

ANNEX G- SIMULACIÓ DEL PROCÉS

Índex

G.1- Introducció	3
G.2- Simulació	3
G.2.1- Alternativa 1. Recirculació del DME del primer flash a 55 bar.....	3
G.2.2- Alternativa 2. Recirculació del DME del primer flash a 80 bar.....	7
G.2.3- Alternativa 3. Recirculació de tot el DME.....	8
G.3- Bibliografia	10





G.1- Introducció

En aquest annex s'explica detalladament com s'ha dut a terme la simulació de tot el procés a partir de les diverses matèries primes. La simulació s'ha realitzat amb el simulador comercial Hysys 2.4.1 Build 3870.

S'han estudiat tres simulacions alternatives que es diferencien entre si en la manera de reciclar la matèria prima. L'objectiu d'aquestes alternatives no és trobar el procés òptim sinó que s'ha fet per intentar millorar al màxim la simulació.

A partir de la simulació del procés es poden deduir els balanços de matèria i energia de cada equip i de tot el sistema general.

G.2- Simulació [1]

En termes generals la simulació conté quatre parts ben diferenciades :

1- Mescla de les matèries primes: es mesclen l'oli, l'hidrogen i el DME i es bombegen i s'escalfen fins a l'obtenció de condicions supercrítiques.

2- Reacció: es produeix la hidrogenació parcial de l'oli de gira-sol.

3- Separació: se separa el DME i l'hidrogen per una banda i l'oli hidrogenat per una altra. La part de la separació consisteix en 2 etapes flash.

4- Recirculació: es recicla part de l'hidrogen i del DME per fer més econòmic el procés.

G.2.1- Alternativa 1. Recirculació del DME del primer flash a 55 bar

El llistat d'unitats que s'han usat per aquesta simulació es troba continuació a la taula G.1.



Equip	Nº unitats
Dipòsits de matèria prima	4
Compressors	2
Bombes	3
Intercanviadors de calor	5
Mescladors	2
Absorbidor	1
Vàlvules	3
Reactors	2
Flash	2
Dipòsit de producte final	1
Recirculació	1

Taula G.1- Llistat d'unitats de l'alternativa 1.

Els *dipòsits de matèria prima* es col·loquen en l'entorn de simulació i no requereixen cap tipus de consideració.

Els *compressors* serveixen per elevar la pressió de l'hidrogen fresc des de 30 bar fins a 80 bar i per elevar la pressió de la matèria prima reciclada (DME i hidrogen) des de 55 bar fins a 80 bar. L'únic paràmetre que cal fixar és la pressió de sortida de la corrent, la resta venen definits per defecte.

Les *bombes* es fan servir per augmentar la pressió de l'oli de gira-sol des de 1 bar fins a 150 bar, per augmentar la pressió del DME de 10 bar a 80 bar i per augmentar la pressió de la mescla oli – hidrogen – DME des de 80 bar fins a 200 bar. L'únic paràmetre que cal fixar és la pressió de sortida de la corrent, la resta venen definits per defecte.

Els *intercanviadors de calor* es simulen com a calentadors (*heaters*) o refredadors (*coolers*) segons s'hagi d'escalfar o refredar el fluid en qüestió. Els únics paràmetres que s'han de fixar són la temperatura de sortida i les pèrdues de càrrega. S'ha suposat en tot moment que les pèrdues de càrrega en els intercanviadors és 0.

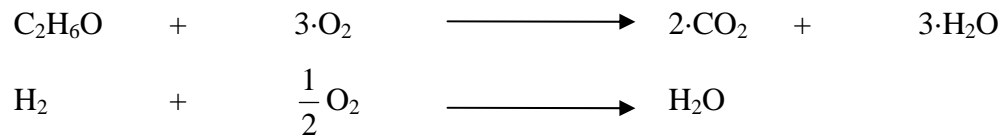
Els *mescladors* es col·loquen en l'entorn de simulació i no requereixen cap tipus de consideració. Els càlculs es fan directament sense necessitat de tocar res.



