

4. METODOLOGÍA

4.1 Selección de la mezcla

Para iniciar con las simulaciones, primero se tuvo que seleccionar la mezcla binaria a utilizar. Se hicieron pruebas con los siete primeros hidrocarburos (metano-heptano) con el fin de construir sus diagramas PT en 3 dimensiones y así poder observar el comportamiento que cada una de las mezclas tenía y ver cuál era la que mejor se ajustaba a las necesidades de la tesis. La decisión de que la mezcla fuera binaria radica en que de esta manera es posible construir las superficies en tres dimensiones donde se observen las trayectorias simuladas para fines didácticos.

Se intentó encontrar una mezcla que tuviera una separación buena en cuanto a las líneas de burbuja y de rocío. La que mejor cumplió este cometido fue la mezcla de metano y n-butano y como el objetivo de la tesis es el de licuar hidrocarburos a temperaturas criogénicas, se tomó como parte mayoritaria al metano en una fracción mol de 0.8 y al n-butano en una fracción de 0.2.

El metano se tomó como compuesto mayoritario debido a que puede alcanzar temperaturas muy bajas cuando se licúa. El metano tiene

como temperatura crítica un valor de 190.6 K (-82.55 °C) y una presión crítica de 45.38 atm (4598.12 kPa).

Para la parte complementaria de la mezcla se eligió n-butano, el cual tiene como temperatura crítica 425.1 K (151.95 °C) y una presión crítica de 37.46 atm (3796 kPa).

4.2 Método de Predicción de Propiedades

El Método de Predicción utilizado en las simulaciones fue el de Peng-Robinson.

Este método de predicción es recomendable para mezclas no polares o poco polares. En el caso de la tesis la mezcla utilizada es no polar, por lo que el método seleccionado es correcto. Como ejemplo de mezclas en las que puede ser utilizado el método se encuentran los hidrocarburos y gases ligeros.

4.3 Condensación retrógrada

Para un compuesto puro, el punto crítico es la temperatura y presión más alta a la que pueden coexistir las fases de vapor y de líquido, pero en las mezclas binarias esto no sucede, porque al cambiar la composición de la mezcla la ubicación del punto crítico varía.

Es importante mencionar que esta mezcla tiene una diferencia importante en sus volatilidades, y que sus puntos críticos de temperatura y presión, no se encuentran en la parte más alta de la curva. En un camino isoterma a través de la curva PT de equilibrio, a bajas temperaturas se llevaría a cabo un proceso de condensación (cuando se incrementa la presión) y de evaporación (cuando disminuye la presión). De la misma manera ocurre cuando se sigue un camino isóbaro, al disminuir la temperatura se condensa y al aumentar la temperatura ocurre la evaporación.

Cuando se intenta manejar una compresión isoterma esto presenta un problema grave, debido a que si se quiere comprimir un gas de manera isoterma, eligiendo como temperatura una que esté entre la temperatura máxima de punto de rocío y la temperatura crítica, el gas a comprimir se empieza a condensar una vez que su presión aumenta, la cantidad de líquido se incrementa hasta alcanzar nuevamente un valor de cero, una vez que alcanza la siguiente línea de rocío. Por lo tanto se tiene un sistema en el que cuando se le incrementa la presión se obtiene una evaporación del líquido y que cuando se tiene una disminución de presión se produce la condensación. De manera similar ocurre cuando se intenta enfriar o calentar el sistema a presión constante si es que la presión elegida se encuentra entre el punto crítico de la mezcla y la presión máxima de burbuja. Este proceso inusual de condensación y evaporación se conoce con el nombre de *condensación retrógrada*.

Este fenómeno se observa en regiones de PT, como la que se muestra en la figura 4.1, sólo si la lengua de vapor-líquido es lo suficientemente ancha para que la presión máxima de burbuja esté lejos

de la presión crítica, de igual manera la temperatura máxima de rocío con respecto a la temperatura crítica. Estos puntos máximos de presión y temperatura se denominan *cricondenbara* y *cricondenterma*.

