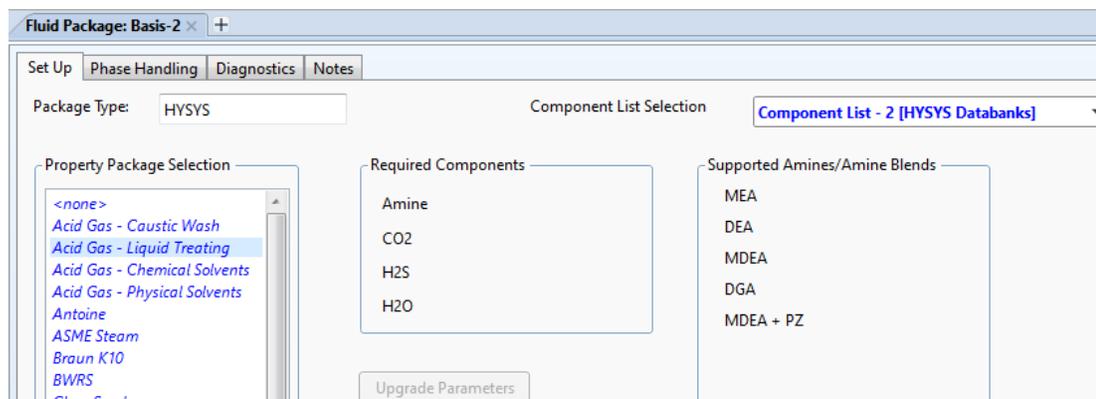
En esta sección, se determinaron los paquetes termodinámicos seleccionados durante el análisis detallado realizado en los apartados “3.2.1. Selección del modelo termodinámico para la producción de Amoniac” y “3.2.3 Selección del modelo termodinámico para el proceso de obtención de Urea”. El primero, enfocado en la selección del modelo termodinámico para la producción de amoniac, y el segundo, centrado en la elección del modelo para el uso de la amina, se concluyó que los modelos más idóneos son el Peng-Robinson y el Acid Gas-Liquid Treating, respectivamente.

Fig. 4-5. Selección del modelo termodinámico numero 1



Fuente: Elaboración propia

Fig. 4-6. Selección del modelo para el uso de la amina



Fuente: Elaboración propia

#### 4.1.1.3. Reacciones químicas en la simulación de obtención de amoníaco

Las reacciones químicas empleadas en la simulación corresponden a las detalladas y explicadas en el apartado “1.4.3. Equipos que intervienen en la producción de amoníaco”. Además, se utilizaron diversos tipos de reactores en el proceso, los cuales son los siguientes:

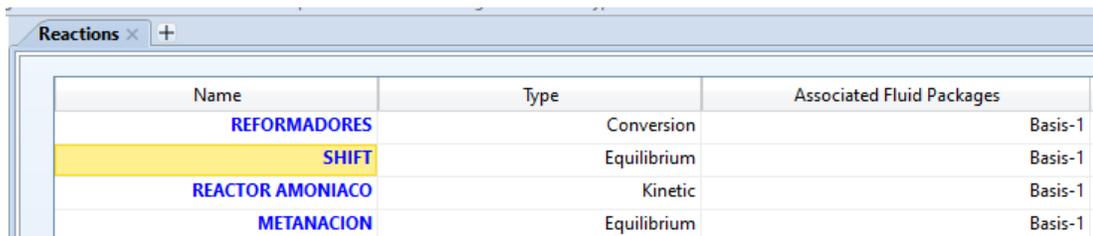
- Reformadores-Reactor de conversión.
- Reactor shift alta y baja temperatura-Reactor de equilibrio.
- Reactor de Metanación-Reactor de equilibrio.
- Reactor de amoniaco-Reactor flujo pistón.

En las reacciones que ocurren en los reformadores, se emplearán reactores de conversión en lugar de reactores cinéticos. Esto se debe a la falta de disponibilidad de datos sobre las constantes cinéticas específicas de dichos reactores, las cuales se consideran información confidencial de la empresa. En consecuencia, resulta imposible obtener estos datos. No obstante, gracias a la bibliografía consultada, se cuenta con información sobre los porcentajes reales de conversión que se producen en los reactores. Esta información será suficiente para simular esta sección del proceso, ya que se trata principalmente de la obtención de reactivos ( $H_2-N_2$ ).

Por otro lado, tanto los reactores shift de alta temperatura, el de baja temperatura y el reactor de metanización, se utilizarán reactores de equilibrio. Esto se debe a que estas tres reacciones son de equilibrio y son bastante comunes, lo que permite a Aspen Hysys simularlos con bastante fiabilidad.

Por último, en el reactor de obtención de amoniaco, se utilizarían reactores cinéticos. Esto se debe a que Aspen Hysys ya cuenta con los datos cinéticos de dicha reacción. El proceso de obtención de amoniaco es ampliamente conocido y simulado en todo el mundo, lo que facilita el acceso a esta información.

*Fig. 4-7. Reacciones de la simulación de producción de amoniaco*



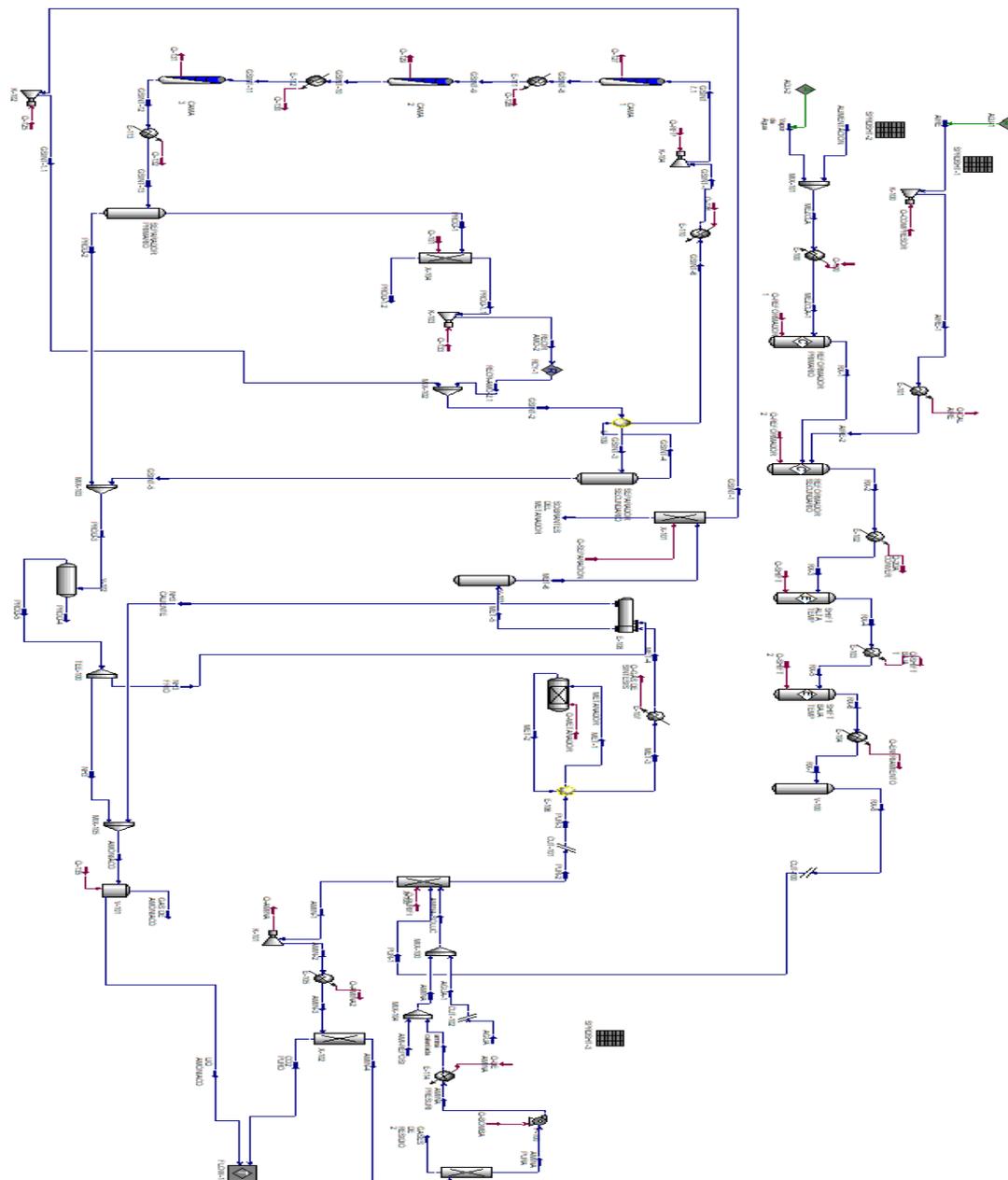
Name	Type	Associated Fluid Packages
REFORMADORES	Conversion	Basis-1
SHIFT	Equilibrium	Basis-1
REACTOR AMONIACO	Kinetic	Basis-1
METANACION	Equilibrium	Basis-1

*Fuente: Elaboración propia*

#### 4.1.1.4. Construcción del proceso de obtención de amoniaco en Aspen Hysys

Con todos los datos recopilados y presentados de la bibliografía, se prosiguió a construir el proceso completo en Aspen Hysys. La siguiente figura muestra cómo quedó el diagrama de flujo dentro del simulador.

Fig. 4-8. Simulación de la producción de amoniaco en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Se puede destacar del diagrama que en la parte superior se encuentran los reactores de obtención de hidrógeno y nitrógeno. En la sección central, se ubica todo el proceso de purificación de hidrógeno, nitrógeno y amoníaco. En la parte inferior del diagrama, se observan los reactores de obtención de amoníaco y almacenamiento.

Los equipos que están presentes en la simulación de obtención de amoníaco se muestran en la siguiente tabla.

*Tabla IV-1. Equipos involucrados en la simulación de la sección de obtención de gas de síntesis de amoníaco*

<b>PRODUCCION DE AMONIACO</b>		
<b>Sección</b>	<b>Equipo</b>	<b>Tag/Nombre</b>
<b>Obtención de gas de síntesis de amoníaco</b>	Mezcladores	MIX-101
	Calentador	E-100
	Enfriador	E-101
		E-102
		E-103
		E-104
	Compresor	K-100
	Reactor de conversión	Reformador primario
		Reformador secundario
Reactor de equilibrio	Shift alta temp	
	Shift baja temp	
Separador flash	V-100	
Manipuladores	ADJ-1	
	ADJ-2	
	SPRDSHT-1	
	SPRDSHT-2	
	CUT-100	

*Fuente: Elaboración propia*

Tabla IV-2. Equipos involucrados en la simulación de la sección de purificación y metanización

<b>PRODUCCIÓN DE AMONIACO</b>		
<b>Sección</b>	<b>Equipo</b>	<b>Tag/Nombre</b>
<b>Purificación y metanización</b>	Mezcladores	MIX-100 MIX-104
	Calentador	E-114
	Enfriador	E-105 E-107
	Absorbedores	X-100 X-101 X-102 X-103
	Bomba	P-100
	Expansor	K-101
	Reactor de equilibrio	Metanador
	Intercambiador de calor	E-106 E-108
	Separador flash	V-103
	Manipuladores	CUT-101 CUT-102

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-3. Equipos involucrados en la simulación de la sección circuito de producción de amoniaco y almacenaje

<b>PRODUCCIÓN DE AMONIACO</b>		
<b>Sección</b>	<b>Equipo</b>	<b>Tag/Nombre</b>
<b>Circuito de producción de amoniaco y almacenaje</b>	Mezclador	MIX-102 MIX-103 MIX-105
	Separador de corrientes	TEE-100
	Calentador	E-110
	Enfriador	E-111 E-112 E-113
	Intercambiador de calor	E-109
	Compresor	K-102 K-104
	Reactor flujo pistón	CAMA 1 CAMA 2 CAMA 3
	Separador flash	Separador primario  Separador secundario  V-102
	Tanque de almacenamiento	V-101
	Manipuladores	RCY-1 FLOW-1

Fuente: Elaboración propia

#### 4.1.1.5. Base de diseño de la simulación de producción de amoniaco

En este punto se mostrará a través de las siguientes tablas, cuáles son las condiciones de trabajo de los equipos involucrados en Temperatura, presión y caudales, todos estos datos se basan en lo mostrado en el punto “1.4.3. Equipos que intervienen en la producción de amoniaco”.

Tabla IV-4. Condiciones de trabajo del flujo masico de gas natural, vapor de agua y aire natural

Alimentación de gas natural (ALIMENTACIÓN)				
Compuestos	Fracción másica	Flujo másico total (tonelada/año)	Presión (Bar)	Temperatura (°C)
Metano	0,9232	2,51E+05	57,57	540
Hidrógeno	0,0026			
Dióxido de carbono	0,052			
Nitrógeno	0,0222			
Alimentación de vapor de agua (Vapor de agua)				
Compuestos	Fracción másica	Flujo másico total (tonelada/año)	Presión (Bar)	Temperatura (°C)
Agua	1	3,18E+05	57,57	540
Alimentación de aire natural (Aire)				
Compuestos	Fracción másica	Flujo másico total (tonelada/año)	Presión (Bar)	Temperatura (°C)
Nitrógeno	0,2329	4,85E+05	43,74	500
Oxígeno	0,7671			

Fuente: Elaboración propia

Estas tres corrientes se muestran a detalle por ser las corrientes con las que se inicia el proceso de obtención de amoniaco y posteriormente la de obtención de urea. De estas tres corrientes se obtendrán los productos principales de la planta, amoniaco, dióxido de carbono y urea.

El siguiente paso consiste en mostrar las condiciones de trabajo de los diversos equipos presentes en la simulación de obtención de amoniaco.

*Tabla IV-5. Condiciones de trabajo del reformador primario y secundario*

	<b>Condiciones de trabajo de los reformadores primario y secundario</b>	
	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (Bar)</b>
<b>Reformador primario</b>	713	40,7
<b>Reformador secundario</b>	896	40,7

*Fuente: Elaboración propia*

*Tabla IV-6. Condiciones de trabajo de los reactores shift*

	<b>Condiciones de trabajo de los reactores shift</b>	
	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (Bar)</b>
<b>Shift de alta temperatura (SHIFT ALTA TEMP)</b>	350-400°C	40,7
<b>Shift de baja temperatura (SHIFT BAJA TEMP)</b>	200-250°C	40,7

*Fuente: Elaboración propia*

Tabla IV-7. Condiciones de trabajo del separador flash

Condiciones de trabajo del Separador flash (V-100)	
Temperatura (°C)	Presión (Bar)
70	40,7

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-8. Condiciones de trabajo de los absorbedores y desorbedores de dióxido de carbono

Condiciones de trabajo de los absorbedores de dióxido de carbono (X-100, X-102 y X-103)		
Equipo	Temperatura (°C)	Presión (Bar)
X-100	85,3	36,87
X-102	50	7,355
X-103	50	7,35

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-9. Condiciones de trabajo de la sección de metanización

Condiciones de trabajo de la sección de metanización		
Equipo	Temperatura (°C)	Presión (Bar)
METANADOR	310	36,87
E-106	316	36,87
	79,03	35
E-108	4	35
	14,51	18,63
V-103	4	35
X-101	65	150

Fuente: Elaboración propia

*Tabla IV-10. Condiciones de trabajo de la sección circuito de producción de amoniaco y almacenaje*

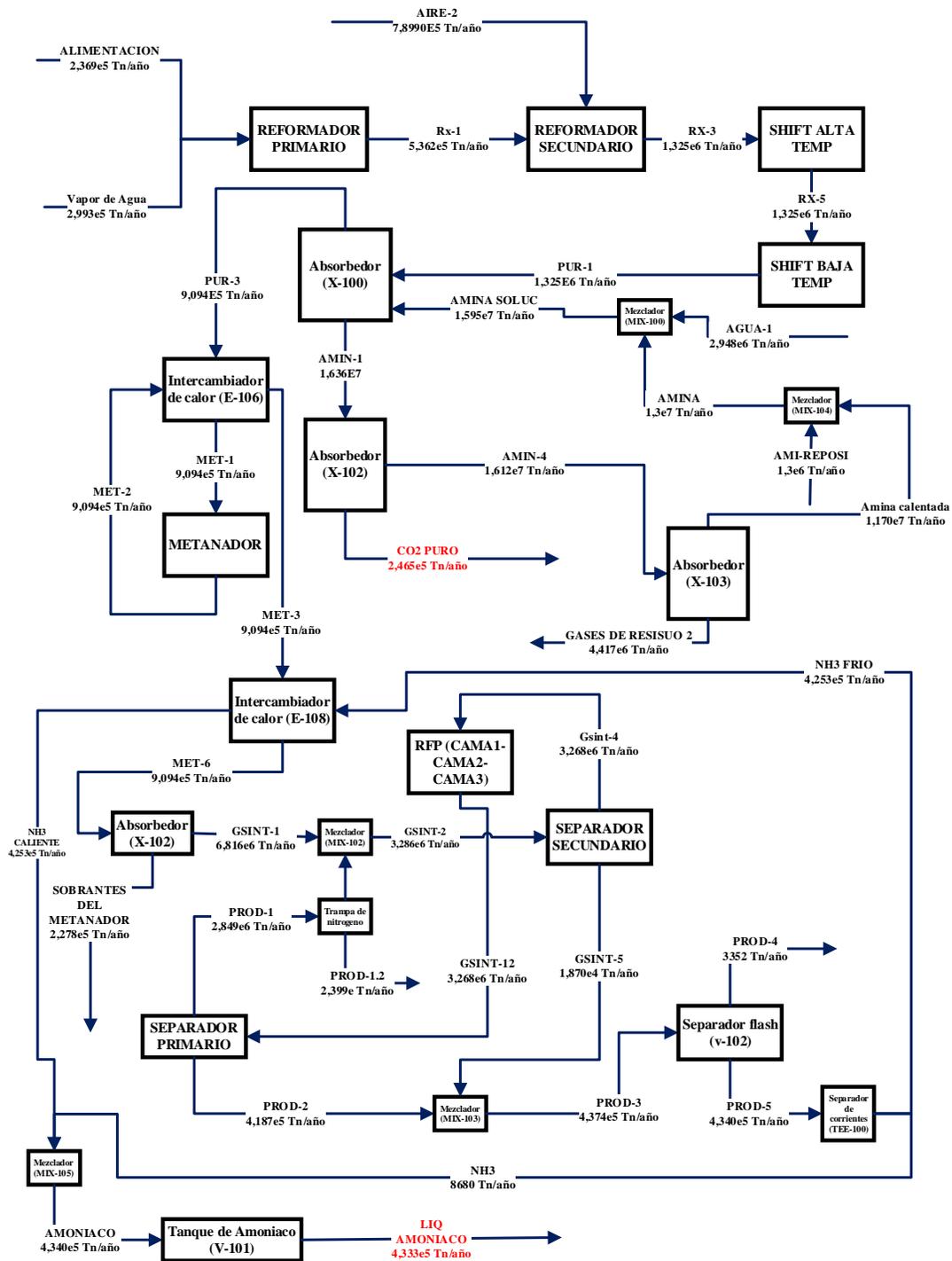
<b>Condiciones de trabajo de la sección circuito de producción de amoniaco y almacenaje</b>		
<b>Equipo</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (Bar)</b>
K-102	69,29	154,9
E-109	-33	154,9
	210	154,9
K-104	360	160
CAMA 1	510	153
CAMA 2	468	152
CAMA 3	436	151
SEPARADOR PRIMARIO	-17	151
K-103	-14,42	154,9
SEPARADOR SECUNDARIO	-33	154,9
V-102	-13,89	18,63
V-101	38	18,63
X-104	-15,38	140

*Fuente: Elaboración propia*

#### **4.1.1.6. Balance de materia del modelo de producción de amoniaco**

Una vez presentados los equipos principales junto con sus respectivas condiciones de trabajo, el siguiente paso consistirá en exhibir el balance de materia global y por secciones. Esto se llevará a cabo mediante la visualización de las corrientes de entrada y salida de los equipos principales, donde pueden observarse diversas variaciones de materia. Además, se presentará un diagrama de bloques con el balance de materia del proceso.