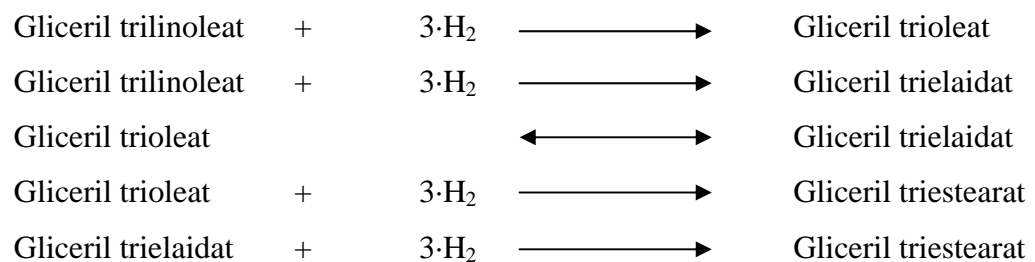
L'*absorbidor* s'ha col·locat per simular un mesclador estàtic ja que és l'objecte que més s'assembla. També s'hagués pogut fer amb un mesclador normal i els resultats obtinguts haurien sigut els mateixos. S'han buscat unes condicions d'operació de l'absorbidor favorables amb l'objectiu de què la mescla contingui certa quantitat d'hidrogen (de l'ordre d'un 6% en mols). Amb una pressió de 80 bar i a temperatura ambient s'aconsegueix una bona mescla dels tres components.

Les *vàlvules* es posen per regular els cabals a l'entrada i sortida de les etapes de separació flash. L'únic paràmetre que s'ha de fixar és l'increment de pressió que experimenta el fluid al passar a través de la vàlvula.

En aquesta alternativa es col·loquen dos *reactors*. Un dels reactors simula una cambra de combustió de residus gasosos (DME i hidrogen). Es produeixen les següents reaccions:



A l'interior de altre reactor té lloc la hidrogenació de l'oli de gira-sol. Aquest reactor s'ha simulat com un reactor de conversió ja que amb les dades cinètiques disponibles els resultats obtinguts no eren favorables. Així doncs l'estudi del reactor es realitzarà apart (Veure annex H). Les reaccions implicades en aquest cas són les següents:



El procés de separació consta de dues etapes *flash*. Els paràmetres importants que s'han de fixar són la pressió a l'entrada del flash (mitjançant la regulació de la vàlvula corresponent) i l'energia extreta (refredament). L'objectiu ha de ser obtenir la màxima quantitat de DME i d'hidrogen per caps sense arrossegar gotes d'oli. Amb la regulació de la vàlvula es pot controlar la pressió i amb l'energia extreta es controla la temperatura. Si es disminueix la pressió i la temperatura s'obtenen millors resultats en la separació.

El dipòsit de producte final es col·loca en l'entorn de simulació per guardar el producte obtingut. Es manté el dipòsit a una temperatura constant de 60 °C.

La *recirculació* de matèria prima es fa després de la primera etapa de separació flash. Com que la pressió de sortida del flash és de 55 bar es necessita posar un compressor per pujar la pressió a 80 bar per no tenir problemes a l'hora de mesclar les corrents.

El flowsheet simplificat d'aquesta alternativa es pot observar a continuació a la figura G.1.

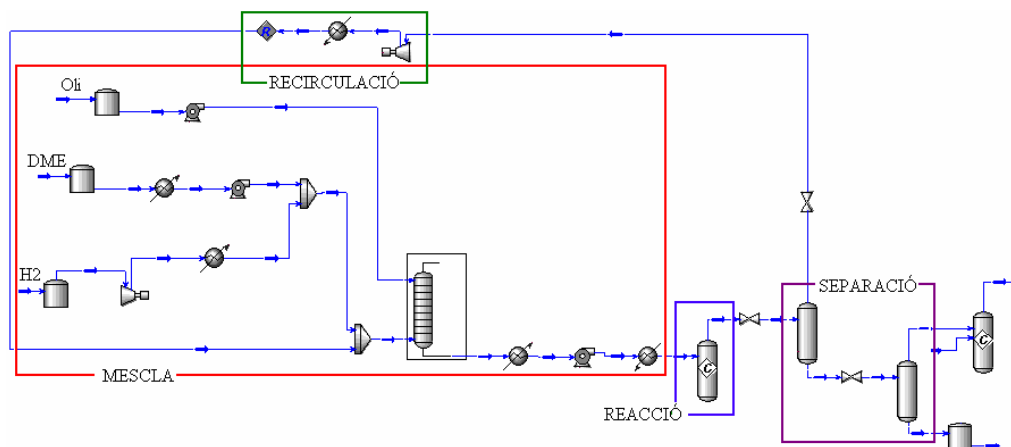


Figura G.1- Flowsheet simplificat de l'alternativa 1.