Para eliminar este riesgo con la mezcla que se eligió, se buscaron los valores de la cricondenbara y cricondenterma, resultando lo siguiente:

$$T = 334.15 \text{ K}$$

$$P = 137.67 \text{ atm}$$

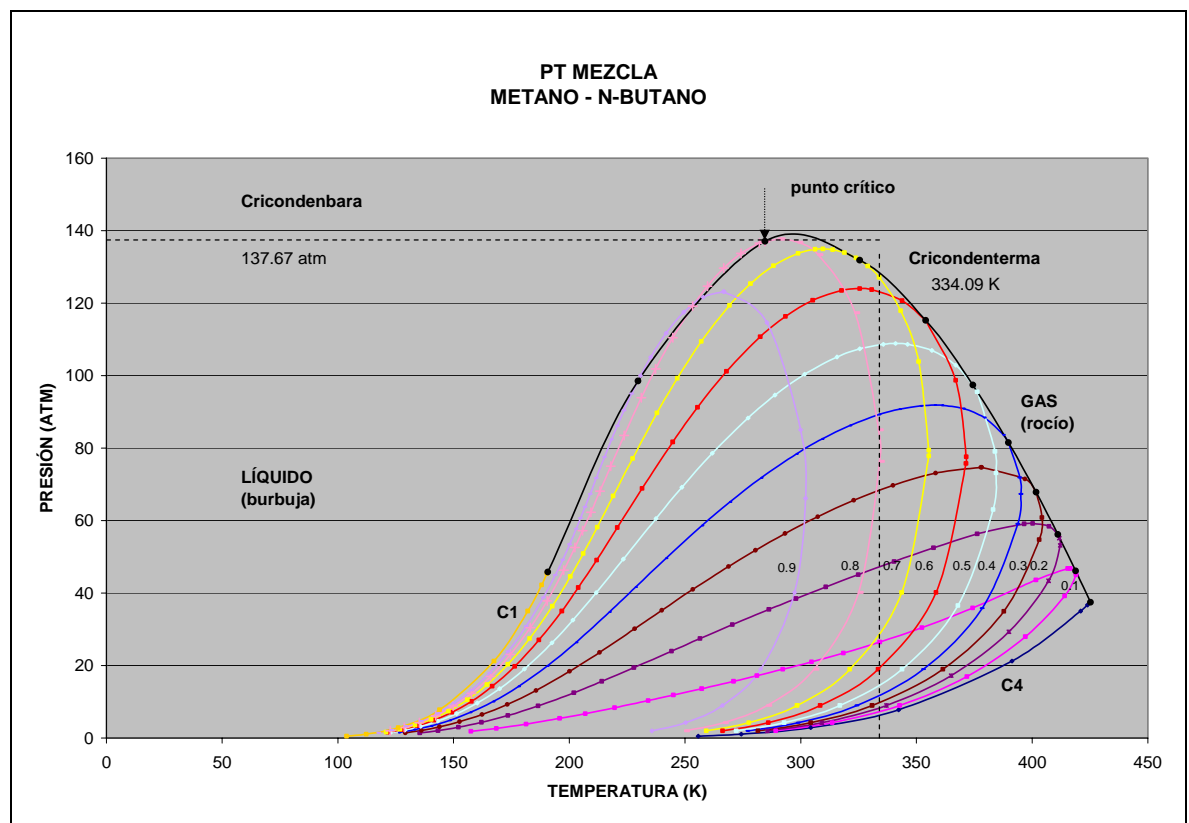


Figura 4.1. Diagrama PT de la mezcla metano/n-butano

Este problema no se presentaría en las simulaciones ni le daría problemas al compresor (de fase líquida encontrada) si sólo se manejaran

compresiones en una etapa, pero a parte de simulaciones de compresiones en una etapa se hizo uso de compresores que trabajaban por etapas, en donde se buscó un camino isoterma ya que requiere menos trabajo.

Para el caso del compresor que funciona en etapas con enfriamiento para cada una, se buscó que la temperatura de salida en los intercambiadores de calor fuera de 335 K, que es una temperatura por arriba de la cricondenterma para que no ocurriera ninguna condensación retrógrada.

La corriente de alimentación se estableció a temperatura y presión atmosférica en 300 K y 1 atm. La presión de descarga en el compresor se fijó en 245 atm, que es la presión que se utiliza en el gas natural comprimido, además de que es una presión suficientemente alta para que a partir de ella se inicien los enfriamientos a la corriente de proceso y posteriormente una expansión isoentálpica que genere una disminución en la corriente, así como la obtención de dos fases: una líquida y una gas. Y para la presión de salida de la válvula de estrangulamiento se eligió 1 atm, porque a esta presión se realiza el almacenamiento de la masa licuada, así como las recirculaciones que eran necesarias en el caso de topologías cíclicas.

