

## Caso 13

### OBJETIVO

Un proceso obtiene gas de síntesis (mezclas CO/H<sub>2</sub> con pequeñas cantidades de CO<sub>2</sub>) mediante la gasificación de una fracción de petróleo a alta temperatura. La carga se precalienta hasta unos 500°C, y se alimenta al reactor mediante cantidades variables de aire y vapor de agua, ambos también precalentados a la misma temperatura. Se considera que todas las reacciones se encuentran en equilibrio y que el reactor opera a una presión de 10 bar. La caracterización de la carga es la siguiente:

Specific Gravity=0,8628

Curva de destilación D-86:

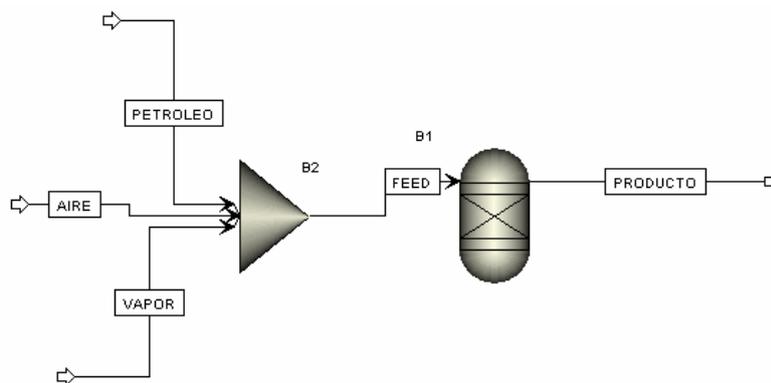
Destilado	(% vol.)	0	5	10	20	30	50	70	80	90	95	100
Temp	(°C)	248	277	289	302	311	328	342	352	361	371	379

a°) Determinar los caudales de agua y aire que serán necesarios para alcanzar una conversión superior al 99% peso de la carga y obtener un gas de síntesis con una relación molar CO/H<sub>2</sub>=2

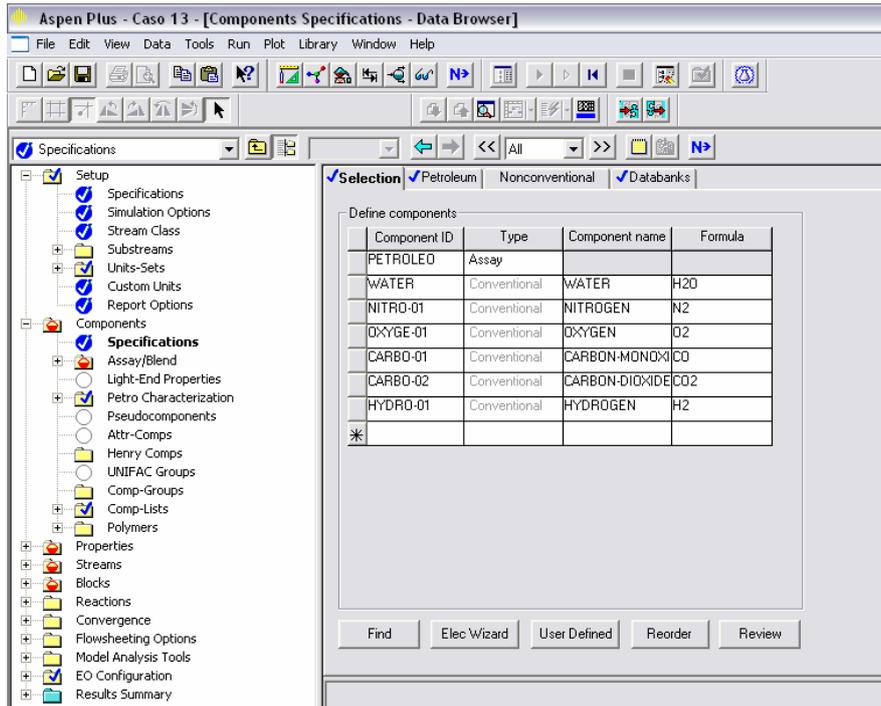
b°) ¿Cómo se modificarían los resultados anteriores si se emplea oxígeno puro en vez de aire en el gasificador?

### PROCEDIMIENTO A:

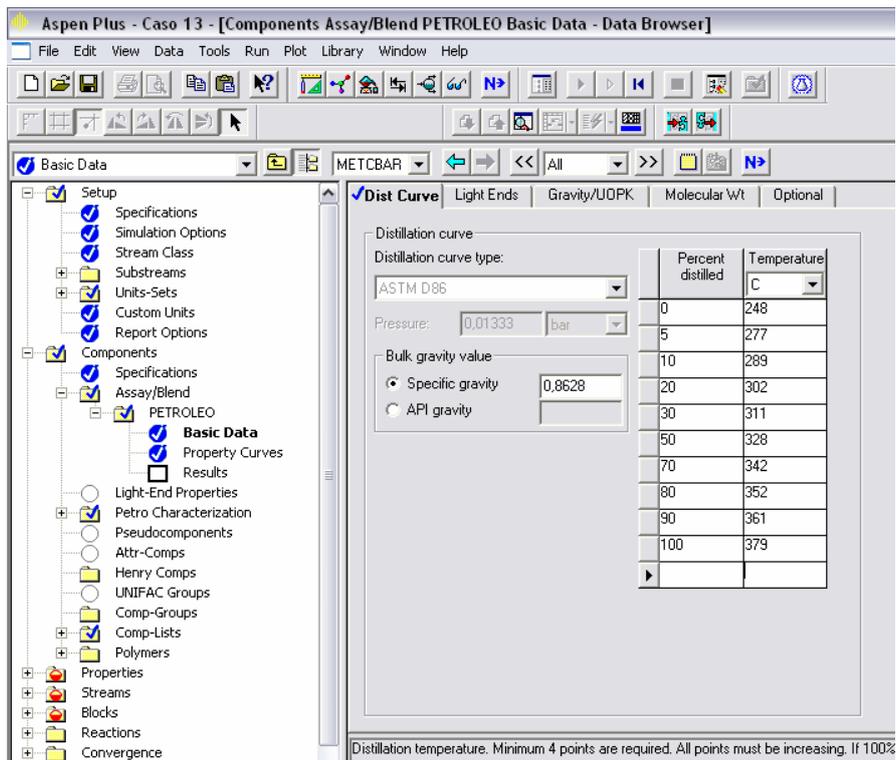
En primer lugar se dibujará el diagrama de flujo del proceso. Se ha considerado la utilización de un mezclador para alimentar al reactor la mezcla de fracción de petróleo, vapor de agua y aire. El reactor utilizado es un reactor de Gibbs, puesto que no se conoce las cinéticas de las reacciones.