G.2.2- Alternativa 2. Recirculació del DME del primer flash a 80 bar

Les unitats que s'han fet servir per aquesta simulació es troben a continuació a la taula G.2.

Equip	Nº unitats
Dipòsits de matèria prima	3
Compressor	1
Bombes	3
Intercanviadors de calor	5
Mescladors	2
Absorbidor	1
Vàlvules	3
Reactors	2
Flash	2
Dipòsit de producte final	1
Recirculació	1

Taula G.2- Llistat d'unitats de l'alternativa 2.

Com es pot veure en el flowsheet simplificat de la figura G.2 i a la taula G.2 l'únic que canvia en aquesta alternativa és el compressor de la recirculació.

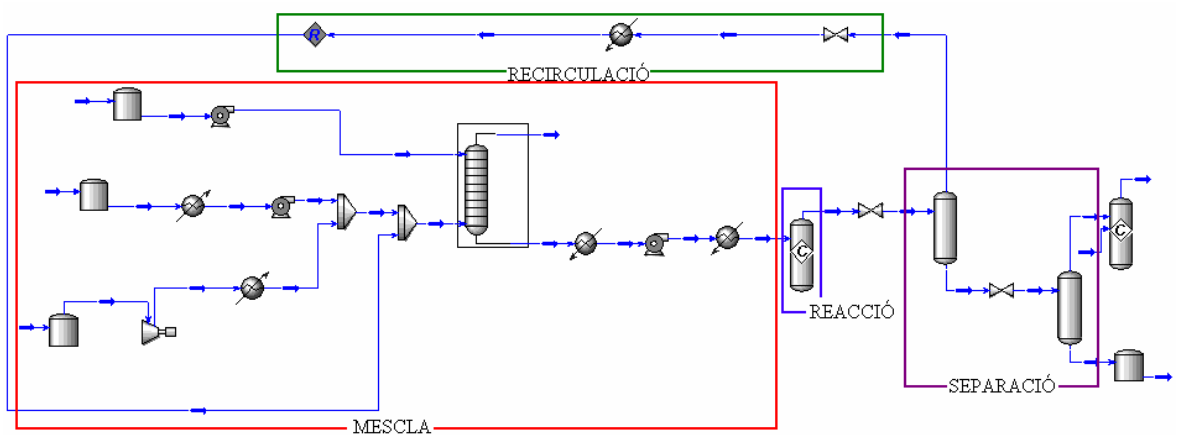


Figura G.2- Flowsheet simplificat de l'alternativa 2.



Aquesta alternativa és una millora de l'anterior ja que pel fet de canviar les condicions de pressió del flash (canvi de pressió de 55 bar a 80 bar) es necessita un compressor menys. Tot i això, al canviar la pressió del flash la recirculació de matèria prima és pitjor i per tant hi ha majors pèrdues. S'hauria de buscar un equilibri entre el cost d'inversió d'un compressor i l'estalvi anual de matèria prima que comporta l'alternativa 1.

G.2.3- Alternativa 3. Recirculació de tot el DME

Els equips que s'han fet servir per aquesta simulació es troben a continuació a la taula G.3.

Equip	Nº unitats
Dipòsits de matèria prima	3
Compressor	2
Bombes	3
Intercanviadors de calor	6
Mescladors	2
Absorbidor	1
Vàlvules	3
Reactor	1
Flash	2
Dipòsit de producte final	1
Recirculació	2

Taula G.3- Llistat d'unitats de l'alternativa 3.

La diferència principal d'aquesta última alternativa és que es reciclen dues corrents de matèria prima (el que s'obté per caps dels dos flash). En la segona recirculació es fa servir un intercanviador de calor extra. A més, ja no es necessita cap reactor que simuli la cambra de combustió dels gasos residuals perquè tots els gasos s'aprofiten. Tot això es pot observar al flowsheet de la figura G.3.