Fig. 4-9. Diagrama de bloques del balance de materia del proceso de obtención de amoniaco



Fuente: Elaboración propia

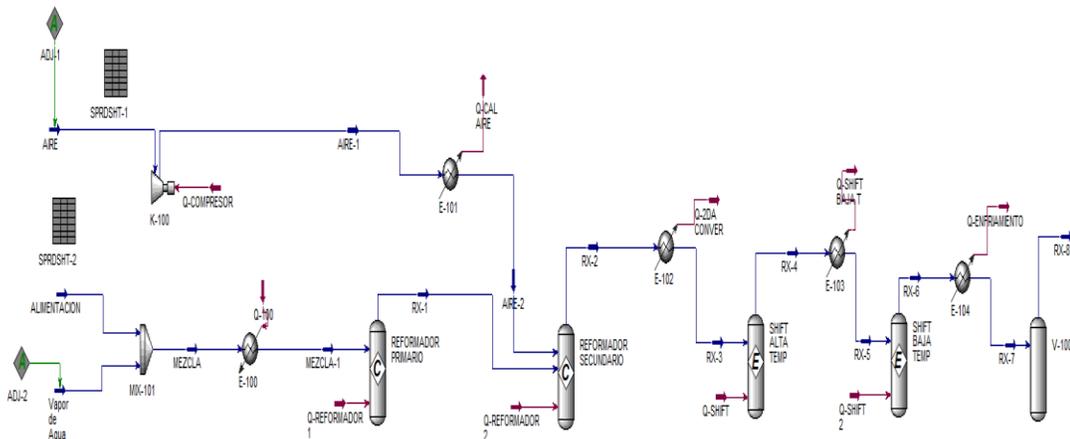
Tabla IV-11. Balance de materia global del proceso de obtención de amoniaco

Balance de materia del proceso global del proceso de obtención de amoniaco			
Entrada		Salida	
Corriente	Flujo másico (Tn/año)	Corriente	Flujo másico (Tn/año)
Alimentación	2,37E+05	CO <sub>2</sub> PURO	2,47E+05
Vapor de Agua	2,99E+05	LIQ AMONIACO	4,33E+05
AIRE	7,89E+05		

Fuente: Elaboración propia

### I. Sección de obtención de los reactores de gas de síntesis de amoniaco

Fig. 4-10. Sección de obtención de los reactores de gas de síntesis de amoniaco en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-12. Balance de materia sección de obtención de gas de síntesis de amoníaco

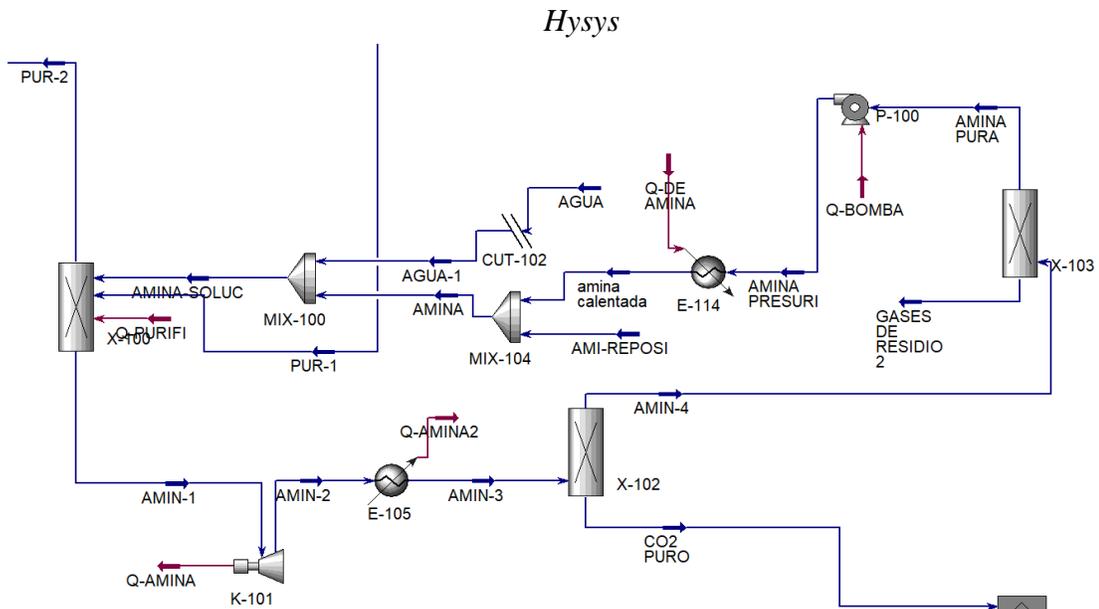
<b>Balance de materia sección de los reactores de obtención de gas de síntesis de amoníaco</b>				
<b>Entrada</b>				
<b>Alimentación</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>	
	Metano	0,923	<b>2,37E+05</b>	
	Agua	0		
	Monóxido de carbono	0		
	Hidrógeno	0,003		
	Dióxido de carbono	0,052		
	Oxígeno	0		
	Nitrógeno	0,022		
	Amoníaco	0		
	<b>Vapor de Agua</b>	<b>Componentes</b>		<b>Fracción másica</b>
Metano		0		<b>2,99E+05</b>
Agua		1		
Monóxido de carbono		0		
Hidrógeno		0		
Dióxido de carbono		0		
Oxígeno		0		
Nitrógeno		0		
Amoníaco		0		

	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
<b>AIRE</b>	Metano	0,408	<b>7,89E+05</b>
	Agua	0,558	
	Monóxido de carbono	0	
	Hidrogeno	0,001	
	Dióxido de carbono	0,023	
	Oxígeno	0	
	Nitrógeno	0,01	
	Amoniaco	0	
	<b>Salida</b>		
	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
<b>RX8</b>	Metano	0,039	<b>1,33E+06</b>
	Agua	0,006	
	Monóxido de carbono	0,174	
	Hidrógeno	0,079	
	Dióxido de carbono	0,237	
	Oxígeno	0,107	
	Nitrógeno	0,359	
	Amoniaco	0	

*Fuente: Elaboración propia*

## II. Sección de purificación del gas de síntesis de amoniaco

Fig. 4-11. Sección de purificación del gas de síntesis de amoniaco en Aspen



Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-13. Balance de materia sección de purificación del gas de síntesis de amoniaco

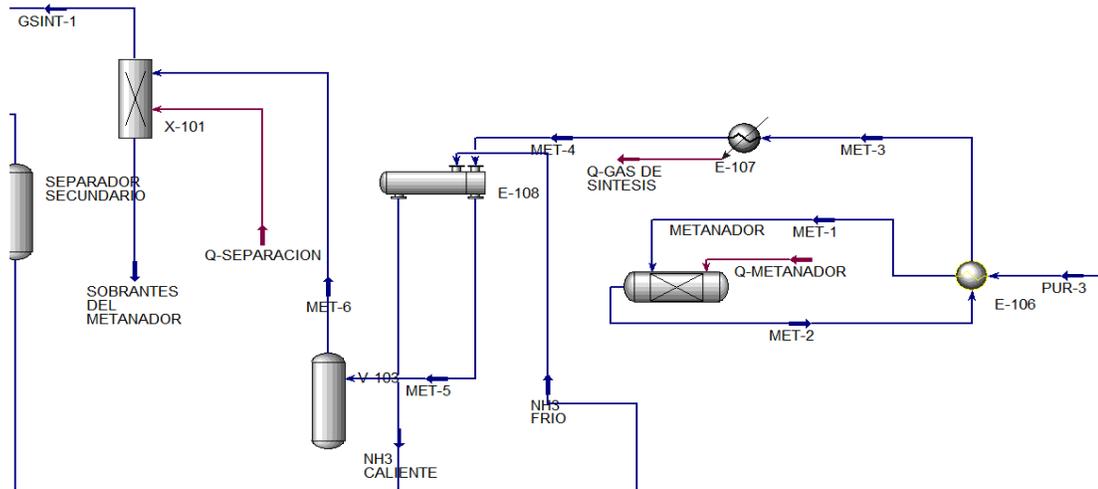
Balance de materia sección de purificación del gas de síntesis de amoniaco			
Entrada			
PUR-1	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Metano	0,039	1,33E+06
	Agua	0,006	
	Monóxido de carbono	0,174	
	Hidrogeno	0,079	
	Dióxido de carbono	0,237	
	Oxígeno	0,107	
	Nitrógeno	0,359	
	Amoniaco	0	
Amina MDEA	0		

<b>AGUA</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Agua	1	2,95E+06
<b>AMINA</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amina MDEA	1	1,30E+07
<b>AMI-REPOSI</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amina MDEA	1	1,30E+06
<b>Salida</b>			
<b>GASES DE RESIDIO 2</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amina MDEA	0,293	4,42E+06
	Agua	0,665	
	Monóxido de carbono	0,0412	
<b>PUR-2</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Dióxido de carbono	0,0004	9,09E+05
	Hidrógeno	0,1364	
	Nitrógeno	0,6115	
	Monóxido de carbono	0,0003	
	Oxígeno	0,1848	
	Metano	0,0667	
<b>CO2 PURO</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Dióxido de carbono	1	2,47E+05

Fuente: Elaboración propia

### III. Sección de metanización

Fig. 4-12. Sección de metanización en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-14. Balance de materia sección de metanización

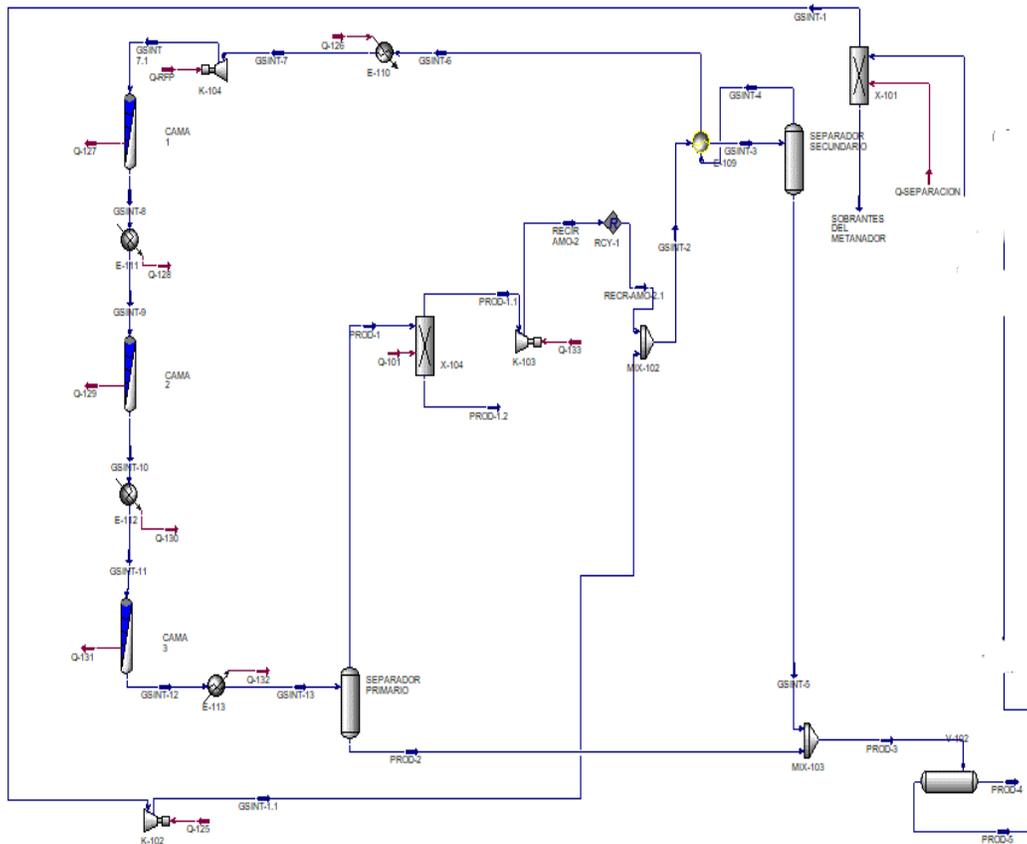
Balance de materia sección de metanización			
Entrada			
	Componentes	fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
PUR-3	Metano	0,0667	9,09E+05
	Monóxido de carbono	0,0003	
	Hidrógeno	0,1364	
	Dióxido de carbono	0,0004	
	Oxígeno	0,1848	
	Nitrógeno	0,6114	
NH3 FRIO	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Hidrógeno	0,0001	4,25E+05
	Amoníaco	0,9999	

Salida			
GSINT-1	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Hidrógeno	0,1823	6,82E+05
	Nitrógeno	0,8177	
NH3 CALIENTE	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Hidrógeno	0,0001	4,25E+05
	Amoniaco	0,9999	

Fuente: Elaboración propia

#### IV. Sección circuito de producción de amoniaco

Fig. 4-13. Sección de circuito de producción de amoniaco en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

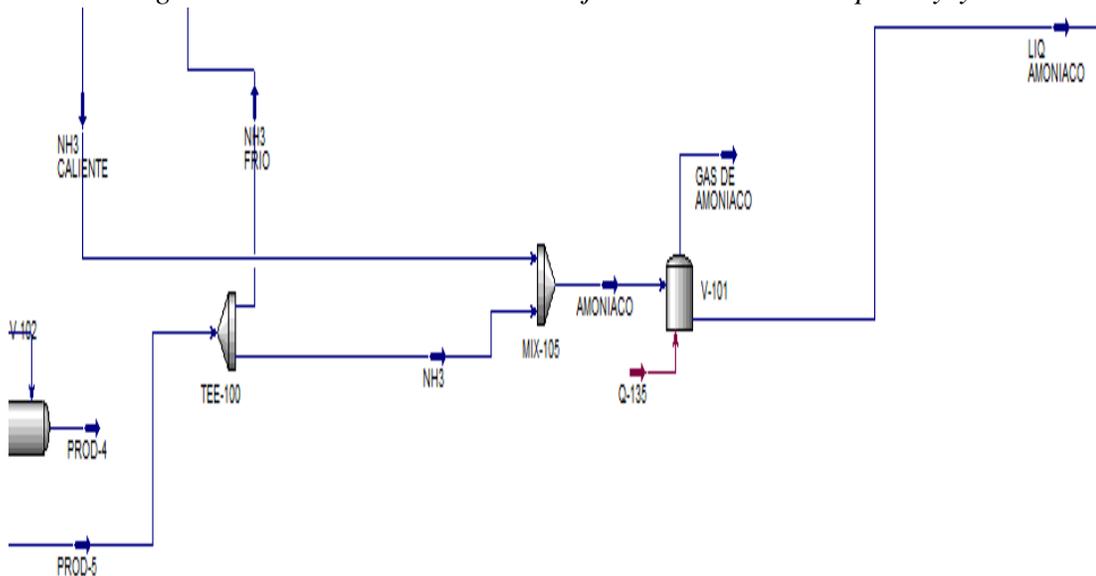
Tabla IV-15. Balance de materia sección circuito de producción de amoniaco

Balance de materia de la sección circuito de producción de amoniaco			
Entrada			
GSINT-1	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Hidrógeno	0,1823	
	Nitrógeno	0,8177	
Salida			
PROD-5	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Amoniaco	0,9999	
	Hidrógeno	0,0001	
PROD-1.2	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Nitrógeno	1	

Fuente: Elaboración propia

## V. Sección de almacenaje de amoniaco

Fig. 4-14. Sección de almacenaje de amoniaco en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-16. Balance de materia sección de almacenaje de amoniaco

<b>Balance de materia de almacenaje de amoniaco</b>			
<b>Entrada</b>			
<b>PROD-5</b>	<b>Componentes</b>	<b>fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amoniaco	0,9999	4,34E+05
	Hidrógeno	0,0001	
<b>NH3 CALIENTE</b>	<b>Componentes</b>	<b>fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Hidrógeno	0,0001	4,25E+05
	Amoniaco	0,9999	
<b>Salida</b>			
<b>NH3 FRIO</b>	<b>Componentes</b>	<b>fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Hidrógeno	0,0001	4,25E+05
	Amoniaco	0,9999	
<b>GAS DE AMONIACO</b>	<b>Componentes</b>	<b>fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amoniaco	0,9723	674,1
	Hidrógeno	0,0272	
<b>LIQ AMONIACO</b>	<b>Componentes</b>	<b>fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amoniaco	0,0001	4,33E+05
	Hidrógeno	0,9999	
<b>PROD-4</b>	<b>Componentes</b>	<b>fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amoniaco	0,5798	3352
	Hidrógeno	0,4108	

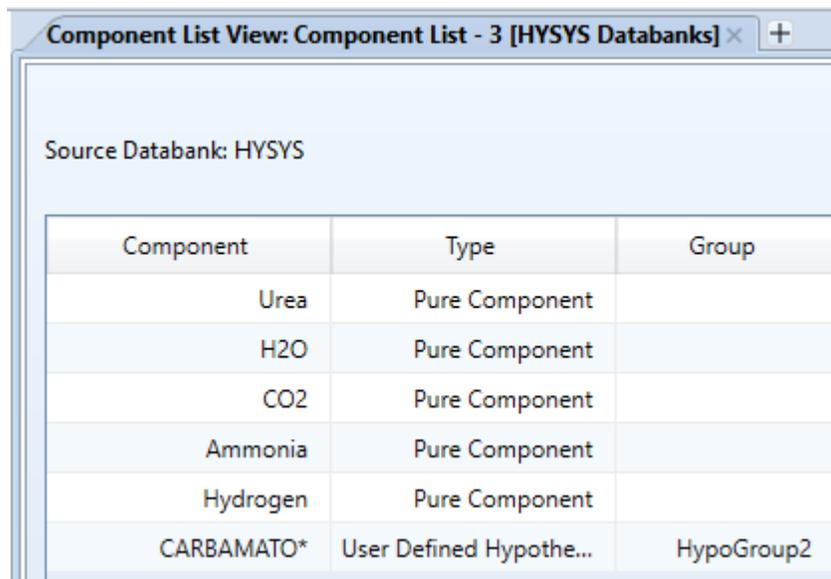
Fuente: Elaboración propia

## 4.1.2. Desarrollo del modelo de producción de urea

### 4.1.2.1. Componentes para la simulación de producción de amoniaco

Para la simulación de la obtención de urea, se procedió a generar una tercera lista de componentes. Este paso se llevó a cabo con el propósito de emplear un paquete termodinámico adicional que se adaptará de manera más óptima a los componentes subsiguientes incluidos en el análisis.

Fig. 4-15. Lista de componentes tres para la producción de urea



The screenshot shows a window titled "Component List View: Component List - 3 [HYSYS Databanks]". Below the title bar, it indicates "Source Databank: HYSYS". A table lists the components with their types and groups.

Component	Type	Group
Urea	Pure Component	
H2O	Pure Component	
CO2	Pure Component	
Ammonia	Pure Component	
Hydrogen	Pure Component	
CARBAMATO*	User Defined Hypothe...	HypoGroup2

Fuente: Elaboración propia

Aquí se debe mencionar la construcción de la molécula de carbamato, la cual fue explicada a fondo en el punto "3.2.2. Construcción del compuesto hipotético carbamato de amonio".

Fig. 4-16. Construcción de la molécula carbamato de amonio con la estructura

**UNIFAC**

Sub Group	How Many
124	1
27	1
15	1
124	1
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0
0	0

Sub Group	Bonds	Example Component
1 CH3	1	2,2,4-Trimethylpentane
2 CH2	2	2,2,4-Trimethylpentane
3 CH	3	2,2,4-Trimethylpentane
4 C	4	2,2,4-Trimethylpentane
5 CH2=CH	1	3-Methyl-1-Hexene
6 CH=CH	2	3-Methyl-1-Hexene
7 CH2=C	2	3-Methyl-1-Hexene
8 CH=C	3	3-Methyl-1-Hexene
9 C=C	4	3-Methyl-1-Hexene
10 ACH	3	Benzene
11 AC	4	Benzene
12 ACCH3	3	Xylene
13 ACCH2	4	Xylene
14 ACCH	5	Xylene

UNIFAC Calculated Base Properties	
Molecular Weight	78,07
UNIQUAC R	3,0804
UNIQUAC Q	3,0600

UNIFAC Calculated Critical Properties	
Temperature [C]	956,40
Pressure [kPa]	8014,82
Volume [m3/kgmole]	0,1805

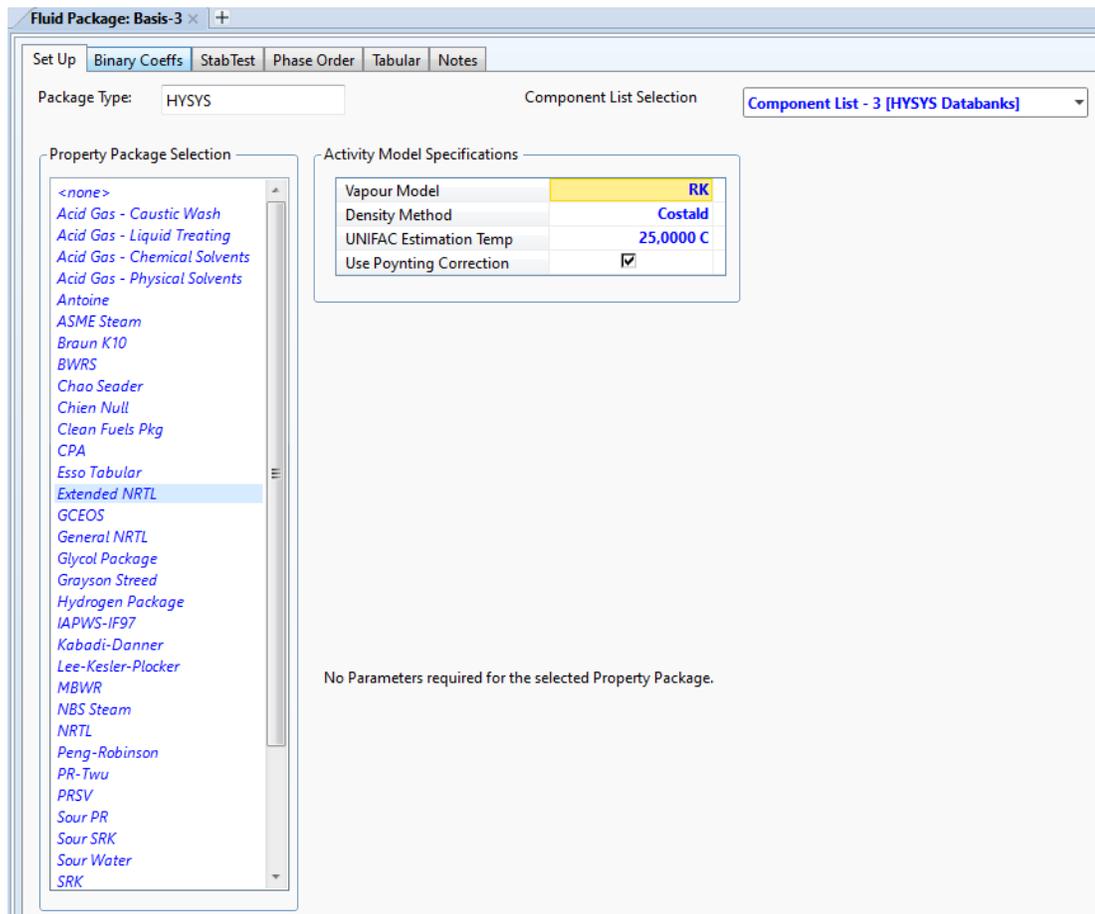
Fuente: Elaboración propia

Ahora también se mencionará al compuesto **Biuret**, un tipo de compuesto indeseado, bastante tóxico para las plantas. Se forma por la unión de dos moléculas de urea, liberando una de amoníaco. En este caso, no se está tomando en cuenta este compuesto, que debería ser hipotético, debido a la recomendación de bibliografía. La producción de **Biuret** es tan baja o prácticamente nula que no tendría sentido considerarla. Además, el proceso de **Thermo-Urea**, con los mismos equipos y condiciones de trabajo, ya garantiza que no se forme este compuesto indeseado. Es por eso que, para la simulación de producción de urea de este trabajo, no se creará la molécula hipotética **Biuret**.

#### 4.1.2.2. Paquete termodinámico para la simulación de obtención de Urea

En este apartado se, selecciona el paquete termodinámico para la simulación de obtención de urea. Esta elección se basó en el análisis realizado en el punto "3.2.3. Selección del modelo termodinámico para el proceso de obtención de Urea". El paquete termodinámico escogido fue **Electrolyte NRTL (GMENRTL)**.

Fig. 4-17. Selección del modelo termodinámico numero 3



Fuente: Elaboración propia

#### 4.1.2.3. Reacciones químicas en la simulación de obtención de Urea

Las reacciones químicas que se incluyen en la simulación son las mostradas y explicadas en el punto “1.4.5. Equipos que intervienen en la producción de Urea”.