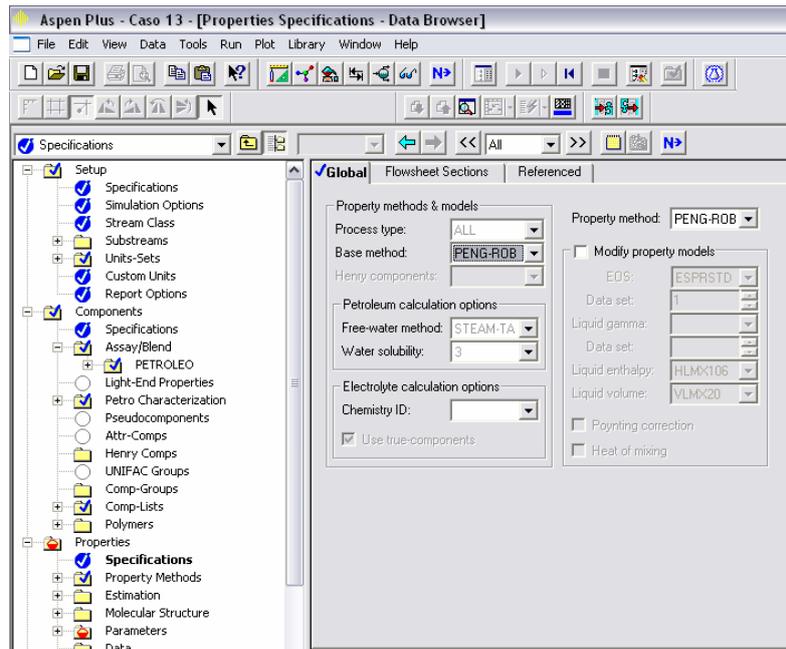
En primer lugar seleccionamos los componentes que intervienen en la simulación (Nafta, agua, nitrógeno, oxígeno, CO, H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>)



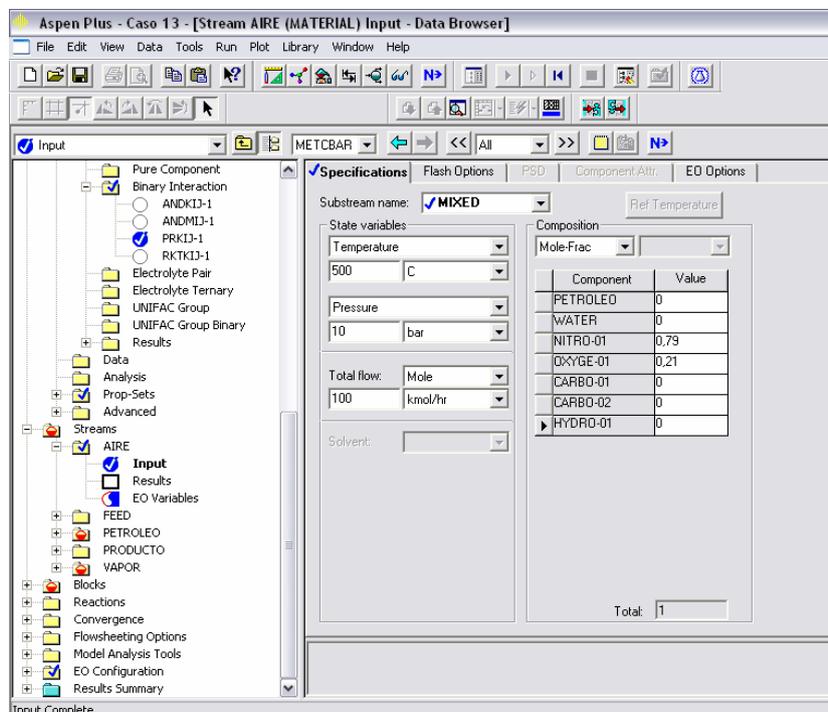
Posteriormente indicamos la curva de destilación D-86 del petróleo:

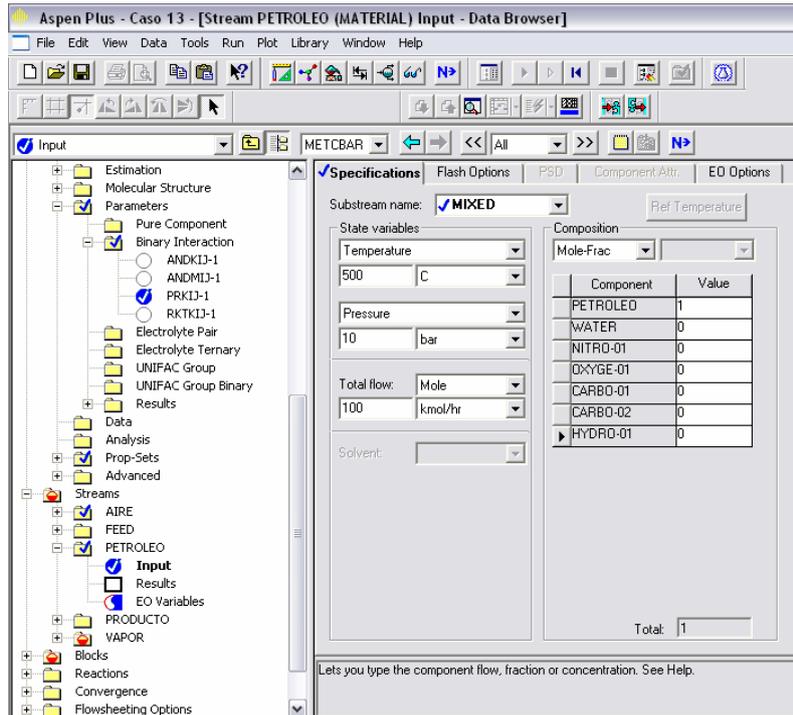


Posteriormente indicamos la base de cálculo (al tratarse de hidrocarburos: Peng-Robinson).



Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de aire ( $T=500^{\circ}\text{C}$ , presión=10 bar y 21% oxígeno, 79% Nitrógeno), vapor de agua ( $T=500^{\circ}\text{C}$ , presión=10 bar y 100% agua) y Petróleo ( $T=500^{\circ}\text{C}$ , presión=10 bar y 100% petróleo). Se considerará inicialmente un caudal de cada una de las corrientes de 100 Kmol/h. Este caudal que se ajustará posteriormente con un diseño de especificaciones al caudal necesario para conseguir las especificaciones requeridas.