4.4 Topologías seleccionadas

El objetivo de la tesis fue el de licuar la mayor cantidad posible de gas, utilizando la corriente de gas no licuada como refrigerante del gas a

alta presión. Para lograr este objetivo se utilizó como base la topología 1 de la figura 4.2, que primero se trabajó con los compuestos puros de metano y n-butano, y posteriormente se hizo uso de la mezcla en las proporciones mencionadas con anterioridad.

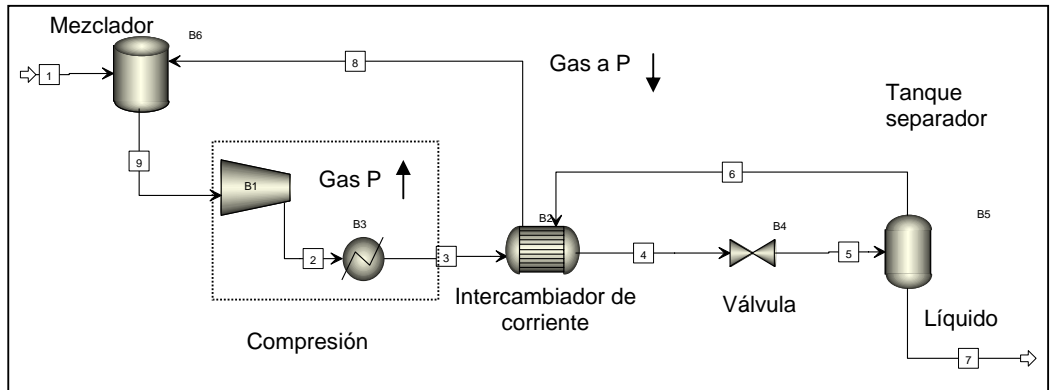


Figura 4.2. Topología 1

La topología 1 se hizo evolucionar de una topología no cíclica a una cíclica, para simular un proceso de licuefacción real, en donde el gas de baja presión que se utilizó como refrigerante regrese al sistema para ser licuado una vez que ha cumplido su objetivo de enfriar al gas de alta presión.

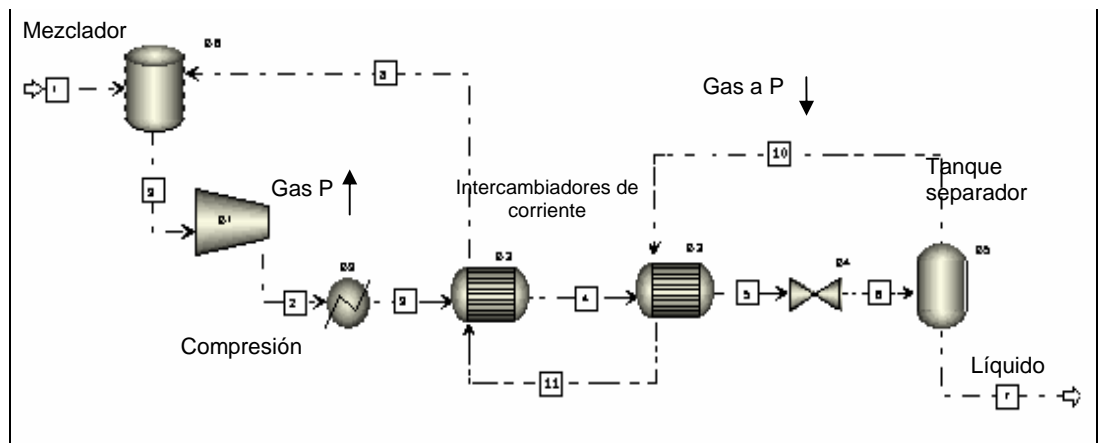


Figura 4.3. Topología 2

Se intentó lograr temperaturas muy bajas en la salida de la válvula para obtener mayor fracción licuada del gas, debido a esta situación la topología 1 representada en la figura 4.2, cambio a la topología 2 esquematizada en la figura 4.3, donde se observa un intercambiador de corriente que se añadió a la topología 1, con el fin de ayudar a aumentar el enfriamiento.