Estas reacciones son las siguientes:

Fig. 4-18. Reacciones de la simulación de producción de urea

CARBAMATO-2	Conversion	Basis-3
UREA	Conversion	Basis-3
CARBAMATO-3	Conversion	Basis-3
UR-CAR	Conversion	Basis-3

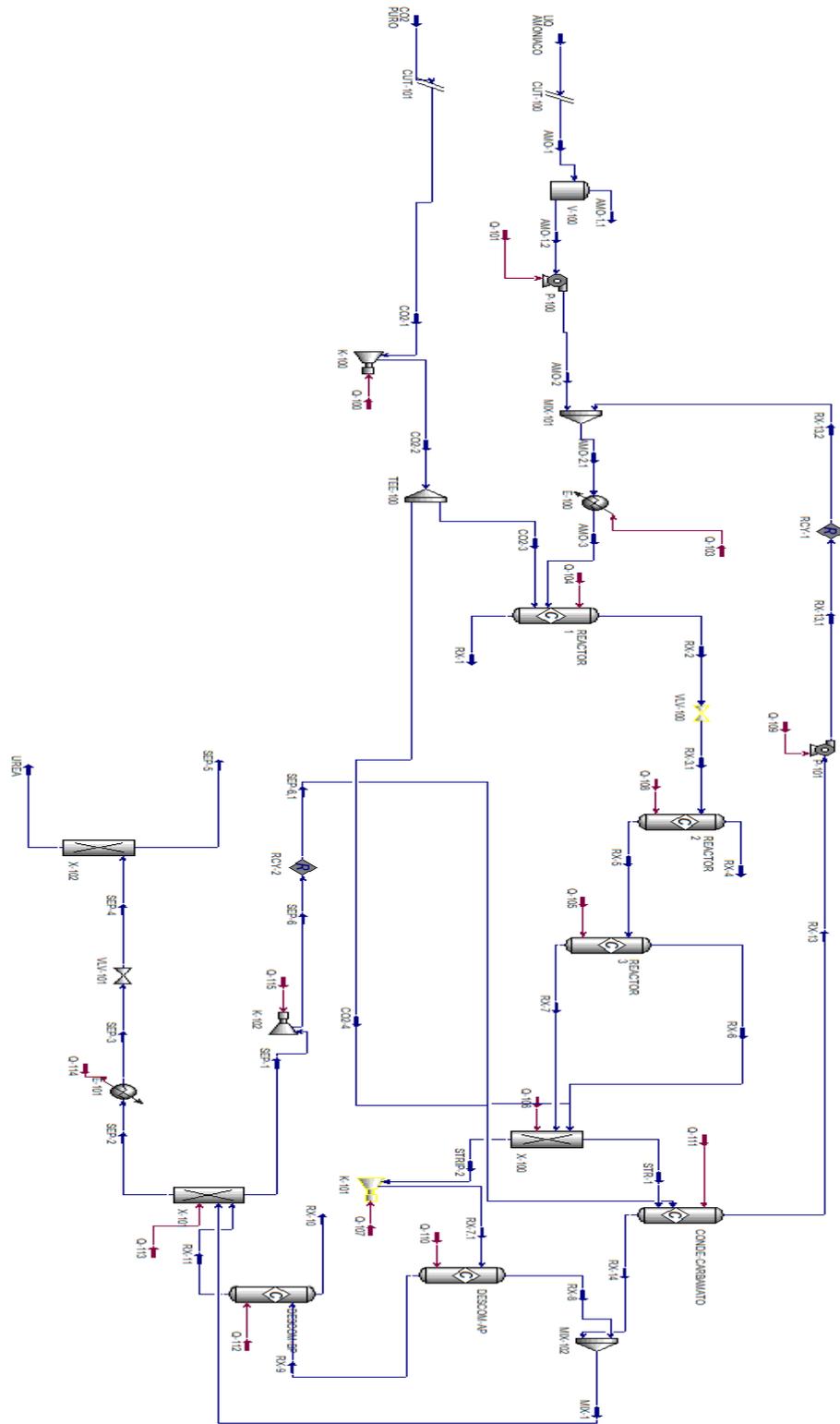
Fuente: Elaboración propia

Se utilizaron reactores de conversión tanto para las reacciones de obtención de carbamato de amonio como para su reacción inversa, así como para la reacción de deshidratación del carbamato de amonio para la obtención de urea. Esto se debe a que no se poseen los datos cinéticos de la reacción, por ser una tecnología bastante difícil de obtener. Sin embargo, a través de la bibliografía, se conocen los porcentajes de conversión de cada reacción, lo cual es suficiente para este trabajo.

#### **4.1.2.4. Construcción del proceso de obtención de urea en Aspen Hysys**

Con todos los datos recopilados de la bibliografía, se prosigue a construir todo el proceso en Aspen Hysys. La siguiente figura muestra cómo quedó el diagrama de flujo dentro del simulador.

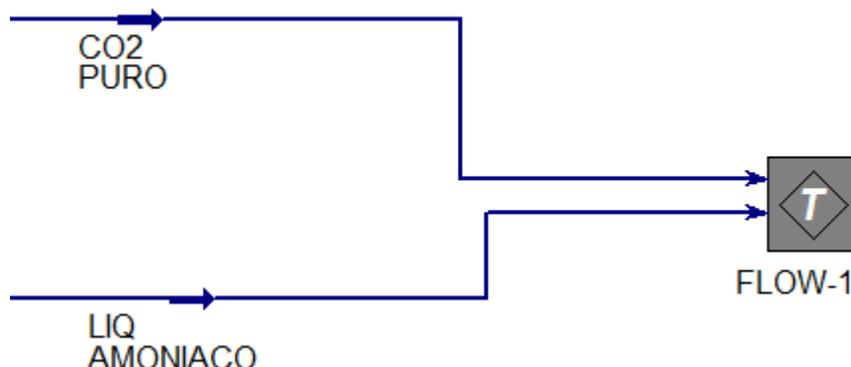
Fig. 4-19. Simulación de la producción de urea en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Se debe mencionar que para este proceso se utiliza un Sub-Flowsheet. Esto nos permitió llevar el proceso de obtención de urea a un nuevo entorno, separado del proceso de obtención de amoniaco. De esta manera, solo se visualiza el proceso de obtención de urea, lo que facilita su comprensión visual.

Fig. 4-20. Sub-Flowsheet



Fuente: Elaboración propia

Las corrientes “LIQ AMONIACO” y “CO2PURO”, son las obtenidos del proceso de obtención de amoniaco.

Los equipos utilizados en la simulación del proceso de obtención de urea junto al Tag/nombre se muestran en las siguientes tablas.

Tabla IV-17. Equipos involucrados en la simulación de la sección de compresión de CO<sub>2</sub> y bombeo de amoniaco

PRODUCCIÓN DE UREA		
Sección	Equipo	Tag/Nombre
Compresión de CO <sub>2</sub> y bombeo de amoniaco	Bomba	P-100
	Compresor	K-100
	Manipuladores	CUT-100 CUT-101

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-18. Equipos involucrados en la simulación de la sección Reactor de carbamato, reactor de urea y reactor de descomposición de carbamato

PRODUCCIÓN DE UREA		
Sección	Equipo	Tag/Nombre
Reactor de carbamato	Mezclador	MIX-101
	Separador de corrientes	TEE-100
	Calentador	E-100
	Reactor de conversión	REACTOR 1
Reactor de urea	Bomba	P-102
	Reactor de conversión	REACTOR 2
Reactor de descomposición de carbamato	Reactor de conversión	REACTOR 3

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-19. Equipos involucrados en la simulación de la sección absorbedor de carbamato, descomponedor de carbamato de alta-baja presión y condensador de carbamato-recirculación

PRODUCCIÓN DE UREA		
Sección	Equipo	Tag/Nombre
Absorbedor de carbamato	Absorbedor	X-100
	Manipuladores	ADJ-2
Descomponedor de carbamato de alta y baja presión	Reactor de conversión	DESCOM-AP DESCOM-BJ
	Mezclador	MIX-102

<b>Condensador de carbamato y recirculación</b>	Reactor de conversión	CONDE-CARBAMATO
	Bomba	P-101
	Manipuladores	RCY-1

*Fuente: Elaboración propia*

*Tabla IV-20. Equipos involucrados en la simulación de la sección concentrador y evaporador de vacío*

<b>PRODUCCIÓN DE UREA</b>		
<b>Sección</b>	<b>Equipo</b>	<b>Tag/Nombre</b>
<b>Concentrador y evaporador de vacío</b>	Concentrador	CONCENTRADOR
	Separador al vacío	EVAPORADOR DE VACIO
	Compresor	K-102
	Calentador	E-101
	Válvula	VLV-101
	Manipulador	RCY-2 ADJ-1

*Fuente: Elaboración propia*

#### **4.1.2.5. Base de diseño de la simulación de producción de urea**

En este punto se mostrará a través de las siguientes tablas, cuáles son las condiciones de trabajo de los equipos involucrados (Temperatura, presión y caudales), todos estos datos se basan en lo mostrado en el punto **“1.4.5. Equipos que intervienen en la producción de urea”**.

Tabla IV-21. Condiciones de trabajo del flujo másico del amoniaco y amoniaco

Alimentación de amoniaco (AMO-1)				
Compuestos	Fracción másica	Flujo masico total (tonelada/año)	Presión (Bar)	Temperatura (°C)
Amoniaco	1	4,33E+05	18,63	38
Alimentación de dióxido de carbono (CO2-1)				
Dióxido de carbono	1	2,65E+05	7,355	50

Fuente: Elaboración propia

Las dos corrientes mostradas se presentan detalladamente debido a su origen en el proceso de obtención de amoniaco, siendo esenciales para iniciar la producción del producto principal de la planta, la urea.

Ahora se procederá a detallar las condiciones de trabajo de los equipos implicados en el proceso, identificándolos con sus respectivos TAG/nombres dentro de la simulación (E=entrada, S=salida).

Tabla IV-22. Condiciones de trabajo de los reactores de obtención de urea

Condiciones de trabajo del reactor de obtención de Urea		
Equipo TAG/NOMBRE	Temperatura (°C)	Presión (Bar)
<b>REACTOR 1</b>	E=138	E=196,1
	S=200	S=152
<b>REACTOR 2</b>	E=200	E=196,1
	S=188	S=156,9
<b>REACTOR 3</b>	E=188	E=156,9
	S=138	S=156,9

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-23. Condiciones de trabajo del absorbedor de carbamato

<b>Condiciones de trabajo del absorbedor de carbamato</b>		
<b>Equipo TAG/NOMBRE</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (Bar)</b>
X-100	E=138	E=156,9
	S=153	S=16,8

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-24. Condiciones de trabajo del reactor de condensación de carbamato

<b>Condiciones de trabajo del reactor de condensación de carbamato</b>		
<b>Equipo TAG/NOMBRE</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (Bar)</b>
CONDE-CARBAMATO	E=153	16
	S=138	

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-25. Condiciones de trabajo del descomponedor de carbamato de alta y baja presión

<b>Condiciones de trabajo del descomponedor de carbamato de alta y baja presión</b>		
<b>Equipo TAG/NOMBRE</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (Bar)</b>
DESCOM-AP	E=153	16,18
	S=152	
DESCOM-BJ	E=152	E=16,18
	S=100	E=2,452

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-26. Condiciones de trabajo del concentrador de urea y evaporador de vacío

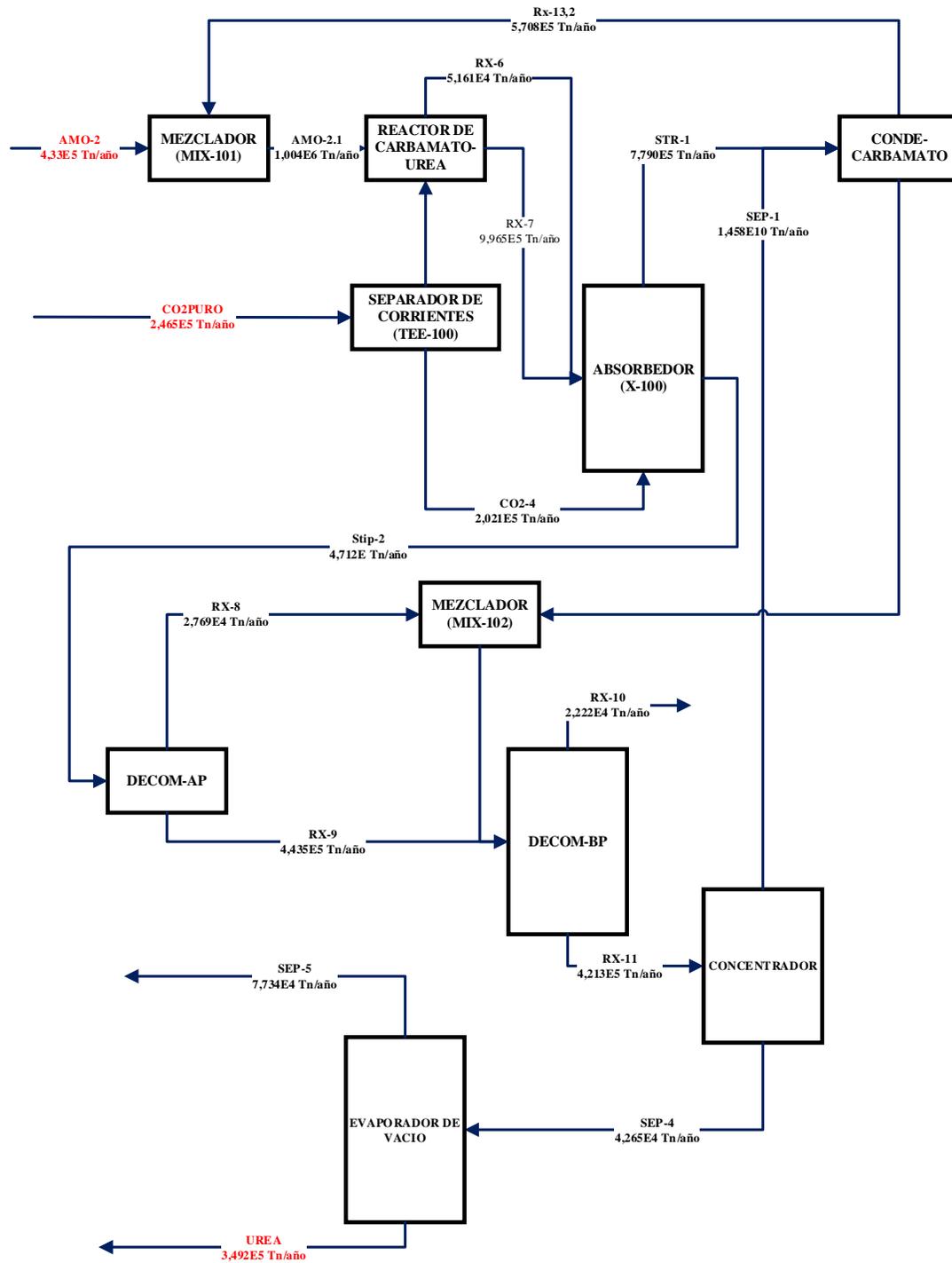
Condiciones de trabajo del concentrador de urea y evaporador de vacío		
Equipo TAG/NOMBRE	Temperatura (°C)	Presión (Bar)
CONCENTRADOR	100	0,57
EVAPORADOR DE VACIO	E=131,9	0,33
	S=71,31	

Fuente: Elaboración propia

#### 4.1.2.6. Balance de materia del modelo de producción de urea

Una vez presentados los equipos principales junto con sus respectivas condiciones de trabajo, el siguiente paso consistirá en exhibir el balance de materia global y por secciones. Esto se llevará a cabo mediante la visualización de las corrientes de entrada y salida de los equipos principales, donde pueden observarse diversas variaciones de materia.

Fig. 4-21. Diagrama de bloques del balance de materia del proceso de obtención de urea



Fuente: Elaboración propia

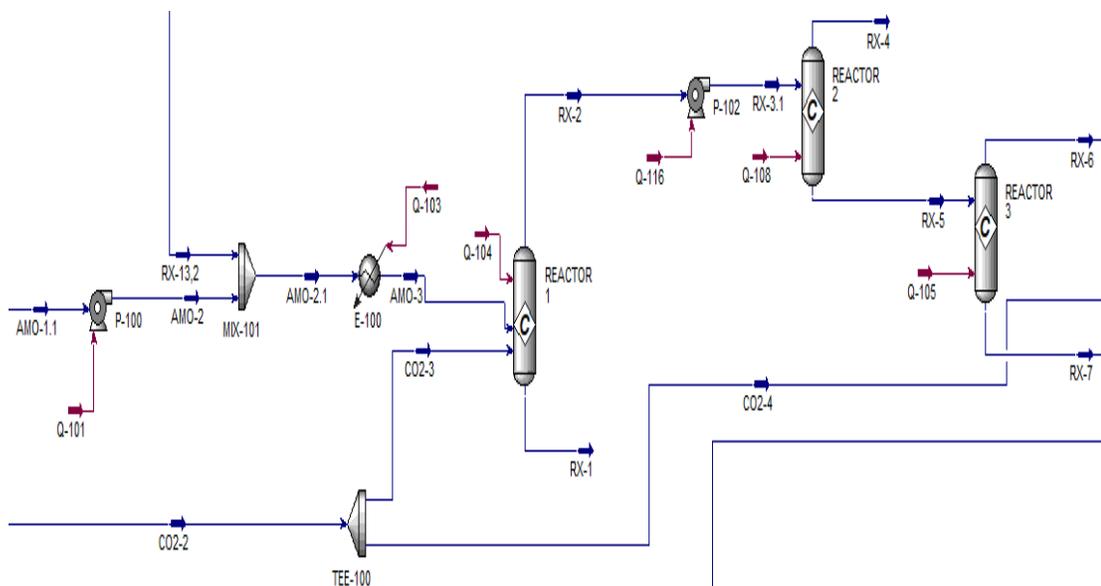
Tabla IV-27. Balance de materia global del proceso de obtención de urea

Balance de materia global del proceso de obtención de urea			
Entrada		Salida	
Corriente	Flujo másico (Tn/año)	Corriente	Flujo másico (Tn/año)
AMO-1.1	4,33E+05	UREA	3,49E+05
CO2-1	2,46E+05	SEP-5	7,73E+04

Fuente: Elaboración propia

### I. Sección reactores de carbamato y urea

Fig. 4-22. Sección de reactores de carbamato y urea en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

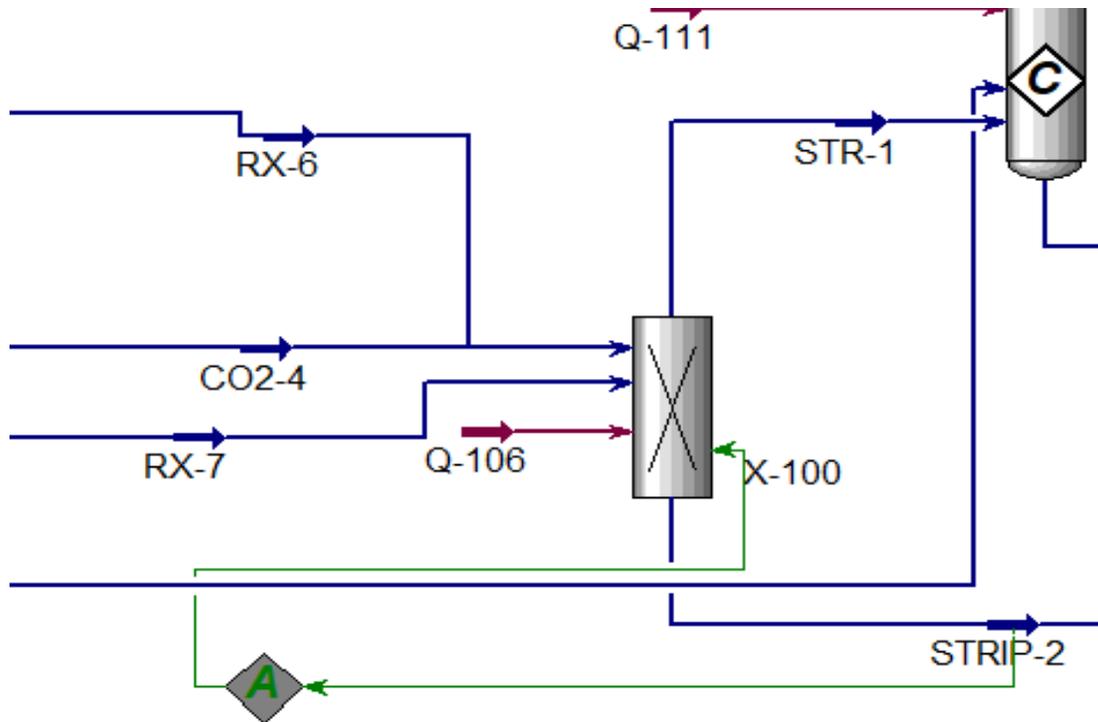
Tabla IV-28. Balance de materia sección de reactores de carbamato y urea

<b>Balance de materia sección de reactores de carbamato y urea</b>			
<b>Entrada</b>			
<b>AMO-1.1</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amoniaco	1	<b>4,52E+05</b>
<b>RX-13.2</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Amoniaco	0,06	<b>5,75E+05</b>
	Carbamato	0,94	
<b>CO2-3</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Dióxido de carbono	1	<b>4,49E+04</b>
<b>Salida</b>			
<b>RX-6</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Urea	0	<b>5,72E+04</b>
	Agua	0,012	
	Dióxido de carbono	0,411	
	Amoniaco	0,577	
	Hidrógeno	0	
	Carbamato	0	
<b>RX-7</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	
	Urea	0,328	<b>1,02E+06</b>

Fuente: Elaboración propia

## II. Sección absorbedor de carbamato

Fig. 4-23. Sección de absorbedor de carbamato en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-29. Balance de materia sección de absorbedor de carbamato

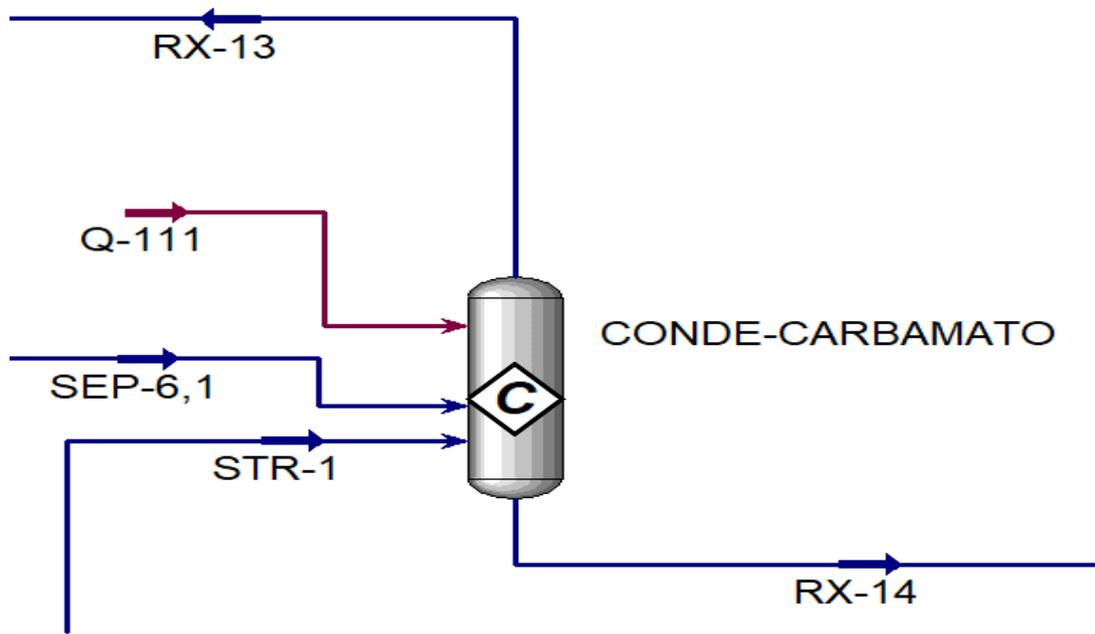
Balance de materia sección absorbedor de carbamato			
Entrada			
	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
RX-6	Urea	0	5,16E+04
	Agua	0,012	
	Dióxido de carbono	0,411	
	Amoniaco	0,577	
	Hidrógeno	0	
	Carbamato	0	