Aspen Plus - Caso 13 - [Stream PETROLEO (MATERIAL) Input - Data Browser]

Substream name:  MIXED

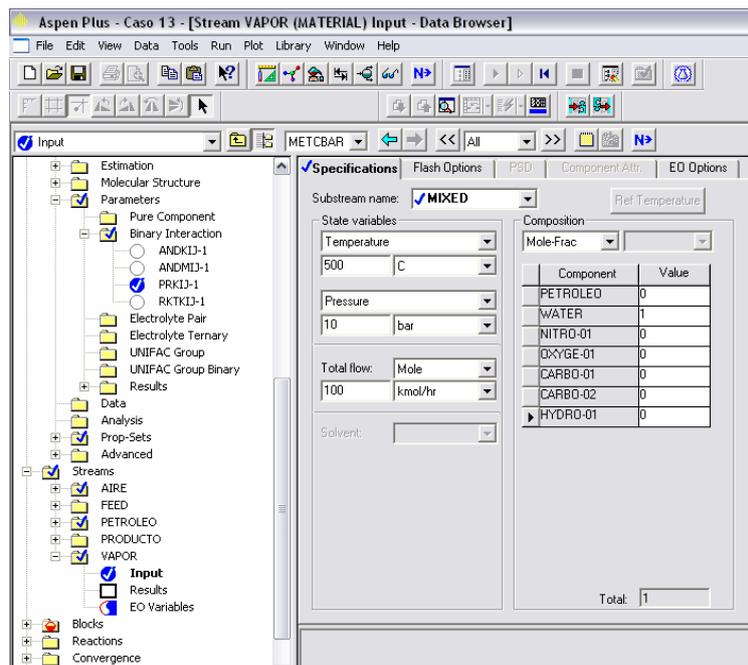
State variables:

- Temperature: 500 C
- Pressure: 10 bar
- Total flow: 100 kmol/hr

Composition:

Component	Value
PETROLEO	1
WATER	0
NITRO-01	0
OXYGE-01	0
CARBO-01	0
CARBO-02	0
HYDR0-01	0

Total: 1



Aspen Plus - Caso 13 - [Stream VAPOR (MATERIAL) Input - Data Browser]

Substream name:  MIXED

State variables:

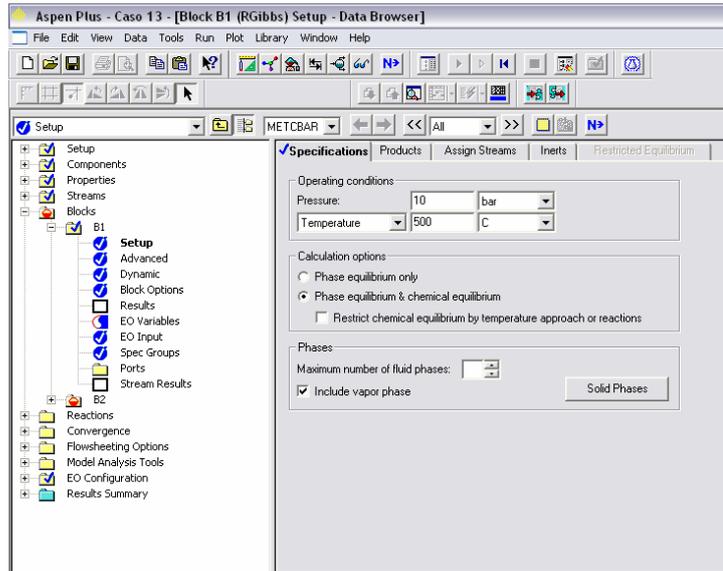
- Temperature: 500 C
- Pressure: 10 bar
- Total flow: 100 kmol/hr

Composition:

Component	Value
PETROLEO	0
WATER	1
NITRO-01	0
OXYGE-01	0
CARBO-01	0
CARBO-02	0
HYDR0-01	0

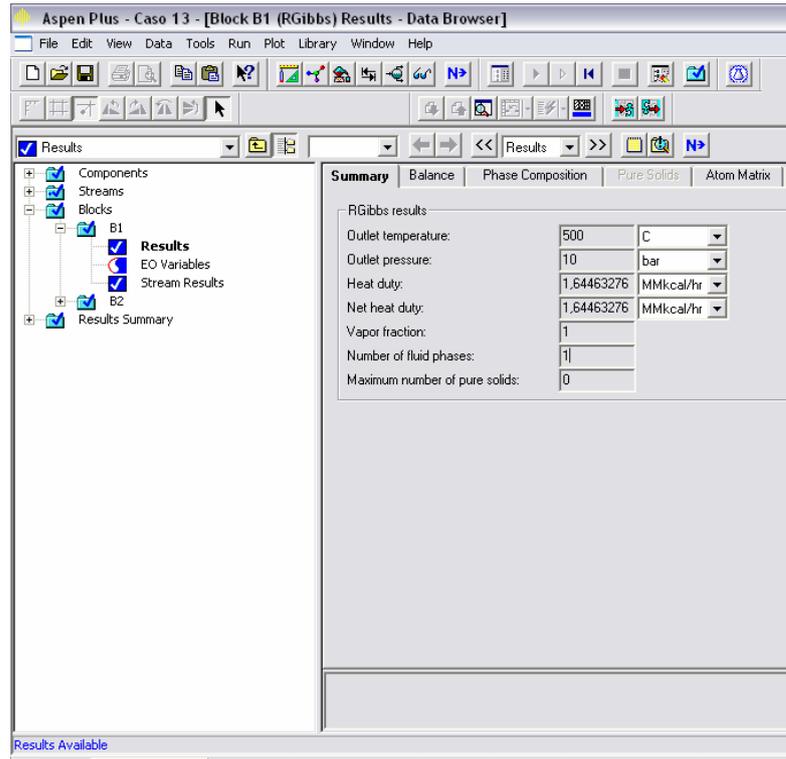
Total: 1

Posteriormente indicamos las condiciones del reactor (500 °C y 10bar de presión).