La topología 2 se modificó para obtener la topología que se muestra en la figura 4.4, donde se aumentó a la topología una turbina con el fin de disminuir la temperatura de la corriente y obtener trabajo que puede ser aprovechado.

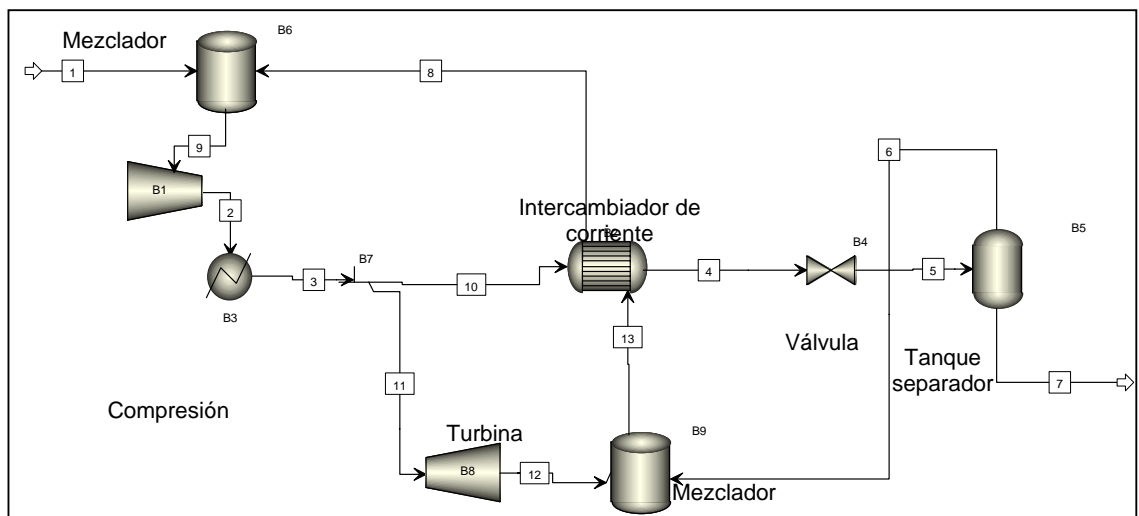


Figura 4.4. Topología 3

4.5 Simulaciones y Superficies de la mezcla

Cuando la mezcla se seleccionó, se dio inicio a las simulaciones. Primero se utilizó el simulador Hysys y luego el Aspen, se tomó esta

decisión porque el simulador Aspen presenta dificultades en su convergencia cuando se trata con ciclos y como la licuefacción es un proceso cíclico era necesario recircular si no en su totalidad la masa, la mayor parte posible, para que los resultados fueran lo más cercanos a la realidad.

En el simulador Hysys la convergencia para el ciclo de licuefacción no presentó problemas. Para que Hysys proporcione resultados va resolviendo los equipos que sean necesarios de manera individual, y este equipo especifica al siguiente y no se puede pasar al próximo si no ha sido resuelto el anterior. Cuando se usa el simulador Aspen se requiere que todos los equipos estén conectados y especificados y el simulador decide por donde empezar a calcular, es de alguna manera más autosuficiente para su funcionamiento.

Cuando fue necesario en las simulaciones de Aspen, se tuvo que modificar el número de iteraciones por hacer y el lugar por donde el simulador debería empezar a calcular. Muchas veces el simulador es capaz de llegar a los resultados deseados, pero el número de iteraciones iniciales que tiene establecidas no son suficientes para ello y es por eso que se aumentan. El cambiar el lugar donde se inician los cálculos es para facilitar el número de iteraciones a realizar.

Una vez que se hicieron todas las simulaciones y se tuvo la certeza de que las topologías estaban funcionando correctamente, se hizo uso de las superficies en tres dimensiones donde se colocaron las trayectorias que siguió la mezcla durante el proceso de licuefacción, con el fin de

tener una clara visión sobre el comportamiento de la mezcla. Las superficies utilizadas en este trabajo fueron: PTx, PHx y TSx.

Para la construcción de las trayectorias que se insertaron a las superficies se hicieron simulaciones de isóbaras, de isoentálpicas e isoentrópicas, para luego acomodar los datos en excel y de ahí pasarlos a matlab y poder graficar los caminos deseados.