<b>RX-7</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Urea	0,328	<b>9,96E+06</b>
	Agua	0,098	
	Dióxido de carbono	0,046	
	Amoniaco	0,465	
	Hidrógeno	0	
	Carbamato	0,064	
<b>CO2-4</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	
	Dióxido de carbono	1	2,02E+05
<b>Salida</b>			
<b>STR-1</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
	Dióxido de carbono	0,3473	<b>7,79E+05</b>
	Amoniaco	0,578	
	Hidrógeno	0,0001	
	Carbamato	0,0746	
<b>STRIP-2</b>	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	
<b>STRIP-2</b>	Urea	0,6801	<b>4,71E+05</b>
	Agua	0,204	
	Amoniaco	0,1027	
	Carbamato	0,0133	

*Fuente: Elaboración propia*

### III. Sección condensador de carbamato

Fig. 4-24. Sección condensador de carbamato en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-30. Balance de materia sección condensador de carbamato

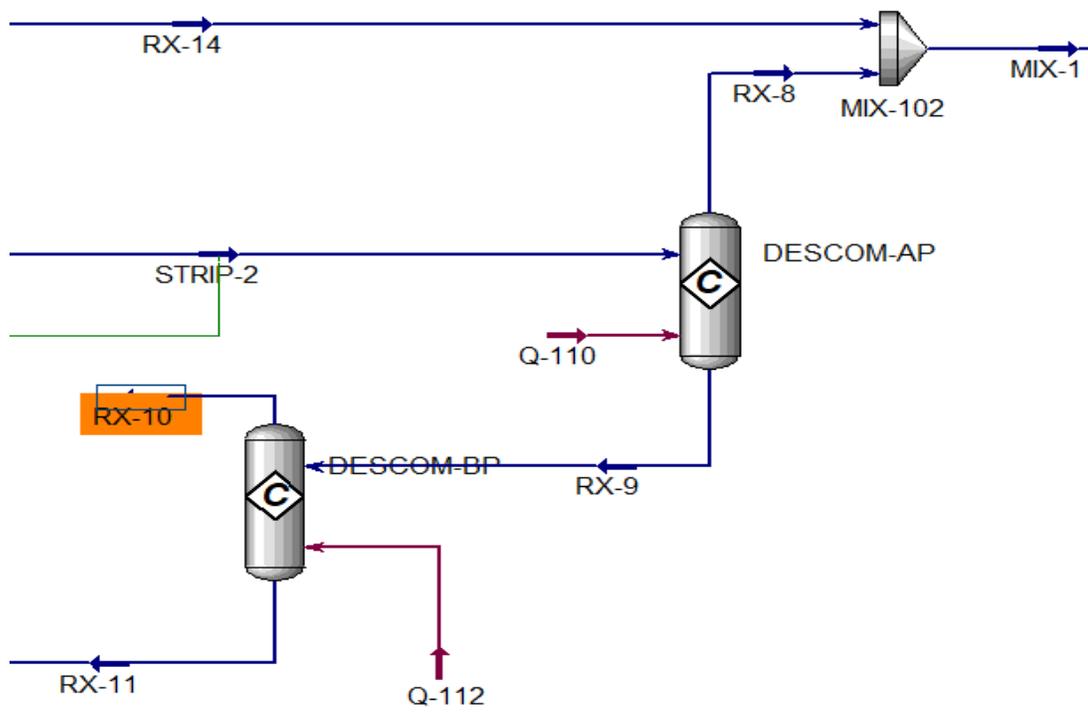
Balance de materia sección condensador de carbamato			
Entrada			
	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
STR-1	Dióxido de carbono	0,3473	7,79E+05
	Amoniaco	0,578	
	Carbamato	0,0746	
SEP-6.1	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Amoniaco	0,9948	1,46E+10
	Hidrógeno	0,0052	

Salida			
	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
RX-13	Amoniaco	0,0597	5,71E+05
	Carbamato	0,9403	
RX-14	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
	Amoniaco	0,9948	1,49E+10
Hidrógeno	0,0052		

Fuente: Elaboración propia

#### IV. Sección descomponedor de carbamato de alta y baja presión

Fig. 4-25. Sección descomponedor de carbamato de alta y baja presión en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

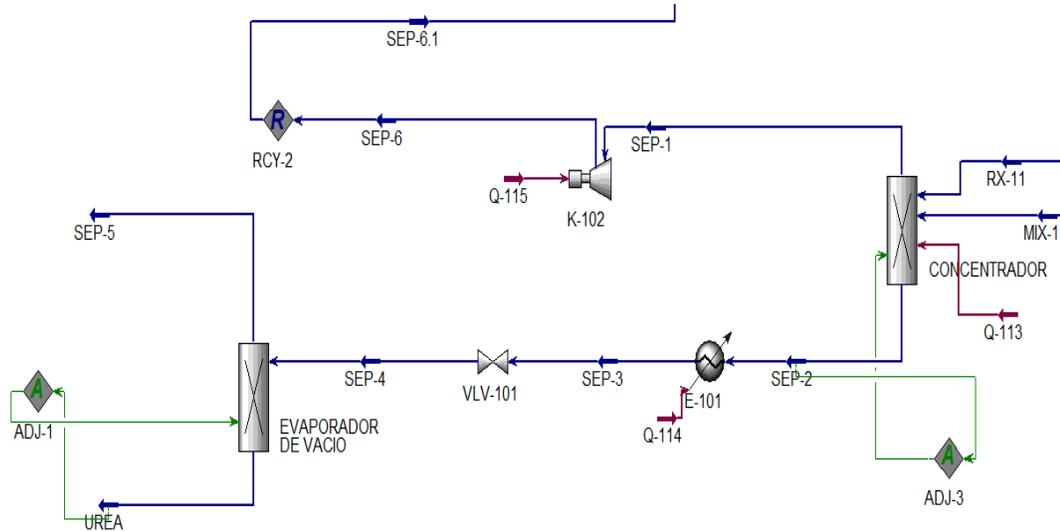
Tabla IV-31. Balance de materia sección descomponedor de carbamato de alta y baja presión

<b>Balance de materia sección descomponedor de alta y baja presión</b>			
<b>Entrada</b>			
	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
<b>STRIP-2</b>	Urea	0,6801	4,71E+05
	Agua	0,204	
	Amoniaco	0,1027	
	Carbamato	0,0133	
	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
<b>RX-14</b>	Amoniaco	0,9948	1,46E+10
	Hidrógeno	0,0052	
<b>Salida</b>			
	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
<b>RX-10</b>	Agua	0,4167	2,22E+04
	Dióxido de carbono	0,004	
	Amoniaco	0,5793	
	<b>Componentes</b>	<b>Fracción másica</b>	<b>Flujo másico (Tn/año)</b>
<b>RX-11</b>	Urea	0,8084	4,21E+05
	Agua	0,1856	
	Amoniaco	0,0059	
	Carbamato	0,0002	

Fuente: Elaboración propia

## V. Sección de concentrador y evaporador al vacío de urea

Fig. 4-26. Sección de concentrador y evaporador al vacío de urea en Aspen



Hysys

Fuente: Elaboración propia

Tabla IV-32. Balance de materia sección de concentrador y evaporador al vacío de urea

Balance de materia sección concentrador y evaporador al vacío			
Entrada			
	Componentes	Fracción másica	Flujo masico (Tn/año)
RX-11	Urea	0,8084	4,21E+05
	Agua	0,1856	
	Amoniaco	0,0059	
	Carbamato	0,0002	
	Componentes	Fracción másica	Flujo másico (Tn/año)
MIX-1	Amoniaco	0,9948	1,46E+10
	Hidrógeno	0,0052	

Fuente: Elaboración propia

**CAPÍTULO V**  
**EVALUACIÓN DE LOS RESULTADOS**

## 5.1. Validación del modelo de simulación

### 5.1.1. Validación del modelo de simulación de obtención de amoniaco

Para validar el modelo de simulación, se comparan los valores porcentuales molares/másicos obtenidos en la simulación a la salida de cada reactor con los datos de campo de la planta "PAU". Esta comparación permitirá determinar la validez de la simulación.

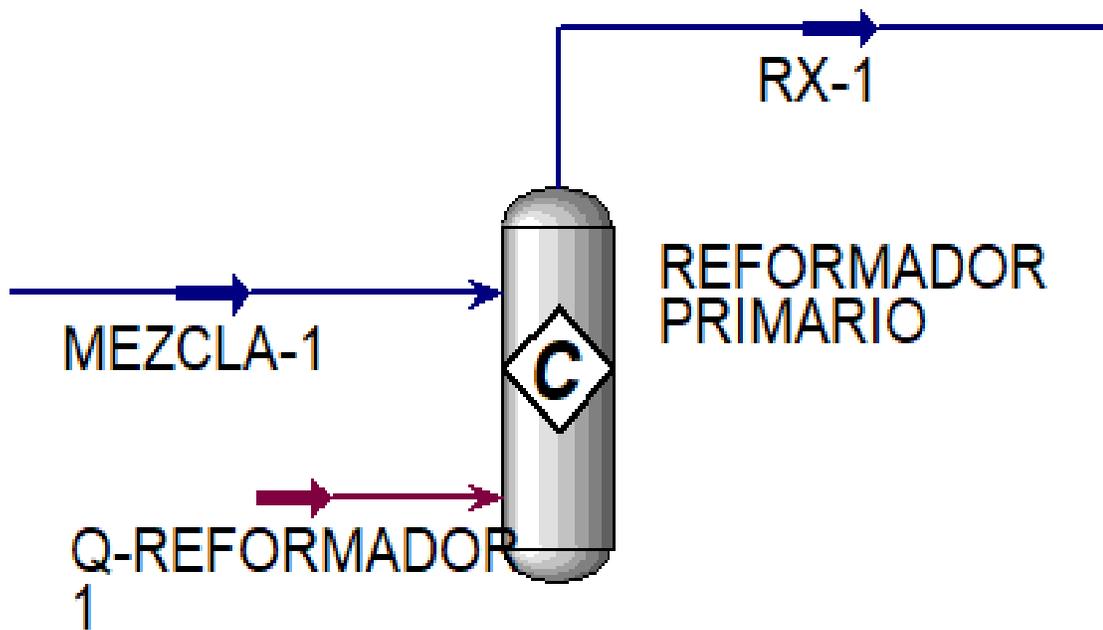
#### 5.1.1.1. Validación del reformador primario

*Tabla V-1. Validación reformador primario*

	<b>Composición de entrada del gas del reformador primario PAU</b>	<b>Composición de entrada del gas del reformador primario en Hysys (MEZCLA-1)</b>	<b>Diferencia</b>
<b>%H<sub>2</sub></b>	1,95	1,95	0
<b>%N<sub>2</sub></b>	1,22	1,22	0
<b>%CH<sub>4</sub></b>	88,56	88,56	0
<b>%CO</b>	0	0	0
<b>%CO<sub>2</sub></b>	1,81	1,81	0
	<b>Composición de salida del gas del reformador primario PAU</b>	<b>Composición de salida del gas del reformador primario en Hysys (RX-1)</b>	<b>Diferencia</b>
<b>%H<sub>2</sub></b>	54,22	55,07508346	0,855083464
<b>%N<sub>2</sub></b>	0,54	0,598344958	0,058344958
<b>%CH<sub>4</sub></b>	29,22	28,84014852	0,379851485
<b>%CO</b>	4,52	4,256527943	0,263472057
<b>%CO<sub>2</sub></b>	11,44	11,22989512	0,210104881

*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-1. Reformador primario simulado en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

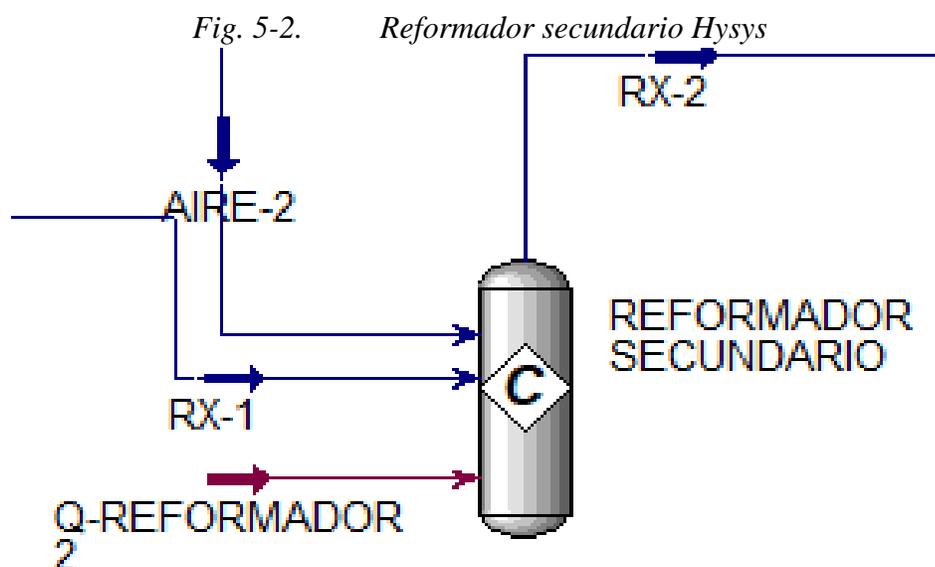
Como se puede observar en la tabla, los valores obtenidos de la simulación a la salida son prácticamente idénticos a los datos de campo. La diferencia entre los valores oscila entre 0.2 y 0.8. Esta discrepancia puede atribuirse a la imposibilidad de utilizar un reactor cinético debido a la falta de datos cinéticos. Sin embargo, los resultados sugieren que el uso de un reactor de conversión es suficiente para obtener valores precisos.

### 5.1.1.2. Validación del Reformador secundario

Tabla V-2. Validación reformador secundario

	Composición de entrada del gas del reformador secundario PAU	Composición de entrada del gas del reformador secundario en Hysys (RX-1)	Diferencia
%H <sub>2</sub>	54,22	55,07508346	0,8550835
%N <sub>2</sub>	0,54	0,598344958	0,058345
%CH <sub>4</sub>	29,22	28,84014852	0,3798515
%CO	4,52	4,256527943	0,2634721
%CO <sub>2</sub>	11,44	11,22989512	0,2101049
	Composición de salida del gas del reformador secundario PAU	Composición de salida del gas del reformador secundario en Hysys (RX-2)	Diferencia
%H <sub>2</sub>	48,87	51,62353157	2,7535316
%N <sub>2</sub>	29,64	29,5284106	-0,111589
%CH <sub>4</sub>	1,75	3,67892734	-1,928927
%CO	11,29	7,941459619	3,3485404
%CO <sub>2</sub>	8,25	7,227670864	1,0223291

Elaboración propia



Fuente: Elaboración propia

El caso del reformador secundario es similar al del reformador primario, donde las discrepancias más significativas pueden observarse en la concentración de monóxido de carbono, aunque la diferencia es del 3.34%, lo cual puede atribuirse al uso de reactores catalíticos en la planta, los cuales mejoran la producción de monóxido de carbono. En contraste, en nuestra simulación solo utilizamos un reactor de conversión, lo que puede explicar esta discrepancia entre los datos simulados y los datos de campo. Por otro lado, la concentración de otros compuestos es bastante similar entre la simulación y los datos de campo.

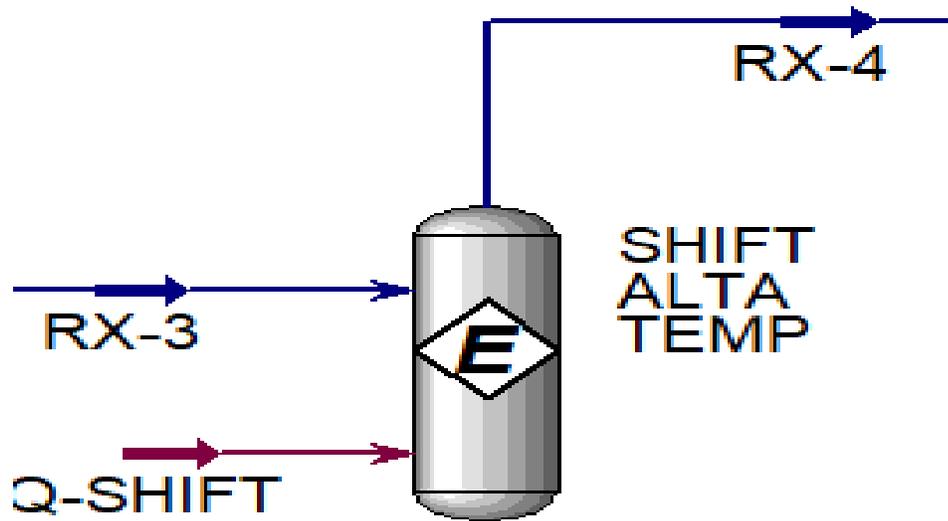
### 5.1.1.3. Validación del Reactor Shift alta temperatura

Tabla V-3. Validación del reactor shift alta temperatura

	Composición de entrada del gas del shift de alta temperatura PAU	Composición de entrada del gas del shift de alta temperatura Hysys (RX-3)	Diferencia
%H <sub>2</sub>	48,87	51,62353157	2,7535316
%N <sub>2</sub>	29,64	29,5284106	-0,111589
%CH <sub>4</sub>	1,75	3,67892734	-1,928927
%CO	11,29	7,941459619	3,3485404
%CO <sub>2</sub>	8,25	7,227670864	1,0223291
	Composición de salida del gas del shift de alta temperatura PAU	Composición de salida del gas del shift de alta temperatura Hysys (RX-4)	Diferencia
%H <sub>2</sub>	52	50,2670007	-1,732999
%N <sub>2</sub>	27	30,35641928	3,3564193
%CH <sub>4</sub>	2	3,782088454	-1,782088
%CO	3	10,96825789	-7,968258
%CO <sub>2</sub>	15	4,626233677	10,373766

Elaboración propia

Fig. 5-3. Reactor shift de alta temperatura simulado en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Al analizar este reactor, se evidencia una discrepancia notable. En primer lugar, para simularlo, se utiliza un reactor de equilibrio con datos almacenados en las librerías de Aspen Hysys. Sin embargo, al variar la temperatura, se observa que esta reacción se beneficia al trabajar a temperaturas menores a  $300^{\circ}\text{C}$ . En contraste, en la PAU, se aprovecha mejor la energía desprendida de los reformadores al aumentar la temperatura de trabajo de los reactores shift. Además, mediante el uso de un catalizador, se logra que la reacción ocurra a temperaturas incluso más altas que  $300^{\circ}\text{C}$ , con un porcentaje de conversión mucho más elevado que sin el uso del catalizador y a temperaturas altas.

Por otra parte, los datos porcentuales de los demás compuestos están bastante cercanos a los valores reales de la planta. Los valores de nitrógeno e hidrógeno se encuentran dentro de los datos de concentración, lo que no afecta significativamente a la producción real de amoníaco. Además, con la ayuda del reformador shift de baja temperatura, se completa la producción del dióxido de carbono faltante, lo que también contribuye a que la producción de urea sea bastante similar a la de la planta PAU.

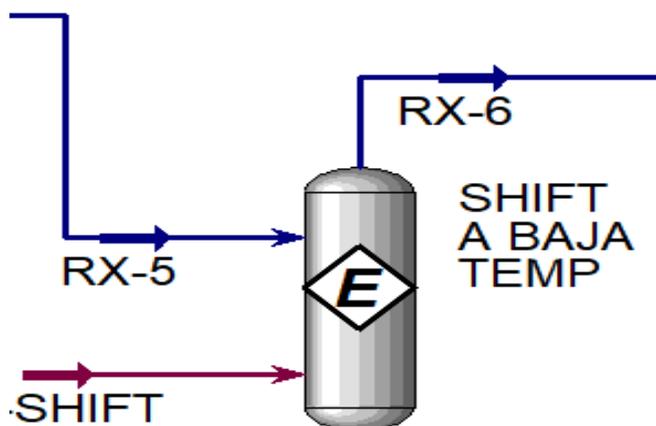
### 5.1.1.3. Validación del reactor shift baja temperatura

Tabla V-4. Validación del reactor shift baja temperatura

	Composición de entrada del gas del shift de baja temperatura PAU	Composición de entrada del gas del shift de baja temperatura Hysys (RX-5)	Diferencia
%H <sub>2</sub>	52,46	50,2670007	-2,192999
%N <sub>2</sub>	27,46	30,35641928	2,8964193
%CH <sub>4</sub>	1,62	3,782088454	-2,162088
%CO	3,11	10,96825789	-7,858258
%CO <sub>2</sub>	15	4,626233677	10,373766
	Composición de salida del gas del shift de baja temperatura PAU	Composición de salida del gas del shift de baja temperatura Hysys (RX-6)	Diferencia
%H <sub>2</sub>	53,76	51,8008742	-1,959126
%N <sub>2</sub>	26,71	29,42011475	2,7101147
%CH <sub>4</sub>	1,57	3,665434823	-2,095435
%CO	0,29	7,545673504	-7,255674
%CO <sub>2</sub>	17,32	7,567902724	9,7520973

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-4. Reactor shift de baja temperatura simulado en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

El caso del reactor shift de baja temperatura es análogo al de alta temperatura. Sin embargo, se presentan discrepancias en algunos datos de salida debido al uso de catalizadores en la planta PAU, los cuales mejoran los porcentajes de conversión a esas temperaturas de trabajo específica.