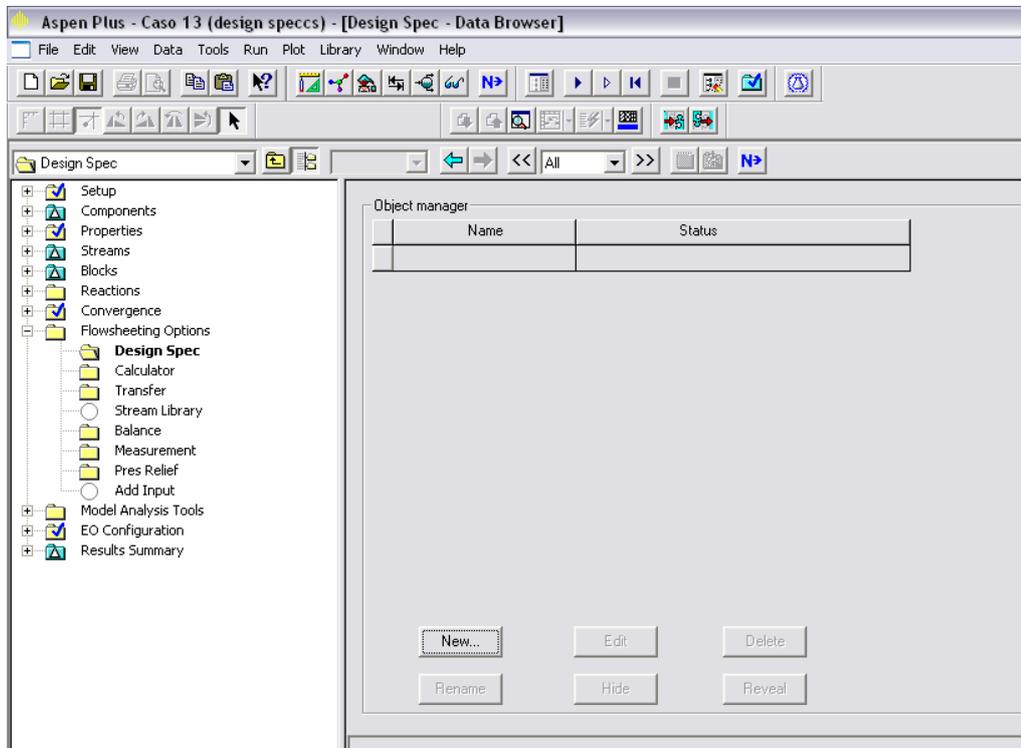


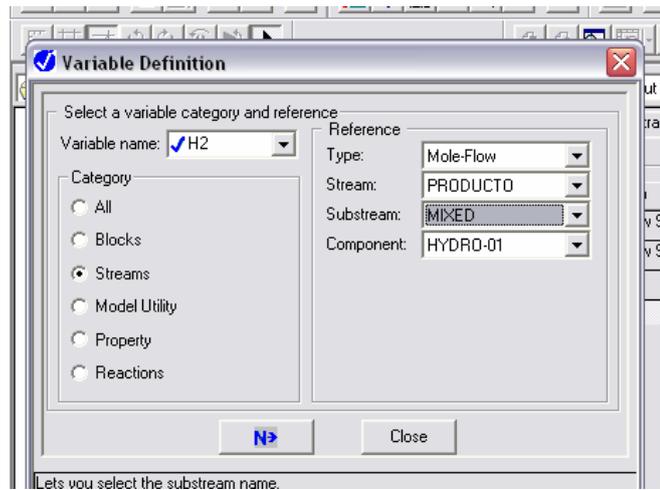
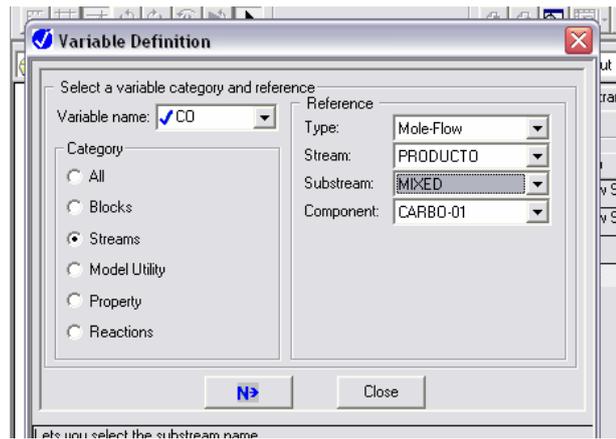
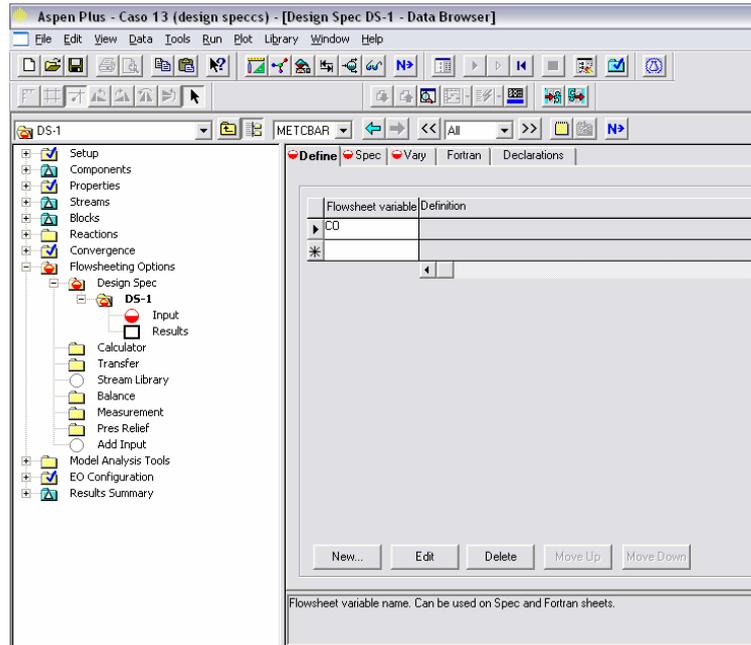
Los resultados obtenidos con estas condiciones preliminares son:

Caso 13						
Stream ID		AIRE	FEED	PETROLEO	PRODUCTO	VAPOR
Temperature	C	500,0	493,6	500,0	500,0	500,0
Pressure	bar	10,000	10,000	10,000	10,000	10,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	300,000	100,000	458,527	100,000
Mass Flow	kg/hr	2885,040	31420,794	26734,226	31420,794	1801,528
Volume Flow	cum/hr	644,808	1847,530	435,410	2934,676	636,854
Enthalpy	MMkcal/hr	0,343	-8,694	-3,661	-7,050	-5,376
Mole Flow	kmol/hr					
WATER			100,000		13,533	100,000
NITRO-01		79,000	79,000		79,000	
OXYGE-01		21,000	21,000		trace	
CARBO-01					63,463	
CARBO-02					32,502	
HYDRO-01					133,326	
PC215C			0,839	0,839	39,369	
PC225C			2,005	2,005	42,695	
PC239C			2,299	2,299	23,090	
PC254C			2,909	2,909	12,880	
PC267C			5,086	5,086	8,082	
PC281C			6,692	6,692	10,357	
PC295C			9,655	9,655	0,139	
PC309C			10,519	10,519	0,054	
PC323C			10,637	10,637	0,021	
PC337C			12,151	12,151	0,009	
PC350C			12,434	12,434	0,004	
PC364C			10,059	10,059	0,001	
PC377C			8,514	8,514	0,001	
PC392C			5,783	5,783	< 0,001	
PC399C			0,418	0,418	< 0,001	



Para ajustar que la conversión sea superior al 99% en peso de la carga y que la relación CO/H<sub>2</sub> se realizarán los dos diseños de especificaciones indicados a continuación:





Aspen Plus - Caso 13 (design specs) - [Design Spec DS-1 - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

DS-1 METCBAR Input

Define
  Spec
  Vary
 Fortran
 Declarations

Flowsheet variable	Definition
CO	Mole-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=CARBO-01
H2	Mole-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=HYDRO-01
*	

New... Edit Delete Move Up Move Down

Design Spec DS-1 - Data Browser

DS-1 METCBAR Input

Define
  Spec
  Vary
 Fortran
 Declarations

Design specification expressions

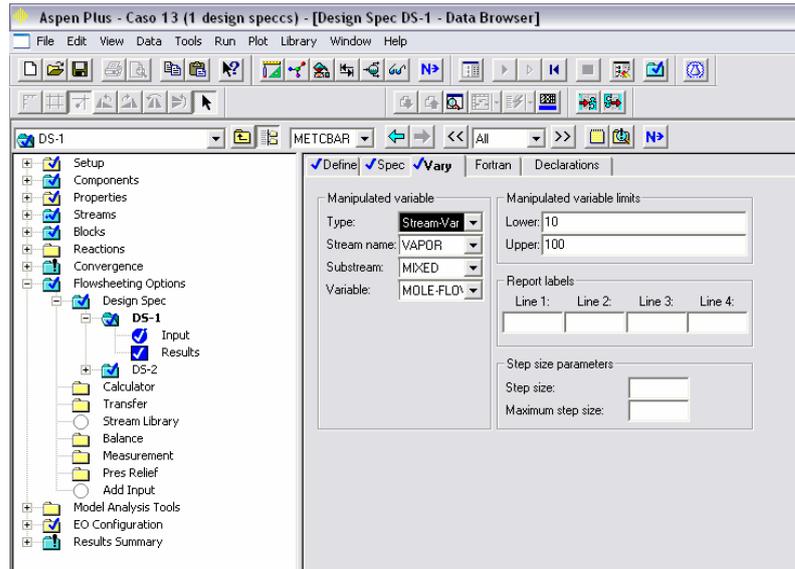
Spec: CO/H2

Target: 2

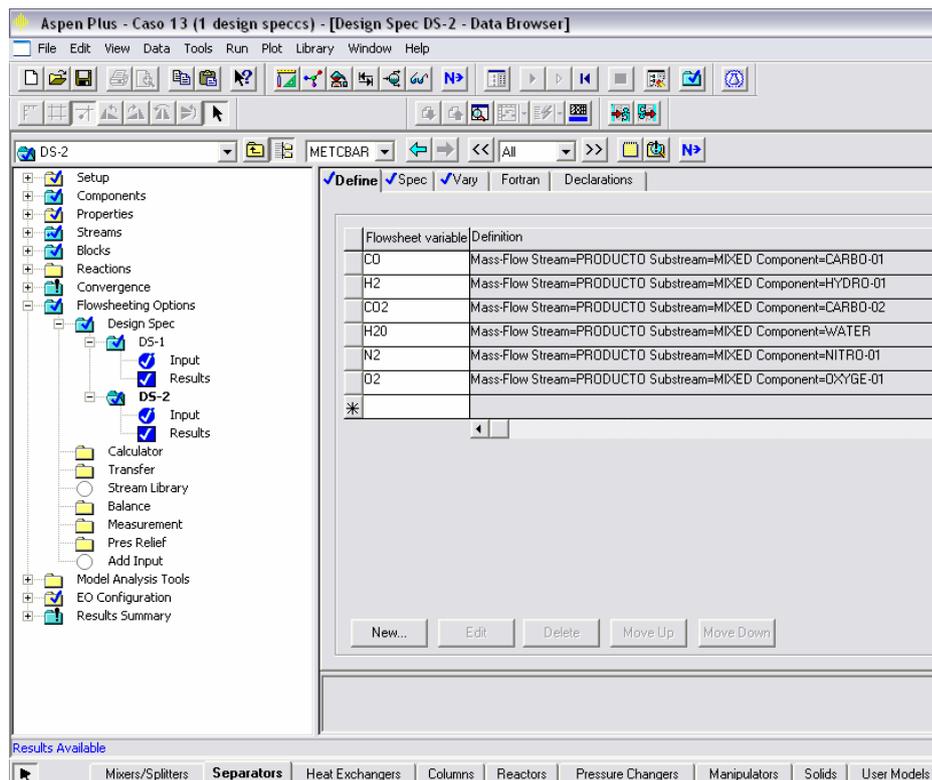
Tolerance: 0.1

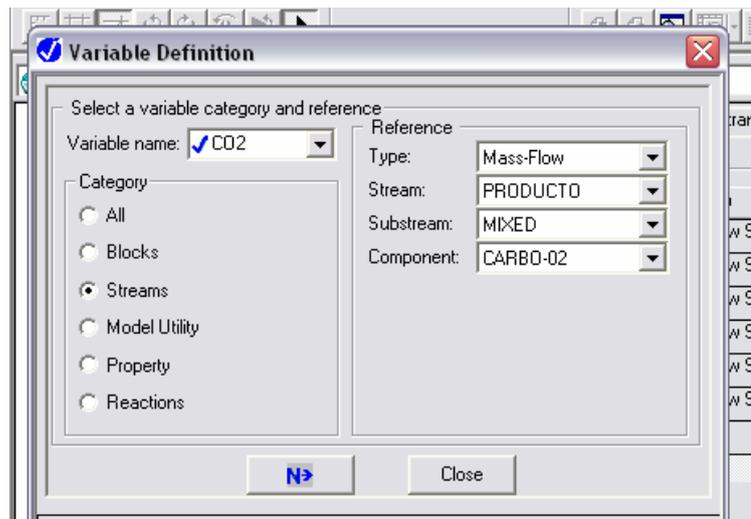
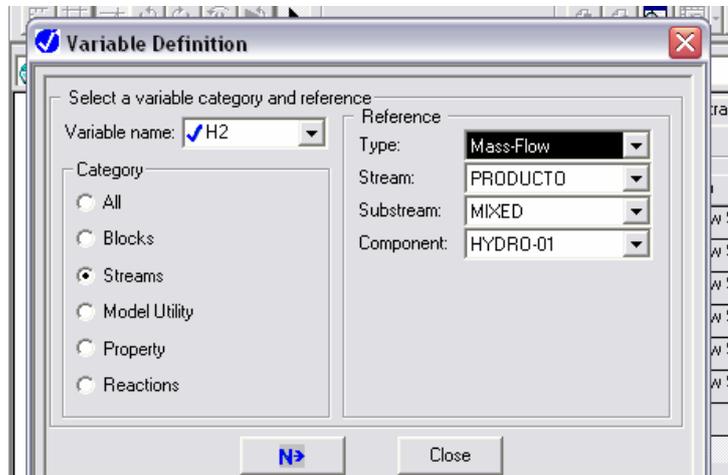
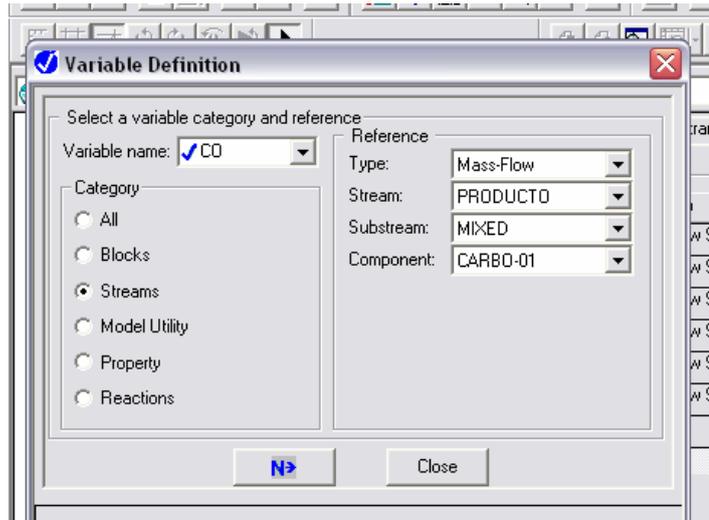
Specification. Constant, or Fortran expression in terms of Flowsheet vars on Define / Fortran sheets. Right-click to select Variable List, then use drag-and-drop to copy variables defined on Define sheets.