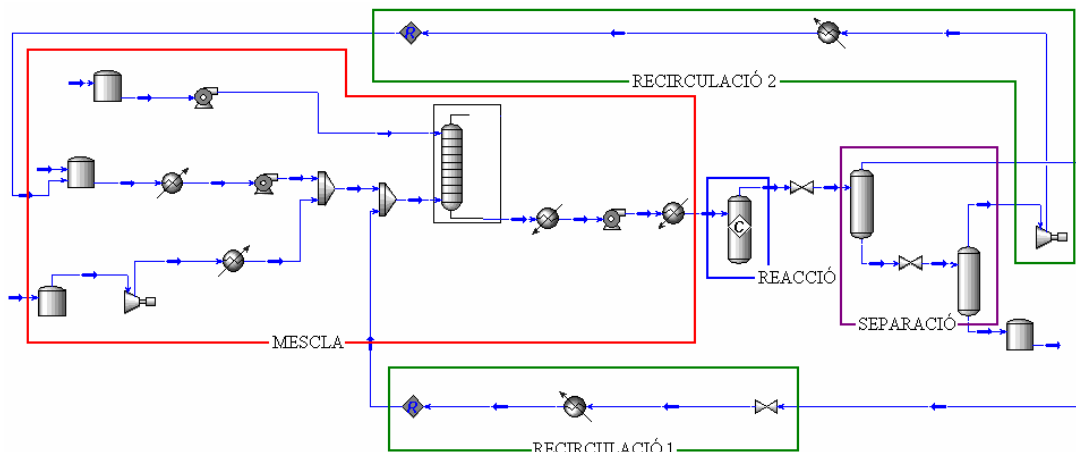


Figura G.3- Flowsheet simplificat de l'alternativa 3.

Aquesta alternativa és la que s'agafa com a simulació final ja que millora molt el reciclatge de les matèries primes. La doble recirculació només implica la necessitat d'afegir un compressor més per augmentar la pressió de la mescla reciclada de DME i hidrogen des de pressió atmosfèrica fins a 12 bar. A més, es tracta d'un compressor que treballa a baixa pressió.

La doble recirculació aconsegueix un gran estalvi en hidrogen i dimetil èter. Aquest estalvi es pot calcular fàcilment de la següent manera:

$$Estalvi = \frac{m_{necessària} - m_{fresca}}{m_{necessària}} \cdot 100 \quad (G.1)$$

$m_{necessària}$ és la massa necessària pel procés i m_{fresca} és la massa nova que s'ha d'introduir per satisfer les necessitats del procés.

Aplicant l'expressió (G.1) es pot calcular l'estalvi total d'hidrogen i de dimetil èter en tant per cent.



$$Estalvi_{H_2} = \frac{1,735 - 0,629}{1,735} \cdot 100 = 63,75\%$$

$$Estalvi_{DME} = \frac{591,363 - 0,121}{591,363} \cdot 100 = 99,98\%$$

És important destacar que l'estalvi d'hidrogen només és del 63,75% perquè una part d'aquest es gasta reaccionant amb l'oli de gira-sol per hidrogenar-lo. Pel que fa al solvent (dimetil èter) l'estalvi és molt gran ja que no reacciona en cap moment i per tant les úniques pèrdues són les originades en les dues etapes de separació flash.

Per fer les recirculacions es parteix del flowsheet normal. En el cas escollit s'han de realitzar dues recirculacions amb l'ordre que es vulgui. La manera de fer aquestes recirculacions és la següent:

- 1.- S'introdueix la unitat lògica *recycle* en l'entorn de simulació.
- 2.- Es crea una còpia de la corrent que es vol reciclar.
- 3.- Es tria la opció *solver holding* (pausa la simulació).
- 4.- S'afegeix la corrent copiada en el punt de recirculació.
- 5.- Es modifica la quantitat de matèria prima fresca perquè quadri el balanç.
- 6.- Es connecta la unitat *recycle* amb la corrent copiada.
- 7.- Es tria la opció *solver active* (activa la simulació).

Acabada la simulació es poden fer tots els balanços de matèria i d'energia així com la matriu de corrents. Els resultats es presenten a sobre dels plànols corresponents.

G.3- Bibliografia

[1] *Hysys Reference*, Version 1.0: Hyprotech Ltd. 1995