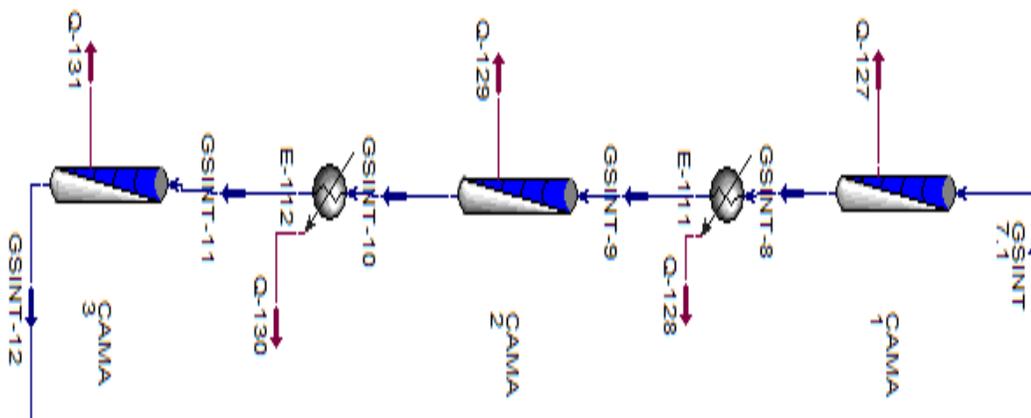
#### 5.1.1.4. Validación del reactor flujo pistón

Tabla V-5. Validación del reactor flujo pistón

	Contenido de amoniaco en la planta PAU (molar)	Contenido de amoniaco en Hysys (molar)	Diferencia
<b>Cama 1</b>	10,7%	18,6%	7,9%
<b>Cama 2</b>	16,1%	19,6%	3,5%
<b>Cama 3</b>	19,9%	20,3%	0,4%

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-5. Reactor flujo pistón simulado en Aspen Hysys



Fuente: Elaboración propia

Para concluir el análisis de validación del proceso de obtención de amoniaco en Aspen Hysy, se comparan los datos obtenidos en los tres reactores de flujo pistón utilizados. En la planta PAU, se emplea un solo reactor de flujo pistón que contiene tres "camas", denominadas así por tener tres zonas con condiciones termodinámicas distintas. Esto implica el uso de valores de presión y temperatura diferentes en cada cama. Para

simular algo similar, se decidió utilizar tres reactores de flujo pistón con condiciones de trabajo respectivas.

Al analizar los resultados de la simulación, se observa que a medida que se pasa a través de las camas, los valores de concentraciones se asemejan cada vez más a los datos de la planta PAU. Lo que interesa particularmente en la simulación es que, en la salida de la tercera cama, se obtenga una concentración igual a la de la planta PAU. Esto es crucial, a partir de este punto comienza un proceso para separar el amoníaco de los reactivos, lo que indica que se está obteniendo producciones de amoníaco reales.

Como se observa en la tabla de validación del reactor de flujo pistón, se obtuvo una concentración molar del 20.3%, lo que muestra una diferencia de apenas el 0.4% en comparación con la planta PAU. Esta discrepancia tan baja valida por completo la simulación del amoníaco

### **5.2.2. Validación del modelo de producción de urea**

Para el caso de la validación del modelo de producción de urea, se tendrá que hacerlo diferente al modelo de producción de amoníaco. No se cuenta con datos de campo para poder comparar los datos obtenidos en la simulación, esto porque el reactor de urea funciona como uno solo, y solo les interesa saber la concentración de urea a la salida del reactor, lo que seguiría del proceso es tan solo purificar la urea y recircular todos los reactivos que no reaccionaron mediante la degradación del carbamato o tan solo la recirculación del dióxido de carbono y el amoníaco.

Entonces se decidió para que la simulación de obtención de urea tenga validación usar datos conocidos/reales como:

- Tasa de producción de urea en Tn/año
- Cantidad de dióxido de carbono que entra al reactor de urea
- Porcentaje de conversión de cada una de las reacciones que ocurre dentro del reactor
- Concentración de urea a la salida del reactor de urea
- Temperatura y presión de trabajo del evaporador de vacío

- Concentración de urea a la salida evaporador de vacío

Todos estos datos se muestran a continuación en la siguiente tabla:

*Tabla V-6. Datos de validación del modelo de simulación de obtención de urea*

<b>Datos de validación del modelo de simulación de obtención de urea</b>			
<b>Producción de urea Tn/año</b>	<b>Porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al reactor</b>	<b>Porcentaje de conversión para obtención de carbamato</b>	<b>Porcentaje de conversión de carbamato a urea</b>
3,47E+05	18%	60%	70%
<b>Porcentaje de degradación de carbamato a amoníaco y dióxido de carbono</b>		<b>Concentración másica de urea a la salida del reactor</b>	<b>Concentración de urea a la salida del evaporador de vacío</b>
65%		70%	96%

*Fuente: Elaboración propia*

No se debe olvidar que todos los equipos están trabajando en las condiciones de trabajo expuestas en el subtítulo “4.1.2.5 Base de diseño de la simulación de urea”.

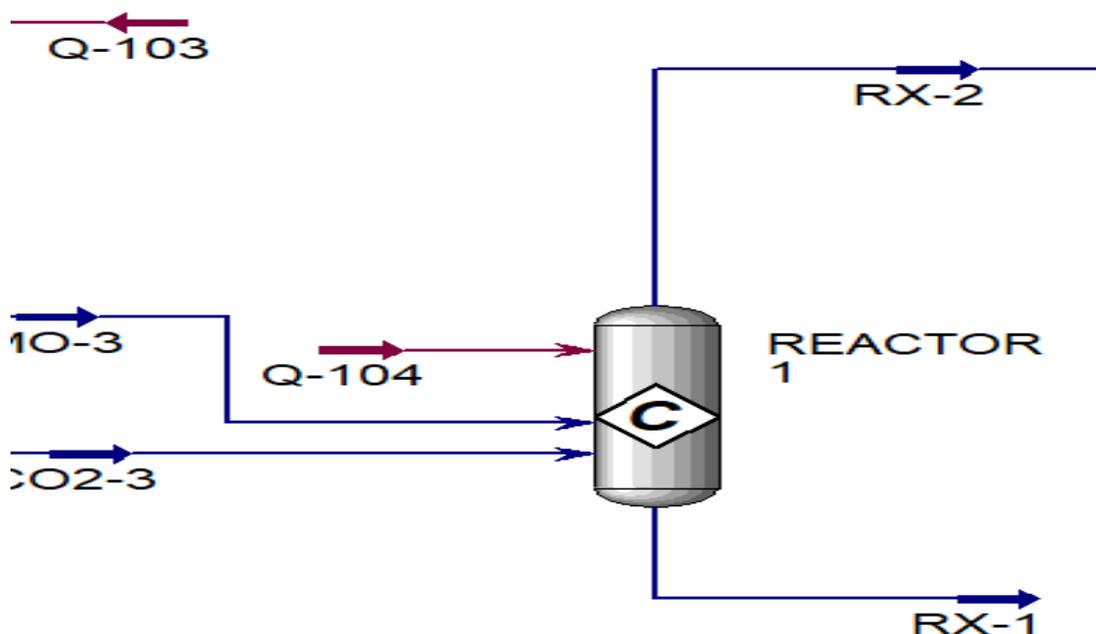
### 5.2.2.1. Validación reactor de síntesis de carbamato

*Tabla V-7. Validación del reactor de síntesis de carbamato*

	<b>Composición de entrada al reactor de carbamato en Aspen Hysys (AMO-3 y CO2-3)</b>	<b>Composición de salida del reactor de carbamato Aspen Hysys (Rx-2)</b>
<b>Amoníaco</b>	43,973	40,75%
<b>Hidrogeno</b>	0,000	0,00%
<b>Carbamato</b>	51,856	59,25%
<b>Dióxido de carbono</b>	4,168	0,00%

*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-6. Validación reactor de carbamato



Fuente: Elaboración propia

Se observa que todo el dióxido de carbono terminó reaccionando con el amoníaco, lo cual es esperado en este proceso, porque se busca utilizar todo el dióxido de carbono en el para evitar su pérdida y su conversión en un contaminante ambiental.

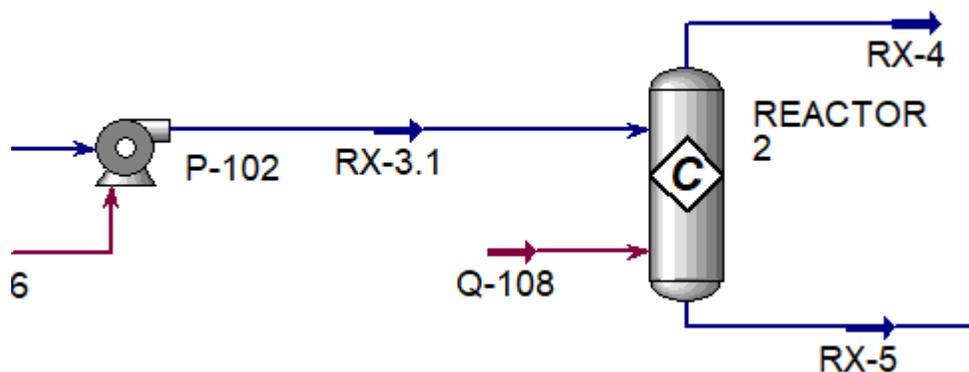
### 5.2.2.2. Validación reactor de obtención de urea

Tabla V-8. Validación reactor de obtención de urea

	Composición de entrada al reactor de urea en Aspen Hysys (AMO-3 y CO2-3)	Composición de salida del reactor de urea Aspen Hysys (Rx-5)
<b>Amoniaco</b>	40,75%	41,08%
<b>Hidrogeno</b>	0,00%	0,00%
<b>Carbamato</b>	59,25%	17,67
<b>Dióxido de carbono</b>	0,00%	0,00%
<b>Urea</b>	0%	31,72%
<b>Agua</b>	0%	9,52%

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-7. Validación reactor de obtención de urea



Fuente: Elaboración propia

En este punto, se comenzó con la obtención de urea, pero aún no es momento de comparar esta concentración con la obtenida en la planta PAU, ya que el producto aún no ha salido por completo de los reactores. Se recordará que en la PAU las tres reacciones ocurren en el mismo reactor, mientras que en nuestra simulación utilizamos tres reactores diferentes para simular el proceso completo. Además, existe una etapa de purificación donde, mediante absorción con el dióxido de carbono remanente, se elimina la mayor parte del carbamato y el amoníaco sobrante.

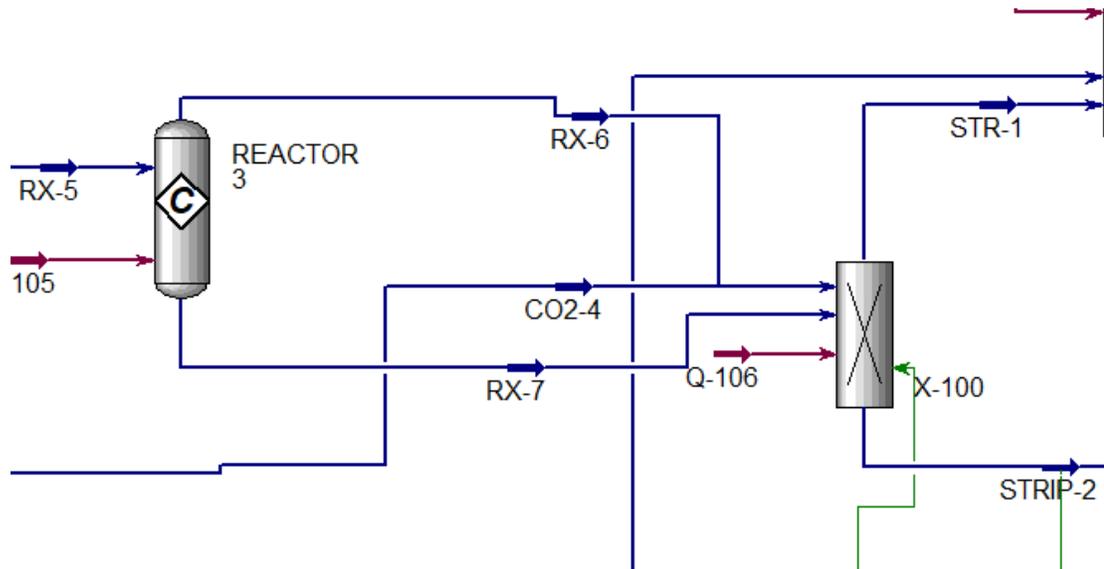
### 5.2.2.3. Validación reactor de degradación de carbamato

Tabla V-9. Validación reactor de degradación de carbamato

	Composición de entrada al reactor de degradación de carbamato en Aspen Hysys (RX-5)	Composición de salida del reactor degradación de carbamato y purificación de urea Aspen Hysys (STRIP-2)
<b>Amoníaco</b>	41,08%	7,21%
<b>Agua</b>	0,00%	21,10%
<b>Carbamato</b>	17,67%	0,0137%
<b>Dióxido de carbono</b>	0,00%	0,00%
<b>Urea</b>	31,72%	70,033%

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-8. Validación del reactor de degradación de carbamato



Fuente: Elaboración propia

Ahora se puede confirmar que la urea acaba de salir completamente del reactor de obtención, y como se observa, se obtiene una concentración del 70.033% en solución acuosa. Hasta este punto, se nota que la simulación está funcionando dentro de los rangos esperados de concentración.

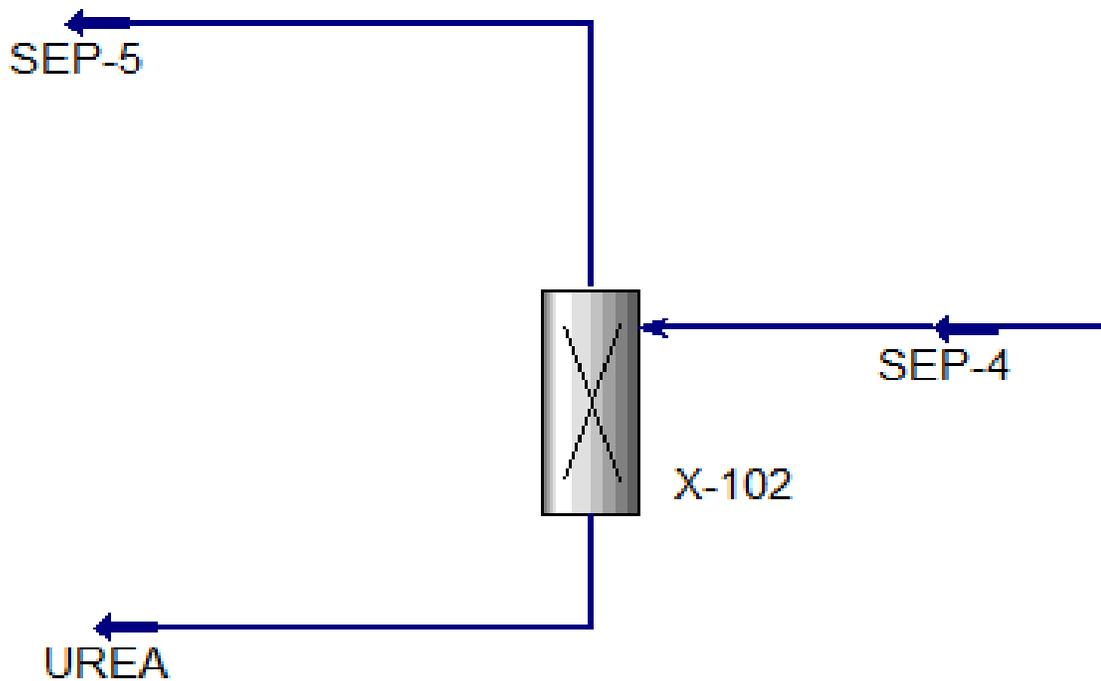
#### 5.2.2.4. Validación del evaporador de vacío

Tabla V-10. Validación del evaporador de vacío

	Composición de entrada del evaporador al vacío	Composición de salida del evaporador al vacío	Producción de Urea (Tn/año)	Presión de salida (Bar)	Temperatura de salida (°C)
<b>Urea</b>	78,58%	96%	3,49E+05	0,33	71,31
<b>Agua</b>	21,42%	4%			

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-9. Validación separador de vacío flash



Fuente: Elaboración propia

Al concluir la simulación, se obtuvo una concentración de urea final del 96%, lo cual es obligatorio por motivos de calidad. Sin embargo, lo más relevante es la temperatura de salida, que debe ser de 70°C para facilitar el proceso de granulación posterior. Como se puede observar en la tabla, se obtuvo una temperatura de urea de 71°C, cumpliendo así con los datos operativos de la PAU.

Además, se está cumpliendo con la tasa de producción de urea. En la planta PAU, se tiene una producción de  $3,473 \times 10^5$  toneladas por año, mientras que en la simulación se obtiene  $3,491 \times 10^5$  toneladas por año, valores bastante cercanos que pueden confirmar la validación de la simulación.

### 5.3. Análisis de sensibilidad

Para llevar a cabo el análisis de sensibilidad, se utilizará el mismo Aspen Hysys, conocido por su funcionalidad de "Case Study". Esta herramienta permite definir

claramente las variables independientes y dependientes para el estudio. Además, nos ofrece la flexibilidad de especificar el rango de valores inicial y final para llevar a cabo el análisis de sensibilidad. Esta funcionalidad proporciona una visión detallada de cómo varía la salida del modelo en respuesta a cambios en las variables de entrada, lo cual es fundamental para comprender la robustez y la sensibilidad del proceso.

Es importante destacar que la simulación del proceso de obtención de amoníaco es altamente sensible a pequeñas variaciones, debido a la complejidad inherente del proceso. La presencia de múltiples equipos, como absorbedores, reactores de flujo pistón y reactores de equilibrio, junto con los cálculos asociados a las recirculaciones, contribuye a esta sensibilidad. Por lo tanto, es crucial abordar la simulación con cuidado y meticulosidad, especialmente al llevar a cabo el análisis de sensibilidad.

### 5.3.1. Análisis de sensibilidad en el modelo de producción de amoníaco

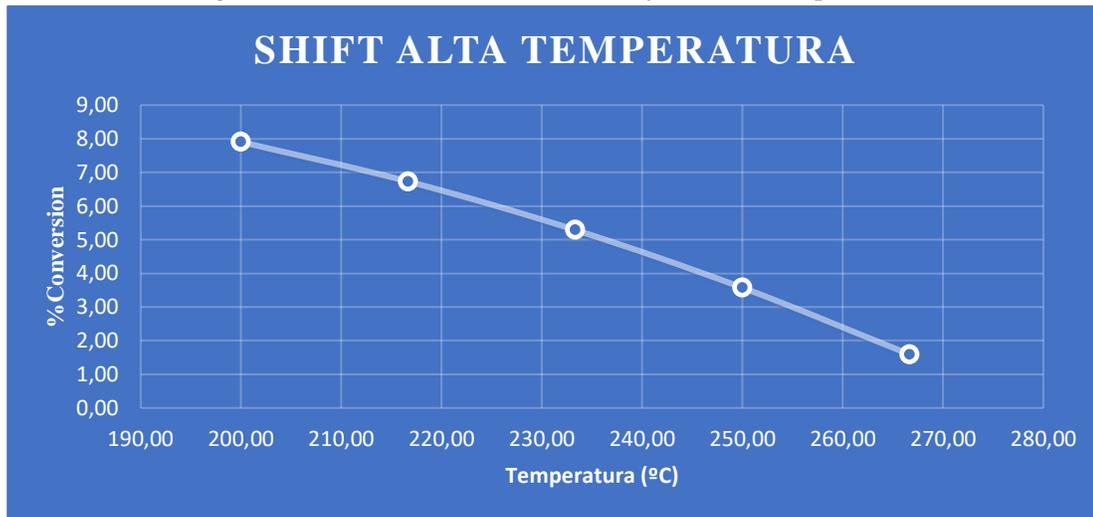
#### 5.3.1.1. Reactor shift de alta temperatura y baja temperatura

Tabla V-11. Sensibilidad de los reactores shift de alta y baja temperatura

Shift Alta temperatura		Shift baja temperatura	
Temperatura (°C)	%Conversión	Temperatura (°C)	%Conversión
350,00	0,00	200,00	30,72
333,33	0,00	205,56	30,47
316,67	0,00	211,11	30,19
300,00	0,00	216,67	29,90
283,33	0,00	222,22	29,58
266,67	1,59	227,78	29,25
250,00	3,57	233,33	28,89
233,33	5,29	238,89	28,51
216,67	6,73	244,44	28,11
200,00	7,90	250,00	27,69

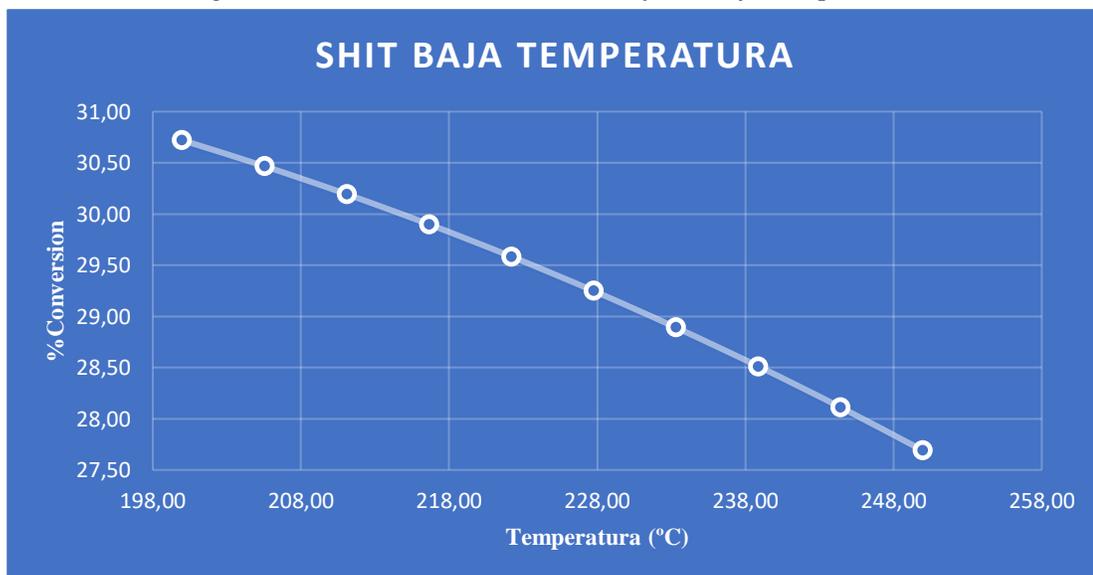
Fuente: Elaboración propia

*Fig. 5-10 Evaluación del reactor shift de alta temperatura*



*Fuente: Elaboración propia*

*Fig. 5-11 Evaluación del reactor shift de baja temperatura*



*Fuente: Elaboración propia*

Se optó por presentar conjuntamente los dos reactores shift debido a que la evaluación es prácticamente idéntica para ambos, como se discutió en el capítulo de validación. Estos tipos de reacciones de equilibrio, sin el uso de catalizadores, muestran una mejora en la conversión a temperaturas inferiores a 300°C. Sin embargo, incluso reduciendo la temperatura, no se alcanzan altos porcentajes de conversión. Por esta razón, en la

planta PAU se recurre al uso de catalizadores que facilitan la reacción a temperaturas más elevadas y proporcionan una mayor eficiencia en la conversión.