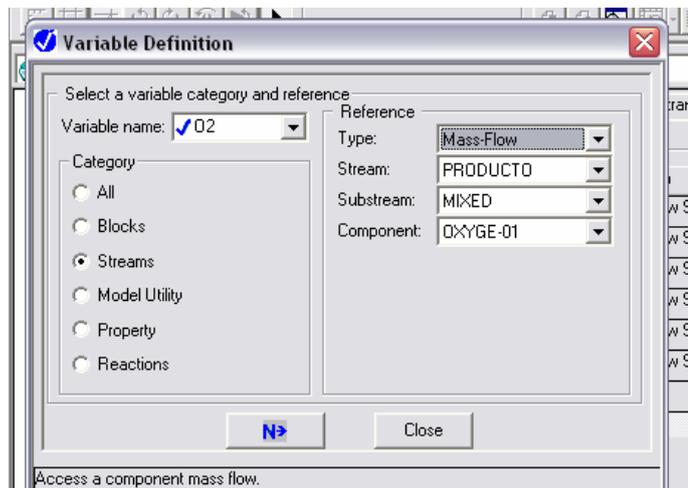
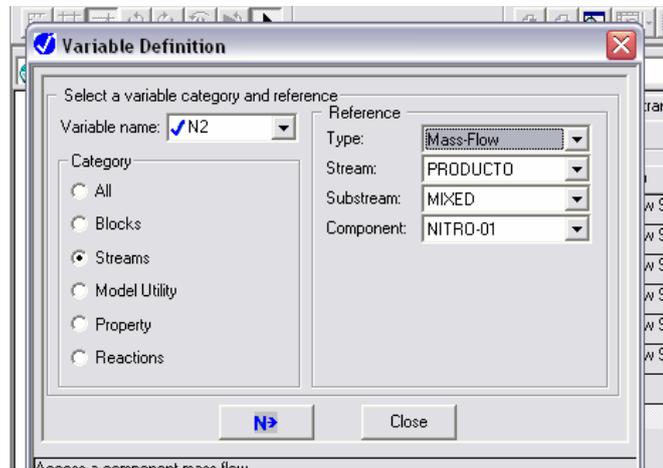
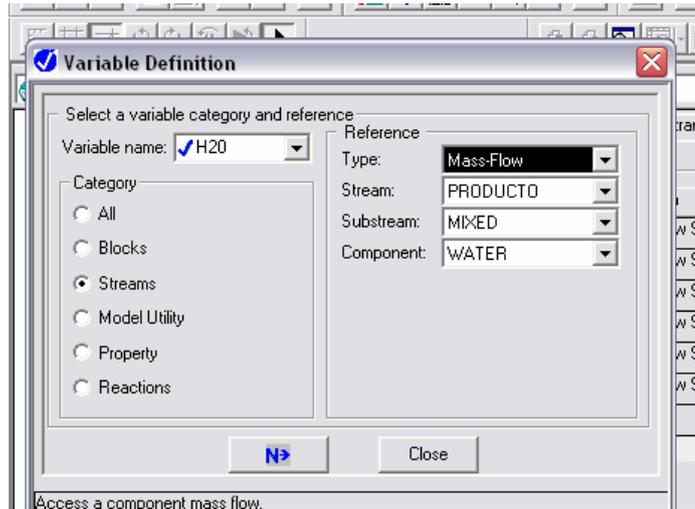
Required Input Incomplete