### 5.3.1.2. Reactor flujo pistón cama 1

Para el reactor de flujo pistón, se decidió analizar cómo varían los porcentajes de conversión en función de la geometría del reactor, así como de las condiciones de operación, tales como temperatura y presión. Esta elección se basa en la importancia crítica de estas variables para el rendimiento del reactor. La geometría del reactor, junto con las condiciones de temperatura y presión, influyen significativamente en la eficiencia de la conversión química dentro del sistema. Por lo tanto, es fundamental comprender cómo estos factores afectan los resultados del proceso en el reactor de flujo pistón.

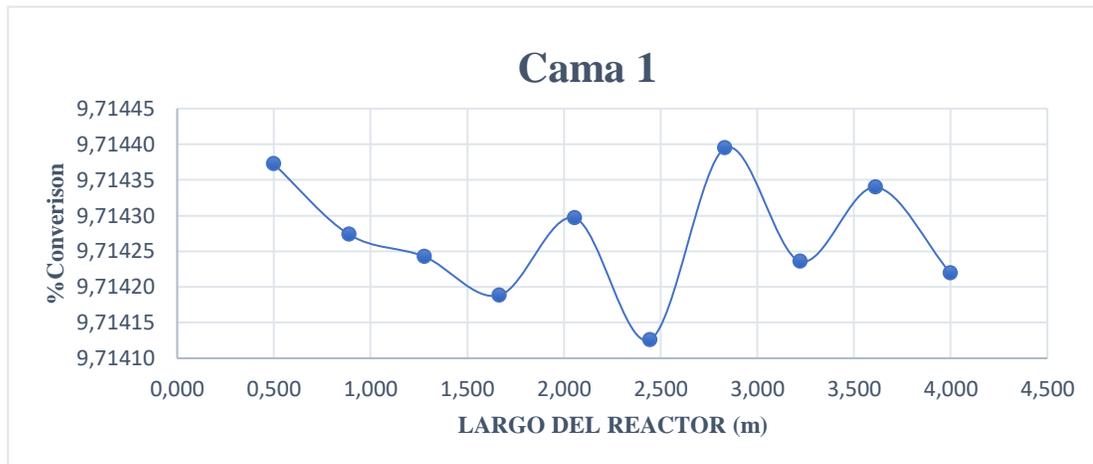
#### A. Porcentaje de conversión en función de la geometría del reactor

*Tabla V-12. Sensibilidad de la CAMA 1 en función de su geometría*

RFP CAMA 1		RFP CAMA 1	
Largo del reactor (m)	%Conversión	RFP Volumen (m <sup>3</sup> )	%Conversión
0,500	9,71437	1,000	9,714
0,889	9,71427	1,222	9,714
1,278	9,71424	1,444	9,714
1,667	9,71419	1,667	9,714
2,056	9,71430	1,889	9,714
2,444	9,71413	2,111	9,714
2,833	9,71439	2,333	9,714
3,222	9,71424	2,556	9,714
3,611	9,71434	2,778	9,714
4,000	9,71422	3,000	9,714

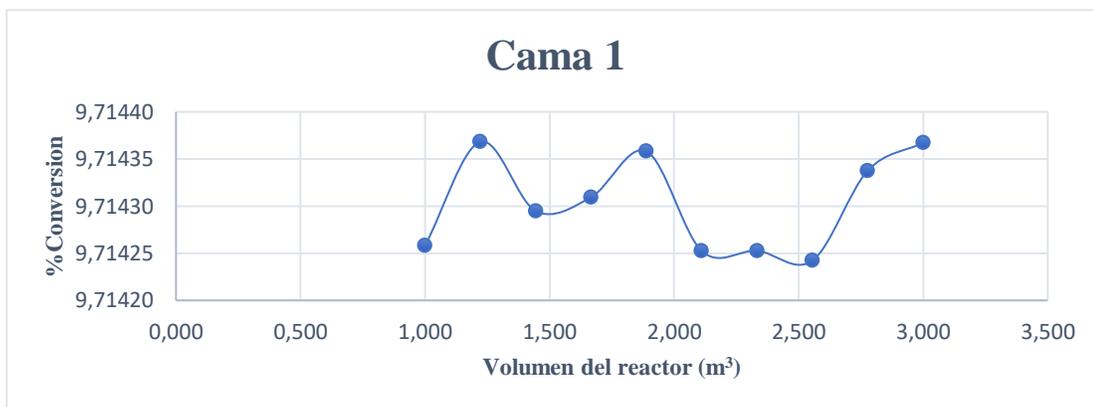
*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-10. Evaluación de la Cama 1 en función de la longitud del reactor



Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-11. Evaluación de la cama 1 en función del volumen del reactor



Fuente: Elaboración propia

Al analizar los datos obtenidos de la evaluación de la geometría del reactor "Cama 1", es importante ejercer cautela y evitar sacar conclusiones precipitadas. Aunque las gráficas puedan mostrar un comportamiento aparentemente caótico o irregular, al observar detenidamente las tablas de datos, se revela que las variaciones son del orden de 0,0001-0,001. Esto significa que los valores de los primeros dos decimales permanecen constantes a lo largo de las variaciones. Por lo tanto, en este caso, la geometría del reactor parece tener una influencia insignificante en el porcentaje de conversión.

## B. Porcentaje de conversión en función de las condiciones de trabajo Temperatura y Presión

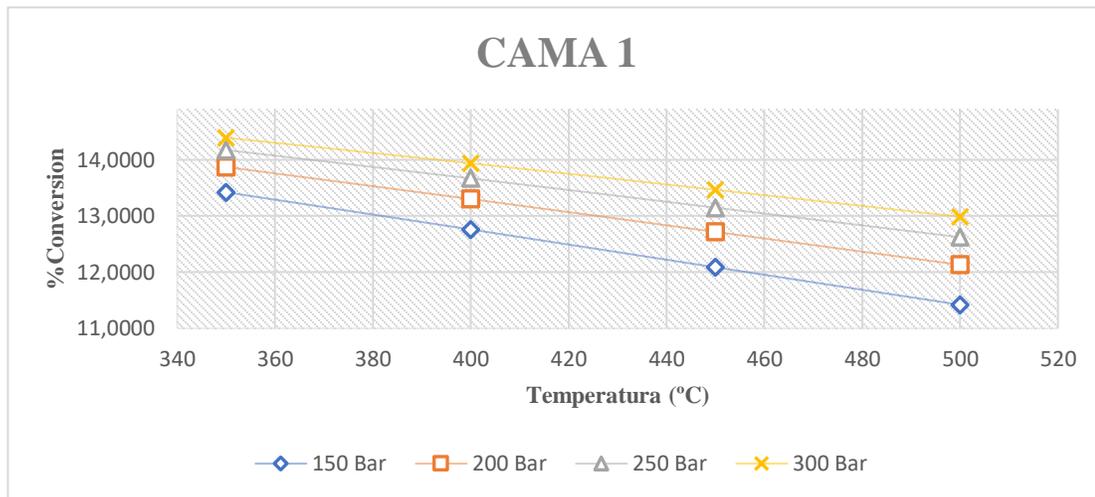
En el caso de las condiciones de trabajo del reactor "Cama 1", se consideró apropiado realizar un análisis simultáneo de ambos parámetros, presión y temperatura. Esta decisión se fundamenta en el hecho de que tanto la presión como la temperatura ejercen una influencia significativa en la reacción de obtención de amoníaco. Dado que ambos compuestos se encuentran en estado gaseoso y presentan variaciones sustanciales en sus propiedades, es crucial examinar cómo estas dos variables afectan conjuntamente el comportamiento del proceso en el reactor.

Tabla V-13. Sensibilidad de la CAMA 1 en función de las condiciones de trabajo

CAMA 1					
Presión (Bar)	Temperatura (°C)	%Conversión	Presión (Bar)	Temperatura (°C)	%Conversión
150	350	13,4231	150	350	13,423
150	400	12,7610	200	350	13,872
150	450	12,0884	250	350	14,174
150	500	11,4217	300	350	14,394
200	350	13,8716	150	400	12,761
200	400	13,3023	200	400	13,302
200	450	12,7180	250	400	13,670
200	500	12,1321	300	400	13,939
250	350	14,1738	150	450	12,088
250	400	13,6699	200	450	12,718
250	450	13,1493	250	450	13,149
250	500	12,6234	300	450	13,467
300	350	14,3936	150	500	11,422
300	400	13,9389	200	500	12,132
300	450	13,4670	250	500	12,623
300	500	12,9877	300	500	12,988

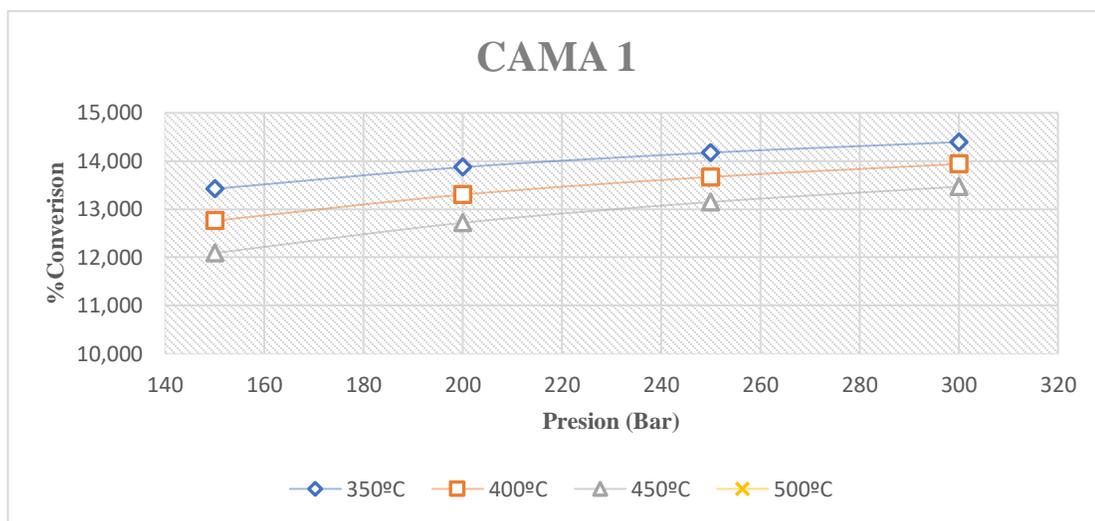
Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-12. Sensibilidad de la cama 1 en función de la temperatura a presiones constantes



Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-13. Sensibilidad de la cama 1 en función de la presión a temperaturas constantes



Fuente: Elaboración propia

Al analizar los resultados, se observan dos tendencias importantes: el porcentaje de conversión es directamente proporcional al aumento de la presión de trabajo, pero inversamente proporcional al incremento de la temperatura de trabajo. Estos hallazgos indican que el aumento de presión es el factor principal que contribuye a una mayor

producción de amoníaco. Aunque la temperatura también influye en la reacción, parece tener un efecto contrario en comparación con la presión en términos de su impacto en el rendimiento del proceso.

### 5.3.1.3. Reactor flujo pistón cama 2

Se procederá a realizar el mismo análisis tanto para la cama dos como para la cama tres. Sin embargo, en esta ocasión, no se llevará a cabo un exhaustivo análisis de la geometría de estos reactores, ya que como se ha observado previamente, esta variable no influye de manera significativa en el porcentaje de conversión. En su lugar, se centrará en la influencia de la presión y la temperatura, parámetros relevantes para el estudio de estos reactores. No obstante, también se presentarán los resultados del porcentaje de conversión en función de la geometría de los reactores de la cama 2 y cama 3.

Es importante tener en cuenta que, para estos reactores, la cantidad de reactivo en la entrada es considerablemente menor. Por lo tanto, es posible que los porcentajes de conversión sean más bajos en comparación con el reactor anterior.

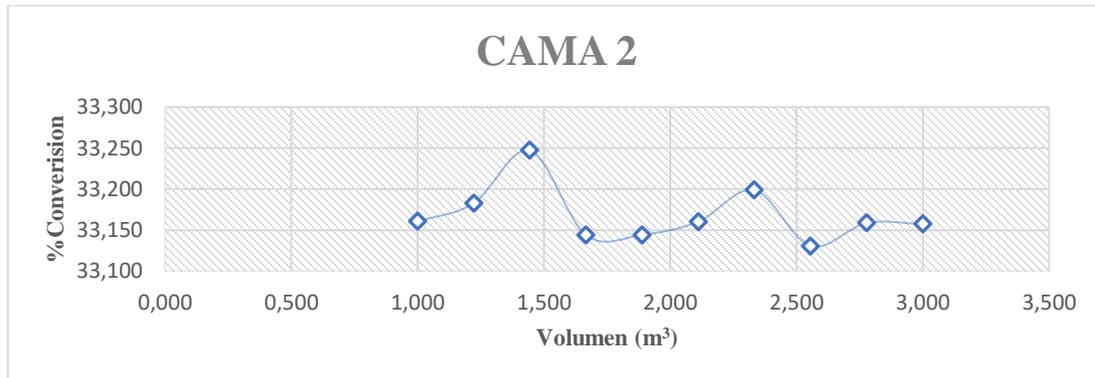
#### A. Porcentaje de conversión en función de la geometría del reactor cama 2

*Tabla V-14. Sensibilidad de la CAMA 2 en función de su geometría*

RFP CAMA 2		RFP CAMA 2	
RFP Vol (m3)	%Conversión	Largo del reactor (m)	%Conversion
1,000	33,161	0,50000	0,56568
1,222	33,183	0,88889	0,56572
1,444	33,247	1,27778	0,56567
1,667	33,144	1,66667	0,56566
1,889	33,144	2,05556	0,56561
2,111	33,160	2,44444	0,56571
2,333	33,199	2,83333	0,56568
2,556	33,131	3,22222	0,56568
2,778	33,159	3,61111	0,56563
3,000	33,157	4,00000	0,56567

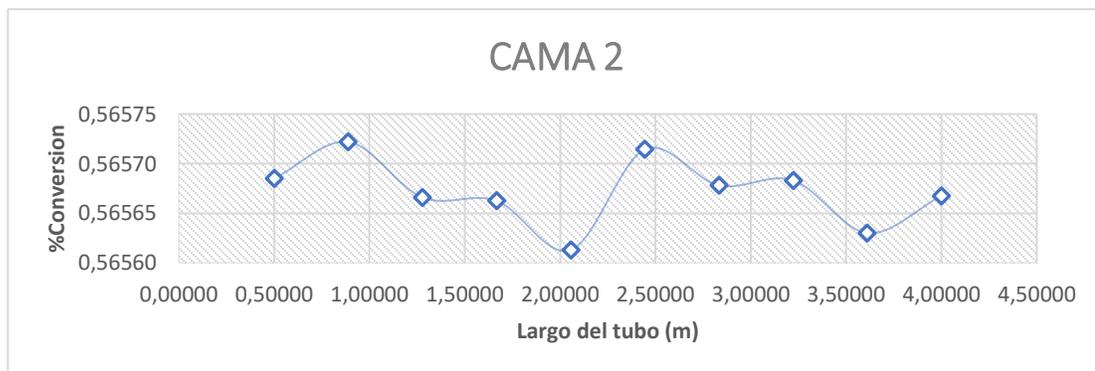
*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-14. Evaluación de la CAMA 2 en función del volumen del reactor



Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-15. Evaluación de la CAMA 2 en función de la longitud del reactor



Fuente: Elaboración propia

Una vez más, se confirma que la variación en la geometría del reactor no influye significativamente en el porcentaje de conversión. Sin embargo, es importante destacar que, al aumentar el volumen del reactor, es posible alcanzar un porcentaje de conversión considerablemente mayor en comparación con los cambios en la longitud del reactor. Este hallazgo sugiere que, aunque la geometría del reactor no tenga un impacto significativo por sí sola, el volumen total del sistema puede tener una influencia significativa en la eficiencia de la conversión química.

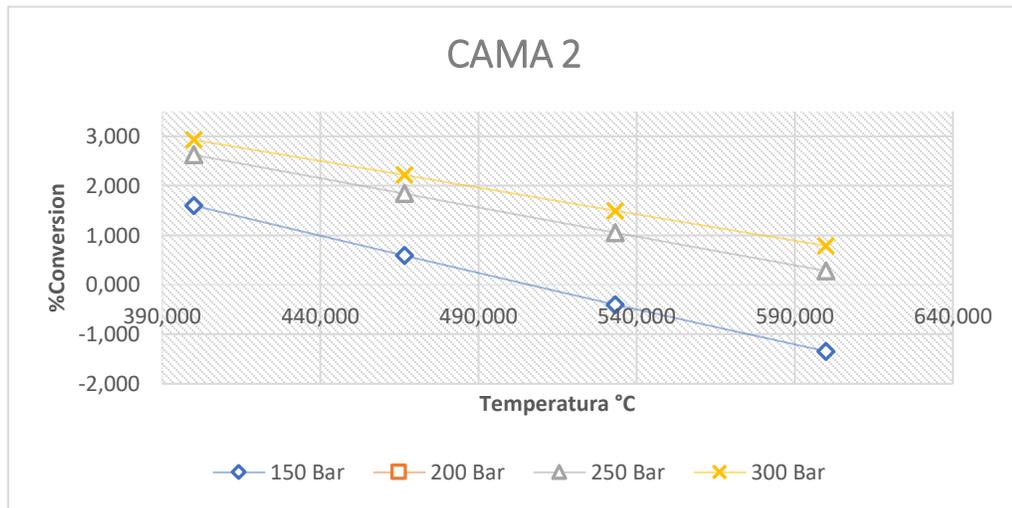
**B. Porcentaje de conversión en función de las condiciones de trabajo  
Temperatura y Presión**

*Tabla V-15. Sensibilidad de la CAMA 2 en función de las condiciones de trabajo*

CAMA 2			CAMA 2		
Presión (Bar)	Temperatura (°C)	%Conversión	Presión (Bar)	Temperatura (°C)	%Conversión
150,000	400,000	1,599	150,000	400,000	1,599
150,000	466,667	0,589	200,000	400,000	2,210
150,000	533,333	-0,402	250,000	400,000	2,625
150,000	600,000	-1,345	300,000	400,000	2,928
200,000	400,000	2,210	150,000	466,667	0,589
200,000	466,667	1,330	200,000	466,667	1,330
200,000	533,333	0,455	250,000	466,667	1,840
200,000	600,000	-0,392	300,000	466,667	2,216
250,000	400,000	2,625	150,000	533,333	-0,402
250,000	466,667	1,840	200,000	533,333	0,455
250,000	533,333	1,051	250,000	533,333	1,051
250,000	600,000	0,280	300,000	533,333	1,495
300,000	400,000	2,928	150,000	600,000	-1,345
300,000	466,667	2,216	200,000	600,000	-0,392
300,000	533,333	1,495	250,000	600,000	0,280
300,000	600,000	0,785	300,000	600,000	0,785

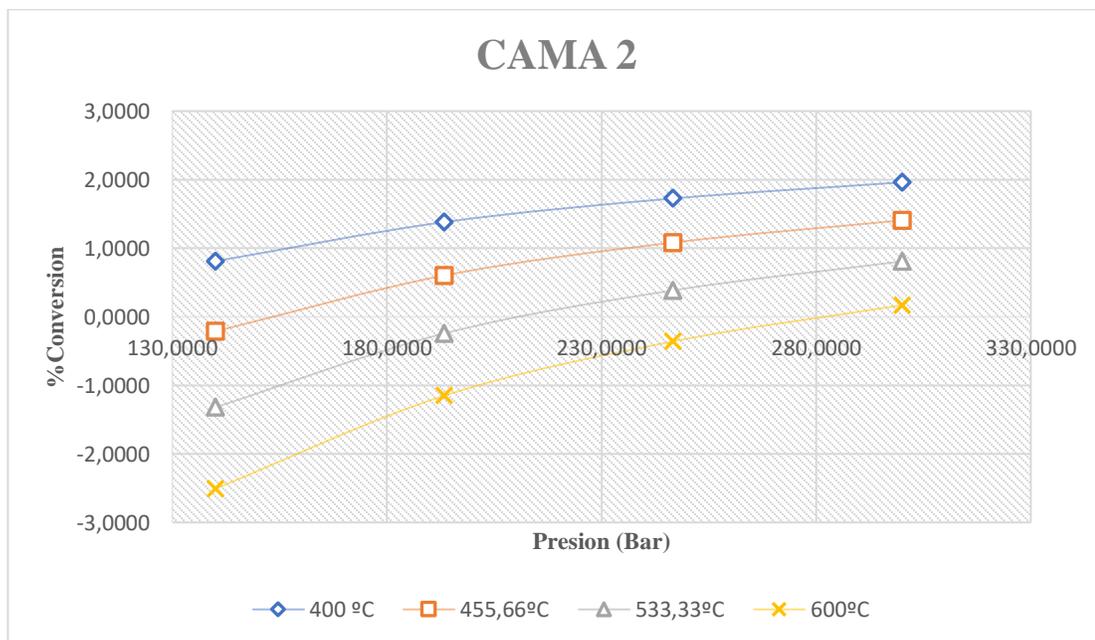
*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-16. Sensibilidad de la cama 1 en función de la temperatura a presiones constantes



Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-17. Sensibilidad de la cama 2 en función de la presión a temperaturas constantes



Fuente: Elaboración propia

Se observa un fenómeno interesante: para ciertas combinaciones de presiones y temperaturas, los valores de los porcentajes de conversión son negativos. Este

fenómeno indica que, en condiciones de presión muy baja y temperaturas extremadamente altas, en lugar de obtener productos, se generan más reactivos. Es importante recordar que la reacción de obtención de amoníaco es una reacción de equilibrio, lo que implica la posibilidad de que se formen reactivos en lugar de productos en ciertas condiciones. Además, es notable mencionar que los porcentajes de conversión son más bajos que los observados en el reactor Cama 1.