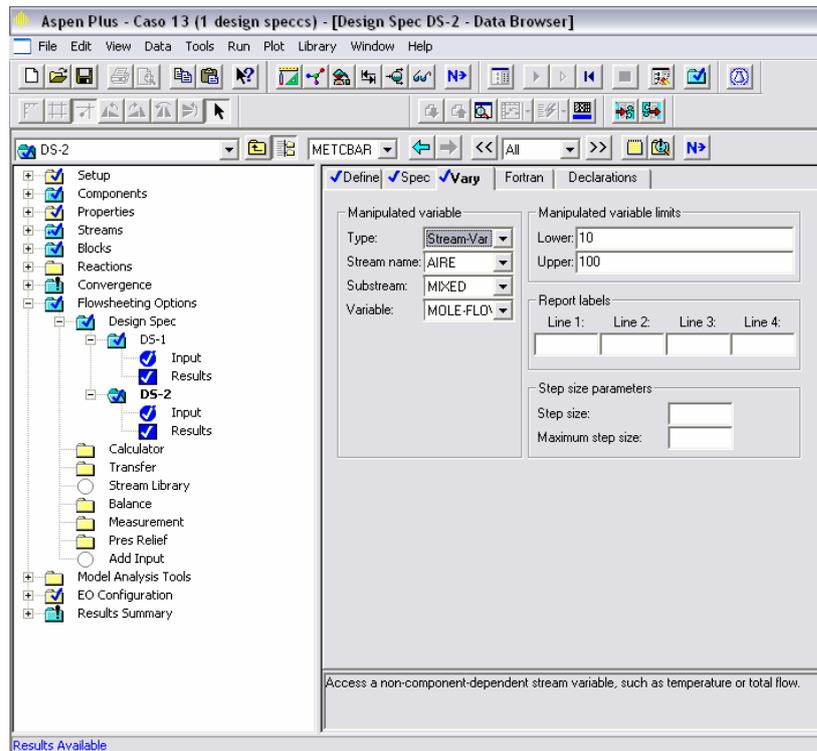
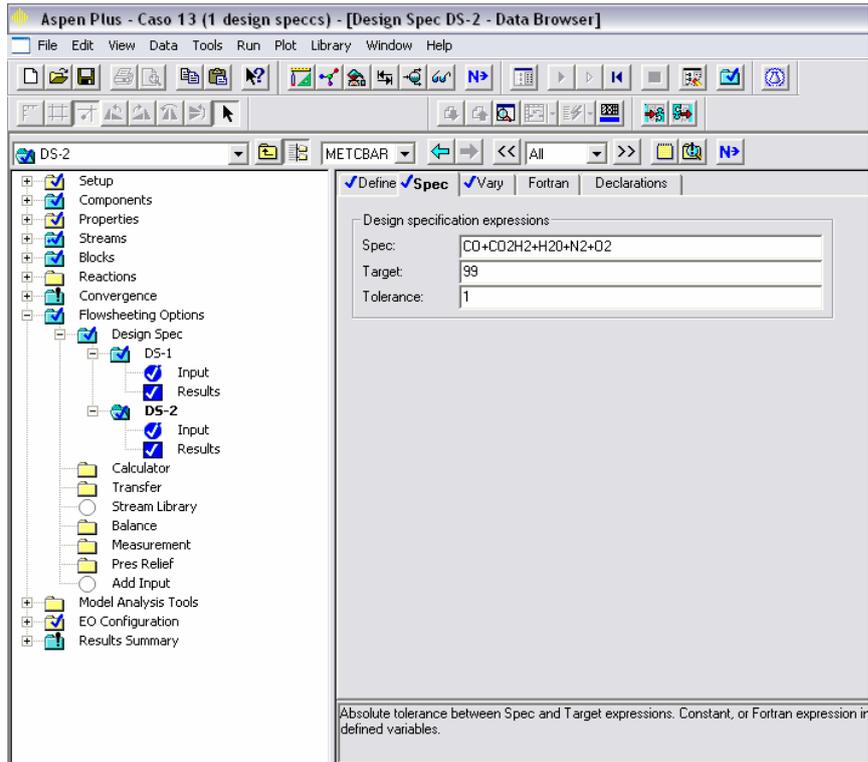


Para realizar la especificación de conversión, consideraremos que la suma de todos los productos, que no son petróleo, sea igual a 99 (ya que la carga inicial es de 100). Se procede de la siguiente manera:









Los resultados obtenidos son:

Aspen Plus - Caso 13 (1 design speccs) - [Block B1 (RGibbs) Results - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Results

Components  
Streams  
Blocks  
B1 Results  
EO Variables  
Stream Results  
B2  
Convergence  
Flowsheeting Options  
Results Summary

Summary Balance Phase Composition Pure Solids Atom Matrix Keq

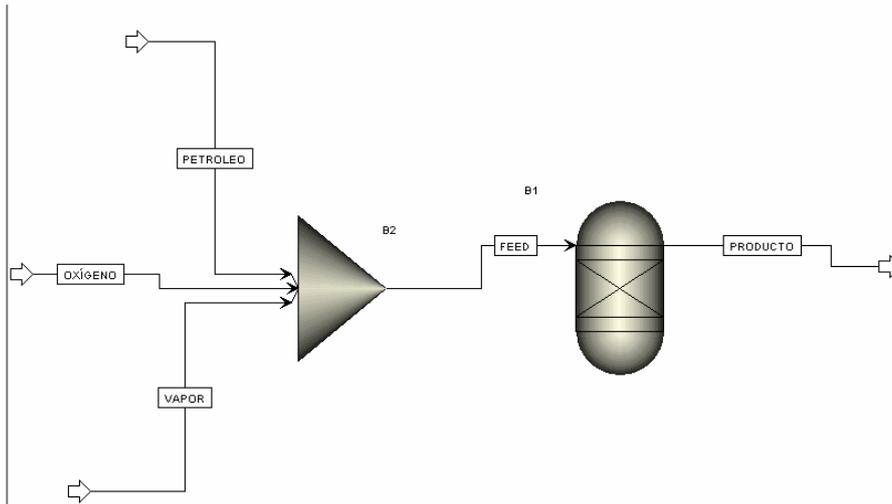
RGibbs results

Outlet temperature:	500	C
Outlet pressure:	10	bar
Heat duty:	1,30213699	MMkcal/hr
Net heat duty:	1,30213699	MMkcal/hr
Vapor fraction:	1	
Number of fluid phases:	1	
Maximum number of pure solids:	0	

Caso 13						
Stream ID		AIRE	FEED	PETROLEO	PRODUCTO	VAPOR
Temperature	C	500,0	496,9	500,0	500,0	500,0
Pressure	bar	10,000	10,000	10,000	10,000	10,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	10,000	130,989	100,000	180,775	20,989
Mass Flow	kg/hr	288,504	27400,851	26734,226	27400,851	378,121
Volume Flow	cum/hr	64,481	693,408	435,410	1074,797	133,669
Enthalpy	MMkcal/hr	0,034	-4,755	-3,661	-3,453	-1,128
Mole Flow	kmol/hr					
WATER			20,989		0,208	20,989
NITRO-01		7,900	7,900		7,900	
OXYGE-01		2,100	2,100		trace	
CARBO-01					20,999	
CARBO-02					1,991	
HYDRO-01					10,746	
PC215C			0,839	0,839	19,290	
PC225C			2,005	2,005	58,043	
PC239C			2,299	2,299	22,822	
PC254C			2,909	2,909	10,064	
PC267C			5,086	5,086	5,150	
PC281C			6,692	6,692	22,873	
PC295C			9,655	9,655	0,412	
PC309C			10,519	10,519	0,151	
PC323C			10,637	10,637	0,062	
PC337C			12,151	12,151	0,033	
PC350C			12,434	12,434	0,017	
PC364C			10,059	10,059	0,006	
PC377C			8,514	8,514	0,003	
PC392C			5,783	5,783	0,001	
PC399C			0,418	0,418	0,001	
Mole Frac						
WATER			0,160		0,001	1,000
NITRO-01		0,790	0,060		0,044	
OXYGE-01		0,210	0,016		trace	
CARBO-01					0,116	
CARBO-02					0,011	
HYDRO-01					0,059	
PC215C			0,006	0,008	0,107	
PC225C			0,015	0,020	0,321	
PC239C			0,018	0,023	0,126	
PC254C			0,022	0,029	0,056	
PC267C			0,039	0,051	0,028	
PC281C			0,051	0,067	0,127	
PC295C			0,074	0,097	0,002	
PC309C			0,080	0,105	837 PPM	
PC323C			0,081	0,106	346 PPM	
PC337C			0,093	0,122	181 PPM	
PC350C			0,095	0,124	95 PPM	
PC364C			0,077	0,101	36 PPM	
PC377C			0,065	0,085	18 PPM	
PC392C			0,044	0,058	6 PPM	
PC399C			0,003	0,004	5 PPM	

**PROCEDIMIENTO B:**

Si en lugar de aire utilizamos oxígeno puro debemos de eliminar el compuesto nitrógeno de la simulación, y cambiar la corriente aire por oxígeno. Además en el Desing Spec, ya no tenemos que indicar el nitrógeno.