#### 5.3.1.4. Reactor flujo pistón cama 3

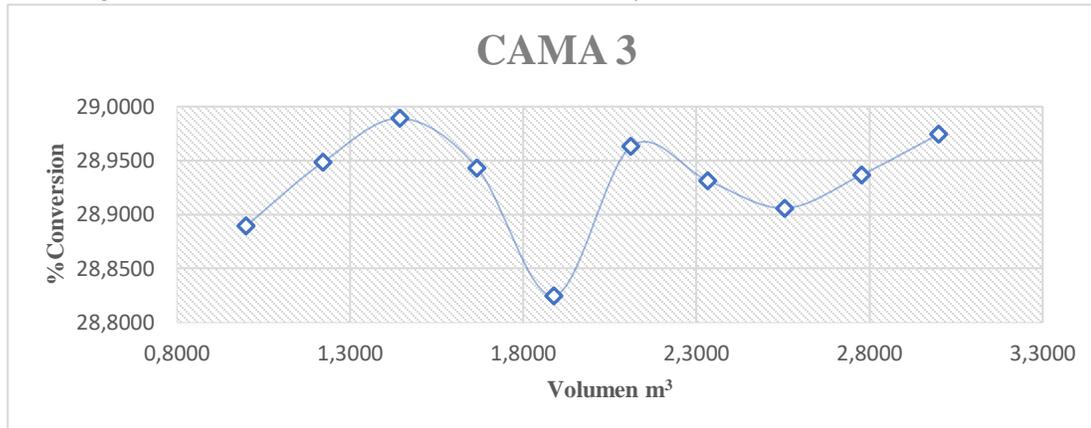
Concluyendo con los reactores, se procederá a repetir los análisis, como se hizo previamente en los reactores anteriores. Es importante tener en cuenta que la cantidad de reactivo que ingresa al sistema es considerablemente menor en este punto, dado que ya ha pasado por dos reactores previos. Esta reducción en la cantidad de reactivo disponible influirá en los resultados del análisis, y debe ser considerada al interpretar los datos obtenidos en esta etapa del proceso.

*Tabla V-16. Sensibilidad de la CAMA 3 en función de su geometría*

RFP CAMA 3		RFP CAMA 3	
RFP Vol. (m <sup>3</sup> )	%Conversión	Largo del tubo (m)	%Conversión
1,0000	28,8896	0,5000	0,4376
1,2222	28,9486	0,8889	0,4377
1,4444	28,9890	1,2778	0,4377
1,6667	28,9432	1,6667	0,4377
1,8889	28,8248	2,0556	0,4376
2,1111	28,9630	2,4444	0,4377
2,3333	28,9313	2,8333	0,4376
2,5556	28,9059	3,2222	0,4377
2,7778	28,9369	3,6111	0,4376
3,0000	28,9744	4,0000	0,4377

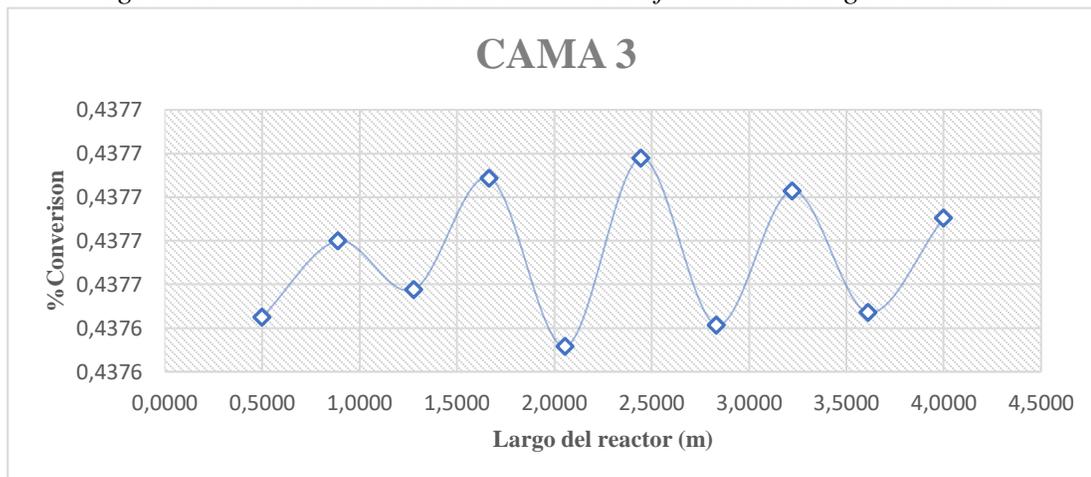
*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-18. Evaluación de la CAMA 3 en función del volumen del reactor



Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-19. Evaluación de la CAMA 3 en función del largo del reactor



Fuente: Elaboración propia

Como último análisis de la influencia de la geometría del reactor en el porcentaje de conversión, se observa que prácticamente no hay cambios significativos. Solo se presentan pequeños picos que pueden mejorar o empeorar ligeramente el porcentaje de conversión, pero en última instancia, estos cambios resultan insignificantes en términos de una mayor o menor obtención de producto. Esto sugiere que, en este punto del proceso, otros factores pueden tener una influencia mucho mayor en la eficiencia de la conversión química que la geometría del reactor.

**A. Porcentaje de conversión en función de las condiciones de trabajo  
Temperatura y Presión**

*Tabla V-17. Sensibilidad de la cama 3 en función de la temperatura a presiones constantes*

<b>CAMA 3</b>		
<b>Presión (Bar)</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>%Conversión</b>
140,000	400,000	0,811
140,000	466,667	-0,212
140,000	533,333	-1,320
140,000	600,000	-2,508
193,333	400,000	1,382
193,333	466,667	0,603
193,333	533,333	-0,243
193,333	600,000	-1,151
246,667	400,000	1,726
246,667	466,667	1,083
246,667	533,333	0,386
246,667	600,000	-0,358
300,000	400,000	1,962
300,000	466,667	1,408
300,000	533,333	0,808
300,000	600,000	0,170

*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-20. Sensibilidad de la cama 3 en función de la temperatura a presiones constantes

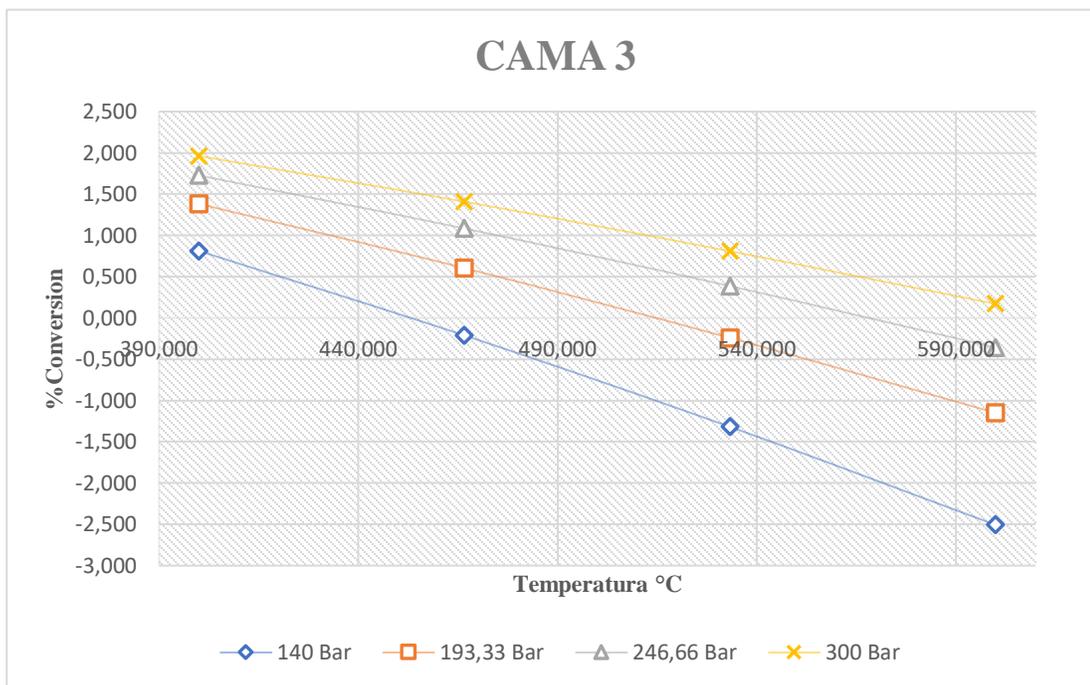
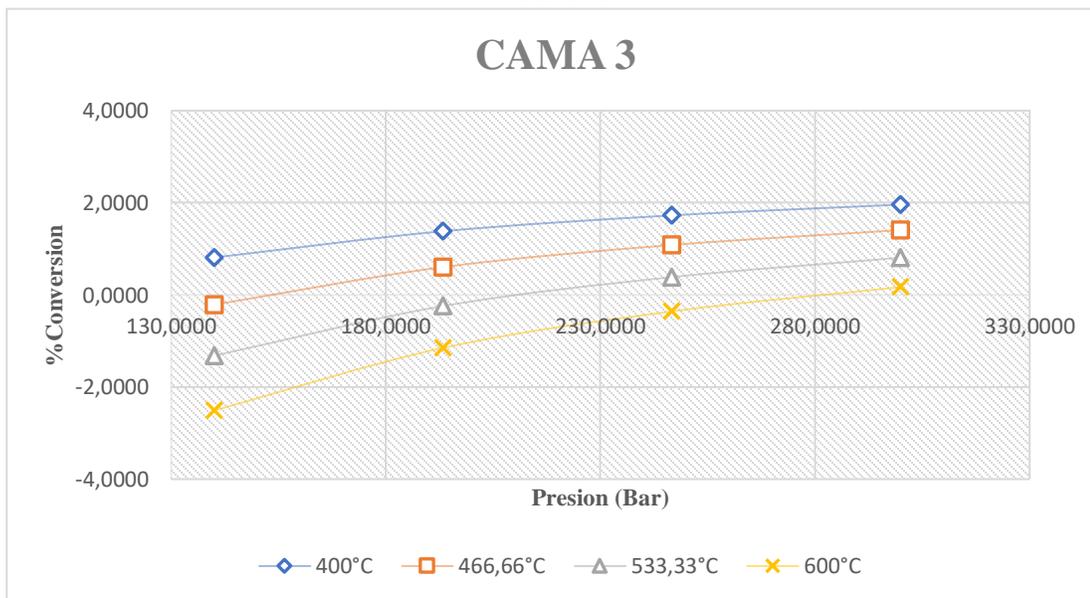


Fig. 5-21. Sensibilidad de la cama 3 en función de la presión a temperaturas constantes



En este último vistazo, se observa que la tendencia de la reacción se acerca cada vez más a la formación de reactivos en lugar de productos. Este fenómeno puede atribuirse a la naturaleza del equilibrio químico, donde a medida que aumenta la concentración de amoníaco, se requieren presiones más altas y temperaturas más bajas para favorecer una mayor producción de amoníaco. Este comportamiento ilustra la importancia de comprender y controlar las condiciones termodinámicas para optimizar la eficiencia de la reacción y mejorar el rendimiento del proceso en la obtención de amoníaco.

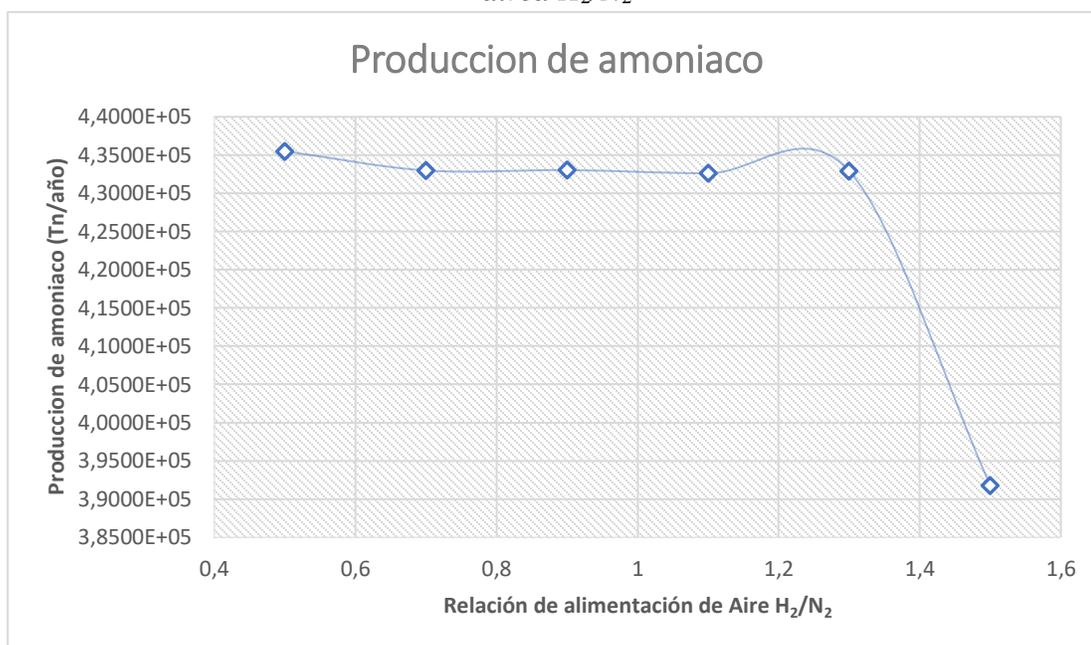
### 5.3.1.5. Producción de amoníaco en función de la relación de $H_2/N_2$

*Tabla V-18. Producción de amoníaco en función de la relación de alimentación de airea  $H_2/N_2$*

Relación de alimentación de airea $H_2/N_2$	Producción de amoníaco (Tn/año)
0,5	4,3550E+05
0,7	4,3298E+05
0,9	4,3303E+05
1,1	4,3261E+05
1,3	4,3289E+05
1,5	3,9179E+05

*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-22. Producción de amoniaco en función de la relación de alimentación de airea  $H_2/N_2$



Fuente: Elaboración propia

El propósito de este análisis es demostrar cómo puede variar la producción de amoniaco en función del aire que ingresa al proceso. Cuando se refiere a la relación  $H_2/N_2$ , se está hablando de la proporción entre la cantidad de hidrógeno y nitrógeno presentes en el sistema. Esta relación es de particular interés, ya que ambos son reactivos que participan en la formación del producto final, el amoniaco. Se observa que a medida que esta relación aumenta, la producción de amoniaco disminuye gradualmente al principio, pero luego cae drásticamente. Esta tendencia podría atribuirse a una acumulación de hidrógeno en el circuito de producción de amoniaco, lo que afecta negativamente la eficiencia de la reacción.

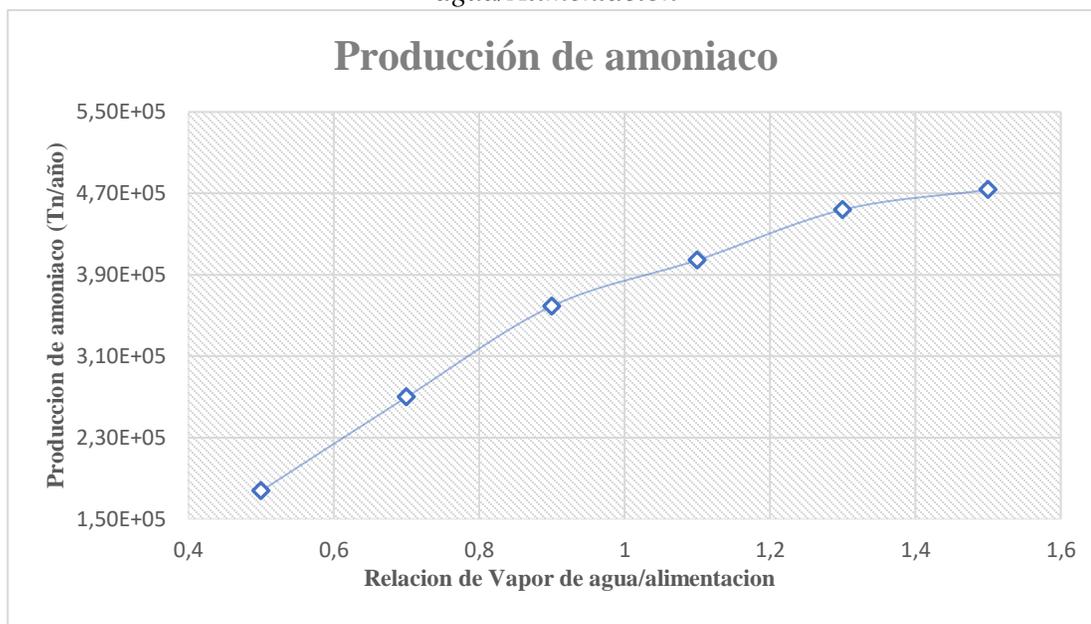
### 5.3.1.6. Producción de amoníaco en función de la relación vapor de agua/Alimentación

Tabla V-19. Producción de amoníaco en función de la relación vapor de agua/Alimentación

Relación de alimentación Vapor de agua/Alimentación	Producción de amoníaco (Tn/año)
0,5	1,77E+05
0,7	2,70E+05
0,9	3,59E+05
1,1	4,04E+05
1,3	4,54E+05
1,5	4,74E+05

Fuente: Elaboración propia

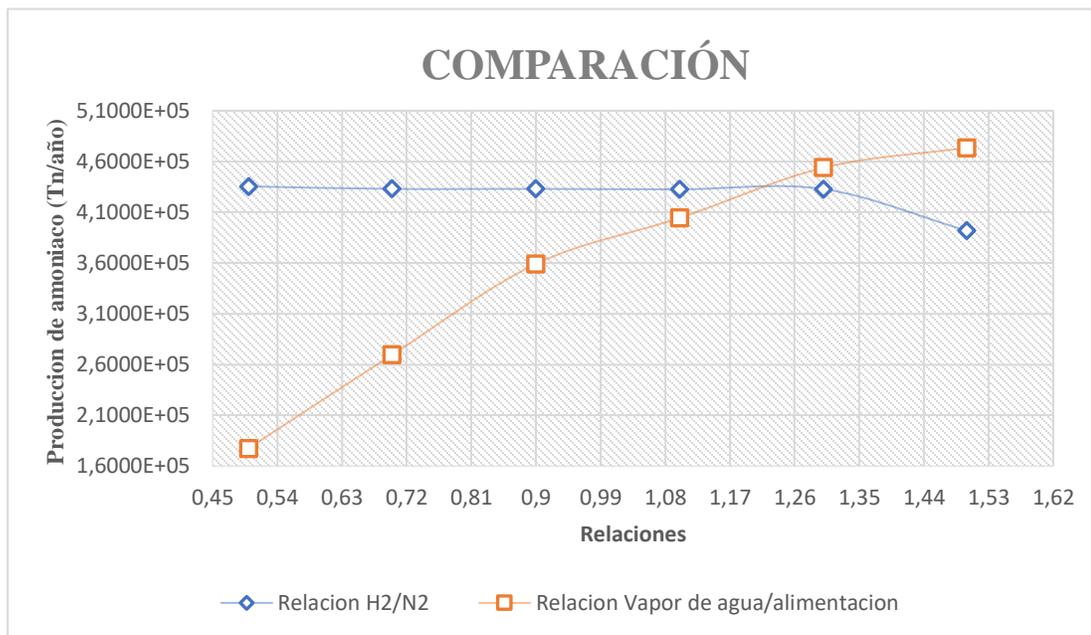
Fig. 5-23. Producción de amoniaco en función de la relación de vapor de agua/Alimentación



Fuente: Elaboración propia

En este estudio, se analiza la variación en la producción de amoniaco en función de la cantidad de vapor de agua que ingresa al sistema. Se observa que conforme aumenta la cantidad de vapor de agua, también lo hace la producción de amoniaco. Sin embargo, este incremento en la producción de amoniaco requiere aumentar la cantidad de aire que ingresa al sistema, lo que resulta en una disminución de la relación  $H_2/N_2$ . Aunque esto podría parecer beneficioso, no es posible reducir esta relación indefinidamente, ya que ello conduciría a una acumulación de nitrógeno en el circuito de producción de amoniaco, generando un efecto contrario. Por lo tanto, es esencial identificar un punto de alimentación óptimo que maximice la producción de amoniaco. Este punto óptimo puede determinarse mediante la combinación de ambas gráficas, identificando el punto de intersección. Este valor de alimentación óptimo permitirá lograr una producción de amoniaco más elevada.

Fig. 5-24. Relación óptima de alimentación



Podemos observar que la relación óptima para maximizar la producción de amoniaco cae dentro del rango de valores entre 1,17 y 1,26. Este intervalo representa la combinación ideal de vapor de agua y aire que ingresan al sistema, lo cual permite alcanzar una producción máxima de amoniaco. En este sentido, identificar y mantener esta relación óptima es crucial para optimizar la eficiencia del proceso y asegurar una producción óptima de amoniaco.

### 5.3.2. Análisis de sensibilidad en el modelo de producción de urea

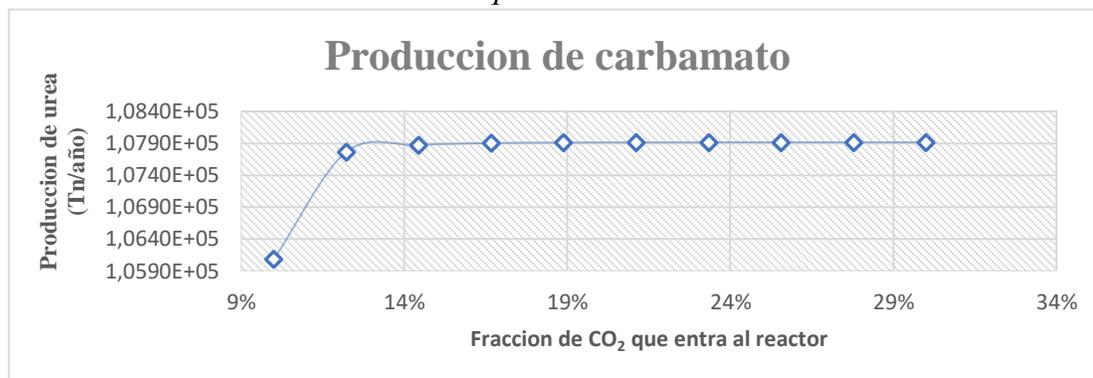
#### 5.3.2.1. Producción de carbamato y urea en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al reactor.

Tabla V-20. Producción de carbamato y urea en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al reactor

Relación de flujo de dióxido de carbono		
Relación de flujo de CO <sub>2</sub>	Producción de Carbamato (Tn/año)	Producción de urea (Tn/año)
10%	1,0608E+05	5,0670E+05
12%	1,0776E+05	5,1463E+05
14%	1,0787E+05	5,1348E+05
17%	1,0790E+05	5,1313E+05
19%	1,0791E+05	5,1303E+05
21%	1,0791E+05	5,1300E+05
23%	1,0792E+05	5,1299E+05
26%	1,0792E+05	5,1298E+05
28%	1,0792E+05	5,1298E+05
30%	1,0792E+05	5,1298E+05

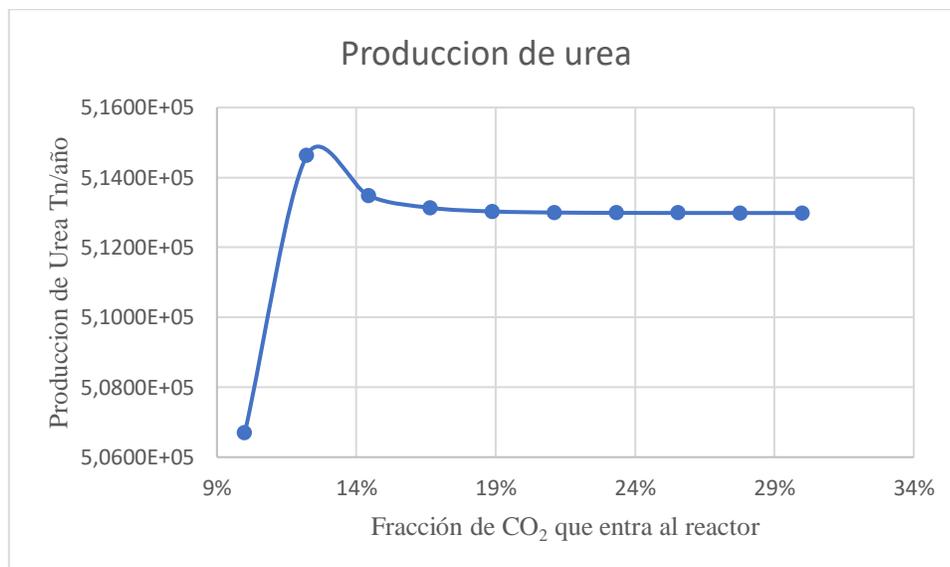
Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-25. Producción de carbamato en función de la cantidad de dióxido de carbono que entra al reactor



Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-26. Producción de urea en función de la cantidad de dióxido de carbono que entra al reactor



*Fuente: Elaboración propia*

Al analizar las gráficas, se observa que la producción de carbamato y urea es prácticamente idéntica. Esto se debe en parte a que la degradación del carbamato a urea sigue una proporción de 1:1. Además, la reacción alcanza un máximo de conversión del 60% al 70%. También es importante tener en cuenta que el dióxido de carbono restante que no ingresa al reactor se utiliza como absorbente para purificar la urea de los otros reactivos evitando que se pueda meter todo el dióxido de carbono al reactor. Por lo tanto, la cantidad óptima de dióxido de carbono total que ingresa al reactor cae dentro del rango de valores entre el 13% y el 14%.

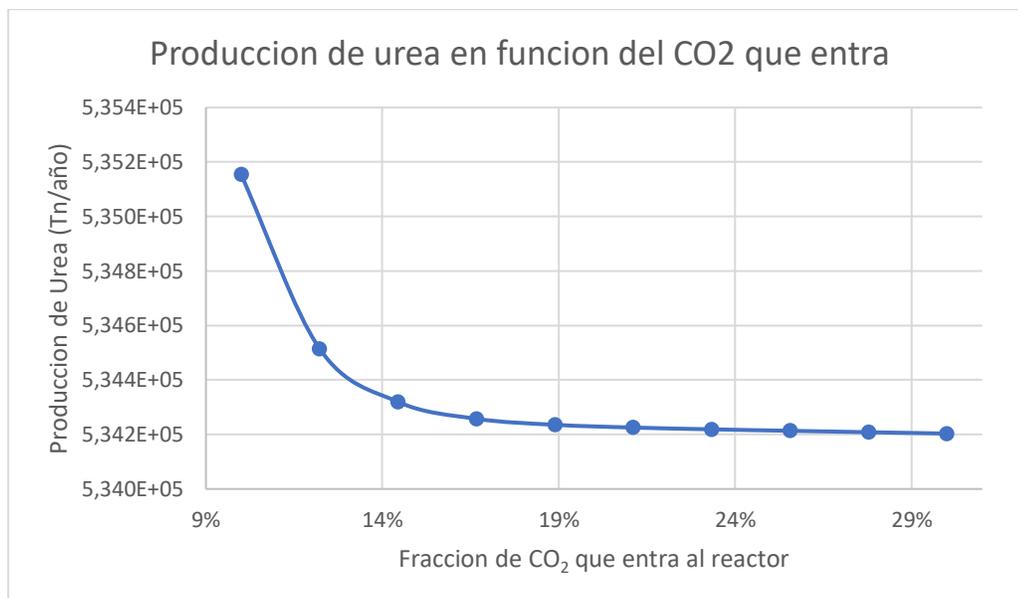
### 5.3.2.2. Producción de urea final en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al sistema

Tabla V-21. Producción de urea final en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al reactor

<b>Producción de urea final en función del porcentaje de CO<sub>2</sub> que entra al reactor</b>	
<b>Porcentaje CO<sub>2</sub> que entra al reactor</b>	<b>Producción de urea final (Tn/año)</b>
10%	5,352E+05
12%	5,345E+05
14%	5,343E+05
17%	5,343E+05
19%	5,342E+05
21%	5,342E+05
23%	5,342E+05
26%	5,342E+05
28%	5,342E+05
30%	5,342E+05

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-27. Producción de urea final en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al reactor



*Fuente: Elaboración propia*

Se observa un fenómeno totalmente inesperado: a medida que se introduce dióxido de carbono al reactor, la producción final de urea disminuye rápidamente. Esta disminución puede deberse a varios factores. Por un lado, aunque se genere más urea en el reactor principal, durante el proceso de purificación, parte de la urea se convierte nuevamente en carbamato debido a la naturaleza de la reacción de equilibrio. Además, el aumento en la cantidad de dióxido de carbono introducido al reactor puede resultar en una saturación del absorbedor utilizado para purificar la urea, lo que lleva a una pérdida de urea durante el proceso de purificación.

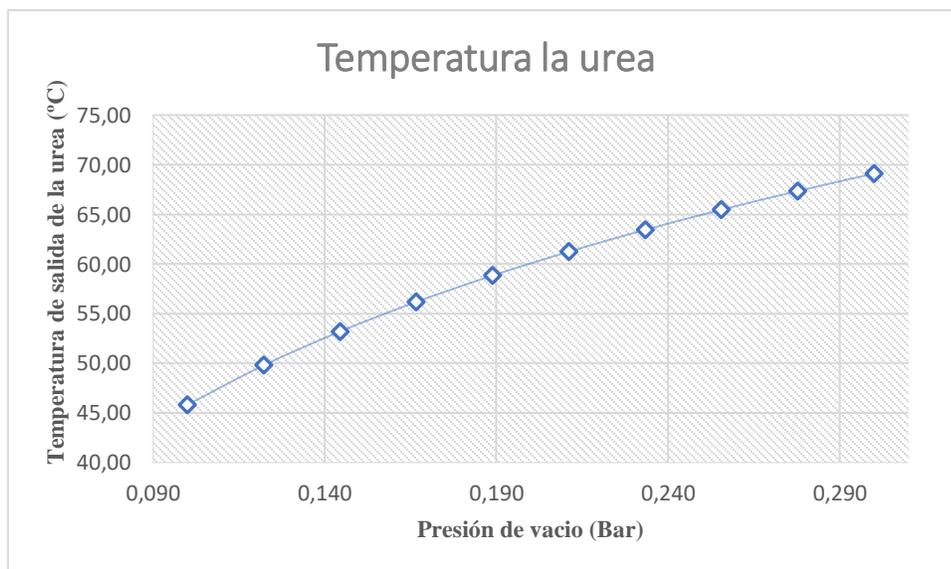
### 5.3.2.3. Temperatura de la urea en función de la presión de vacío del evaporador

Tabla V-22. Temperatura de la urea en función de la presión de vacío del evaporador

Temperatura de la urea en función de la presión de vacío	
Presión de vacío (Bar)	Temperatura de la Urea (°C)
0,100	45,81
0,122	49,79
0,144	53,19
0,167	56,17
0,189	58,83
0,211	61,23
0,233	63,44
0,256	65,46
0,278	67,34
0,300	69,10

Fuente: Elaboración propia

Fig. 5-28. Temperatura de la urea en función de la presión de vacío del evaporador



evaporador

Fuente: Elaboración propia

Como último análisis de sensibilidad, se observa que al aumentar la presión o disminuir la presión de vacío, la urea debe ser evaporada a una temperatura más alta en el evaporador. Esto se debe a que se busca cumplir con la concentración másica de urea del 96%, que es un estándar de calidad para el producto final.

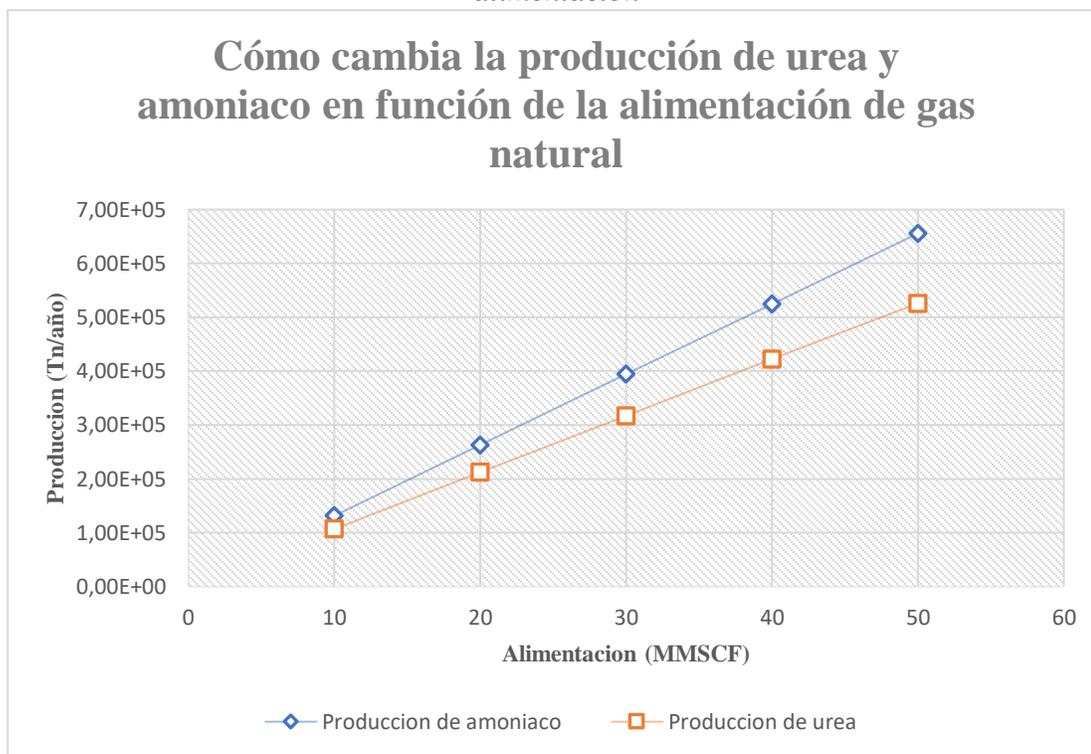
### 5.3.3. Análisis de sensibilidad global

*Tabla V-23. Sensibilidad de la producción de urea y amoníaco en función del gas de alimentación*

<b>PRODUCCION</b>		
<b>Alimentación (MMSCFD)</b>	<b>Producción de amoníaco (Tn/año)</b>	<b>Producción de urea (Tn/año)</b>
10	1,31E+05	1,07E+05
20	2,63E+05	2,12E+05
30	3,94E+05	3,17E+05
40	5,24E+05	4,23E+05
50	6,56E+05	5,26E+05

*Fuente: Elaboración propia*

Fig. 5-29. Análisis de la producción de urea y amoníaco en función del gas de alimentación



*Fuente: Elaboración propia*

Se observa que ambas producciones aumentan de manera lineal a medida que se incrementa la cantidad de gas natural que ingresa al sistema, aunque no con la misma pendiente. Esta diferencia se debe a que todo el amoníaco generado puede convertirse en urea.

#### 5.4. Análisis y discusión de los resultados

##### 5.4.1. Análisis y discusión reactor shift de alta y baja temperatura

Realizados los análisis de sensibilidad con Aspen Hysys, se nota que, a medida que se aumenta la temperatura en el proceso, el porcentaje de reacción disminuye drásticamente. Esto se debe a que se trata de una reacción exotérmica, lo cual indica que la temperatura es un factor importante para el valor de la constante de equilibrio de la reacción.

Por otro lado, aunque se trata de reacciones químicas que utilizan gases, el aumento o disminución de la presión no afecta de manera apreciable la constante de equilibrio de la reacción; en otras palabras, no incrementa el porcentaje de conversión en el proceso.

#### **5.4.2. Análisis y discusión reactor flujo pistón (cama1-cama2-cama3)**

Después de realizar los análisis de sensibilidad para el reactor de flujo pistón en las camas 1, 2 y 3, que representan los tres procesos dentro del reactor de la planta PAU, se puede observar que, en cuanto a la geometría del reactor, aumentar los valores de la longitud o el volumen del reactor no produce una mejora notable en el porcentaje de conversión. Además, estos cambios, aunque sean pequeños, no siguen un patrón predecible y son bastante caóticos.

En cuanto a las condiciones de trabajo, se ha observado que, para este tipo de reacción, valores altos de presión y bajos de temperatura favorecen una mejor conversión de reactivos a productos. Sin embargo, es importante tener en cuenta que, a medida que se avanza a través de las camas del reactor, se necesitarán mayores valores de presión para evitar que los productos se reconvirtan en reactivos debido a la disminución de reactivos en cada cama. Esto podría deberse a que la reacción es de equilibrio, lo que indica que es necesario controlar más estrictamente el valor de la presión en cada cama y, posiblemente, aumentarla para evitar la pérdida de productos a reactivos.

#### **5.4.3. Análisis y discusión de la producción de amoníaco en función de la relación $H_2/N_2$**

En este caso, se ha observado que a medida que se aumenta la relación de la cantidad de aire que ingresa al sistema, la producción de amoníaco disminuye progresivamente hasta llegar a un punto donde cae abruptamente. Esta disminución puede atribuirse a la acumulación creciente de hidrógeno en el circuito de producción de amoníaco, lo que resulta en una drástica reducción en los porcentajes de reacción. Por lo tanto, es crucial encontrar un valor óptimo para la alimentación de aire al sistema, considerando también el flujo de vapor de agua que ingresa al proceso.

#### **5.4.4. Análisis y discusión de la producción de amoníaco en función de la relación H<sub>2</sub>O/Alimentación**

Del análisis de sensibilidad, se observó que a medida que se aumenta la relación, la producción de amoníaco aumenta de manera lineal y con una pendiente elevada. Sin embargo, es importante tener en cuenta que este aumento en la producción de amoníaco obliga a disminuir el valor de la relación H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>.

#### **5.4.5. Análisis y discusión relación de alimentación óptima**

Teniendo en cuenta la interacción entre ambas relaciones y su impacto en la producción de amoníaco, al combinar ambas gráficas se observa que el valor óptimo de las relaciones debe situarse entre 1,17 y 1,26.

#### **5.4.6. Producción de carbamato y urea en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al reactor.**

Del análisis de sensibilidad, se encontró que al aumentar la cantidad de dióxido de carbono que ingresa al reactor, la producción de carbamato y urea también aumenta de manera similar. Esto se debe a que la degradación del carbamato a urea es una reacción 1:1. Sin embargo, este aumento alcanza un punto máximo debido al diseño del reactor y al tipo de reacciones de equilibrio, donde solo se logran conversiones del 60% al 70%. Otro aspecto importante a considerar es que no se puede utilizar todo el dióxido de carbono, ya que también se necesita como agente absorbente en el purificador de urea. Además, es crucial tener en cuenta que todo el dióxido de carbono debe reaccionar con el amoníaco para evitar que se convierta en un contaminante.

#### **5.4.7. Análisis de la producción de urea final en función del porcentaje del total de dióxido de carbono que entra al sistema**

Un análisis importante que se ha realizado es que, aunque pueda parecer sorprendente, al aumentar la cantidad de dióxido de carbono que ingresa al reactor, la cantidad de urea final disminuye. Esto se debe a que, en primer lugar, si se añade más dióxido de carbono, no sería posible purificar la urea de manera óptima. Esto conduciría a la acumulación de urea dentro del absorbedor, lo que podría resultar en la reversión de la

urea a carbamato, amoniac y dióxido de carbono, provocando así pérdidas de urea en el proceso. Incluso existe la posibilidad de la formación de Biuret, lo cual es algo que se quiere evitar a toda costa.

#### **5.4.8. Análisis y discusión temperatura en función de la presión de vacío del separador flash de urea**

El último paso para obtener la urea comercial implica cumplir con la norma que establece que la urea debe comercializarse con un 4% en masa de humedad. Para lograr esto, se utiliza un separador flash en el que se crea un vacío para que el vapor de agua se elimine. Según el análisis de sensibilidad realizado, se observa que a medida que disminuye la presión, la temperatura de evaporación del agua también desciende. Idealmente, se podría crear un vacío perfecto para que la temperatura sea lo suficientemente baja como para no requerir calentar la mezcla de urea y agua. Sin embargo, económicamente y técnicamente, mantener condiciones de presión de vacío resulta más costoso que simplemente aumentar la temperatura. Además, la temperatura es crucial para alcanzar el estado fundido de la urea necesario para el proceso de granulación.

Por lo tanto, utilizando la información obtenida de la sensibilidad, se puede determinar que los valores óptimos de trabajo son intermedios tanto para el vacío deseado como para la temperatura de salida. Los valores de presión de vacío óptimos se sitúan entre 0,24 y 0,30 bares, lo que proporciona temperaturas de salida de 70 a 75°C. Estos valores son ideales para obtener urea fundida, requisito fundamental para el proceso de granulación.

#### **5.5.9. Análisis de sensibilidad global**

El último análisis que se realizó fue a nivel global, donde se observa que al aumentar la cantidad de gas natural que ingresa, tanto la producción de amoniac como la de urea aumentan de manera similar, aunque con pendientes diferentes. Sin embargo, es importante recordar que existen dos relaciones que se deben respetar si se desea aumentar la producción de amoniac y, por ende, la producción de urea.

## **CAPÍTULO VI**

### **CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

## Conclusiones

- Se logró recopilar la información necesaria y mínima para llevar a cabo la simulación de la planta de Bulo-Bulo en Aspen Hysys. Esto se logró mediante el contacto directo con profesionales que estuvieron involucrados en el diseño de prefactibilidad de la planta, así como mediante la revisión de informes de mantenimiento que proporcionaban datos sobre las condiciones de trabajo.
- Con el apoyo de la bibliografía consultada, se lograron obtener datos sobre los equipos involucrados en el proceso de obtención de amoníaco y urea. Entre los equipos utilizados se encuentran: reactores, absorbedores, compresores, calentadores, enfriadores, intercambiadores de calor, válvulas de control, separadores flash, separadores flash de vacío, tanques de almacenaje y bombas.
- Los equipos más relevantes para la planta de Bulo-Bulo son principalmente los reactores, que incluyen el reactor reformador primario y secundario, el reactor shift de alta y baja temperatura, el reactor metanador, el absorbedor de dióxido de carbono, el absorbedor de nitrógeno e hidrógeno, y el reactor de flujo pistón para la obtención de amoníaco.
- Las variables más significativas para el proceso de obtención de amoníaco-urea incluyen la temperatura de trabajo de los diferentes reactores, la presión de trabajo del reactor de flujo pistón y los absorbedores, el volumen total del reactor de flujo pistón, el flujo molar de la cantidad de aire, el flujo molar de la cantidad de vapor de agua, el flujo másico de la cantidad de dióxido de carbono que entra al reactor en la obtención de carbamato-urea, y la presión de vacío del evaporador de urea fundida.
- El simulador de procesos más conveniente para el trabajo de investigación fue Aspen Hysys.
- Se seleccionó el modelo Peng-Robinson para la simulación de la planta de amoníaco debido a su buena adaptabilidad a los gases en general y a los hidrocarburos en particular. En el proceso de obtención de urea, se optó por el modelo Electrolyte NRTL (GMENRTL) debido a recomendación del mismo

AspenTech, además de que este modelo funciona muy bien con soluciones electrolíticas.

- La validación de los procesos de simulación de amoníaco y urea se logró utilizando los datos reales de condiciones de trabajo (temperatura, presión, fracciones molares y masicos) de la planta PAU, empleando informes de mantenimiento de la planta publicados por la misma empresa YPFB y cursos subidos por ingenieros que trabajaron dentro de la planta PAU.
- Ejecutando el análisis de sensibilidad a los equipos más relevantes en la PAU, se llegó a las siguientes conclusiones:
  - I. La reacción ocurrida en los reactores shift alta y baja temperatura, es una reacción exotérmica lo que significa que a medida que se aumenta la temperatura la constante de equilibrio disminuyendo. La temperatura óptima de trabajo sin catalizadores como se vio en la simulación del reactor shift de alta temperatura debe ser entre 200-300°C.
  - II. La geometría de los reactores de flujo pistón no influye significativamente en el porcentaje de conversión, lo que significa que incluso al aumentar el tamaño del reactor, no se logra una mayor obtención de amoníaco.
  - III. Se puede aumentar el porcentaje de conversión dentro de los reactores de flujo pistón al operar a mayores presiones y disminuir la temperatura.
  - IV. La presión de trabajo en los reactores flujo pistón es más relevante que la temperatura para el aumento del porcentaje de conversión.
  - V. A medida que los reactivos pasan por cada cama, se requieren mayores presiones para obtener más producto, pero también para evitar que los productos se vuelvan a convertir en reactivos.
  - VI. A medida que se aumenta la cantidad de aire introducida en el proceso de obtención de amoníaco, la producción de amoníaco aumenta notablemente, pero hasta alcanzar un límite para evitar la acumulación de nitrógeno en el circuito de producción de amoníaco.

- VII. La relación de alimentación óptima para las relaciones  $H_2/N_2$  y  $H_2O/Alimentación$  debe ser de 1,17-126.
- VIII. El porcentaje máximo del total de  $CO_2$  que se introduce a los reactores para la producción de carbamato y posteriormente de urea debe ser del 13%.
- IX. El valor óptimo de la presión de vacío en el evaporador de urea debería situarse en el rango de 0,24 a 0,30 para alcanzar una temperatura de urea fundida de alrededor de 70-75°C, lo cual es óptimo para el proceso de granulación.
- X. La simulación del proceso de obtención de amoníaco es altamente sensible a pequeños cambios, por lo que se debe tener precaución al manipularlo.

### Recomendaciones

- Se recomienda utilizar otros modelos coeficiente de actividad para comparar si los valores simuladores son iguales o cercanos a los modelos *Peng-Robinson* y Electrolyte NRTL (GMENRTL).
- Buscar información de las constantes de cinéticas de reacción para los reactores de reformación primaria y secundaria.
- Realizar una simulación de los absorbedores utilizando el software especializado de AspenTech.
- Desarrollar un trabajo de simulación para las zonas de “*recuperación*” y “*tratamiento de condensado de proceso*” de la planta de urea.
- Realizar la simulación de urea en AspenPlus por ser más especializado en sólidos como también en granulación.