Aspen Plus - Caso 13 (b) - [Components Specifications - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Specifications

Selection
  Petroleum
  Nonconventional
  Databanks

Define components

Component ID	Type	Component name	Formula
PETROLEO	Assay		
WATER	Conventional	WATER	H2O
OXYGE-01	Conventional	OXYGEN	O2
CARBO-01	Conventional	CARBON-MONOXI	CO
CARBO-02	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
HYDRO-01	Conventional	HYDROGEN	H2
*			

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Aspen Plus - Caso 13 (b) - [Stream OXÍGENO (MATERIAL) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

OXÍGENO METCBAR

**Specifications** Flash Options PSD Component Attr. EO Options

Substream name: **MIXED** Ref Temperature

State variables

Temperature: 500 C

Pressure: 10 bar

Total flow: Mole  
100 kmol/hr

Solvent:

Composition

Component	Value
PETROLEO	0
WATER	0
OXÍGENO-01	1
CARBO-01	0
CARBO-02	0
HYDRO-01	0

Total: 1

Aspen Plus - Caso 13 (b) - [Design Spec DS-2 - Data Browser]

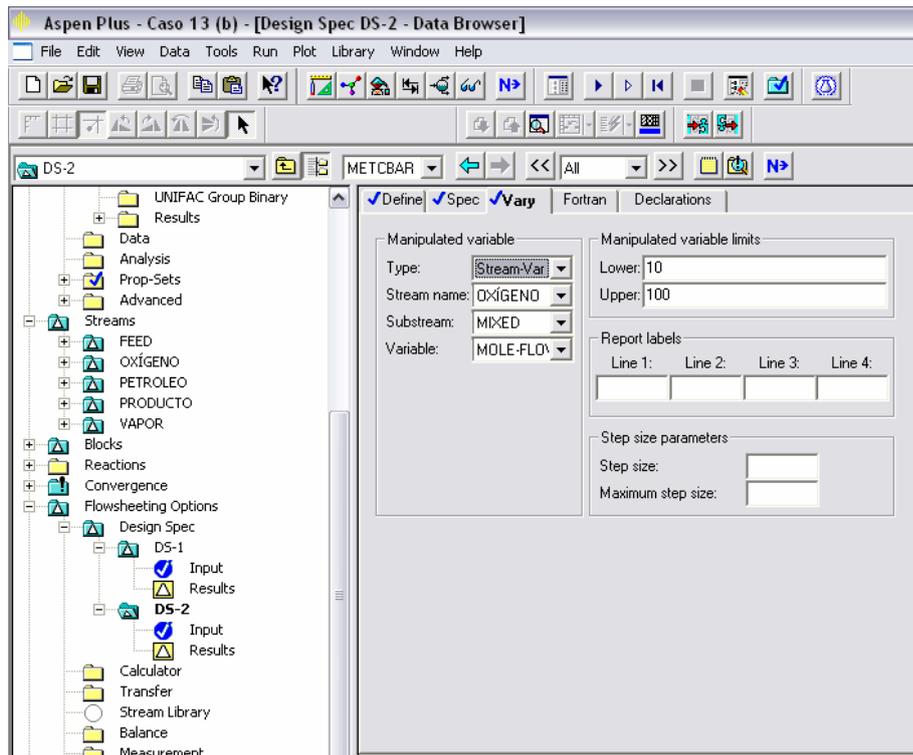
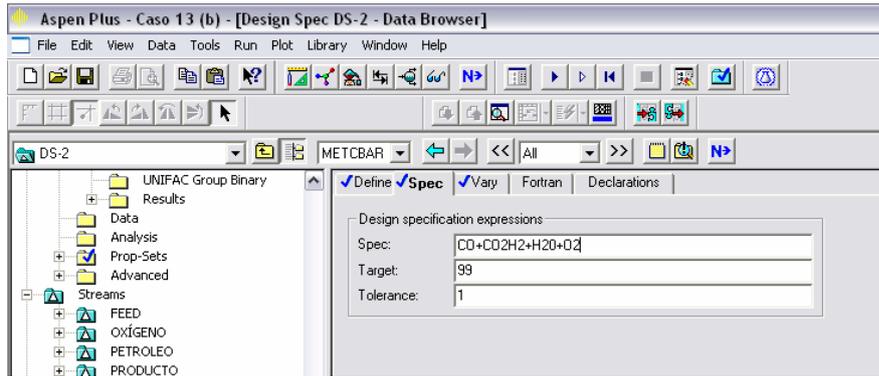
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

DS-2 METCBAR

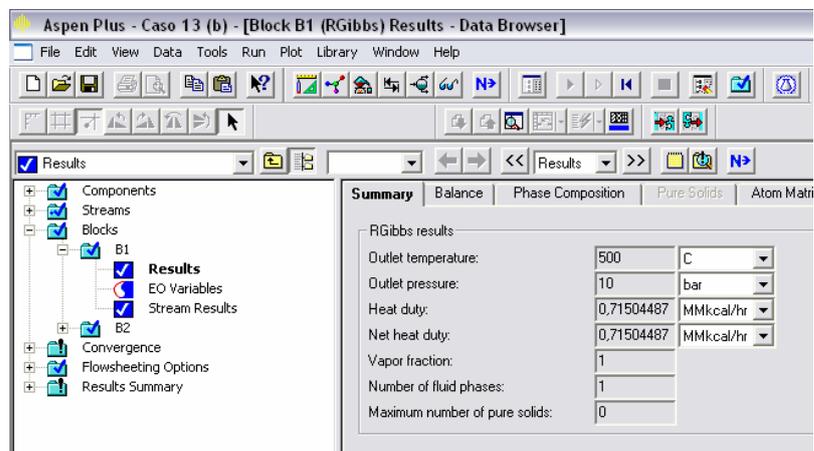
**Define** Spec Vary Fortran Declarations

Flowsheet variable	Definition
CO	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=CARBO-01
H2	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=HYDRO-01
CO2	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=CARBO-02
H2O	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=WATER
O2	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=OXÍGENO-01
*	

New... Edit Delete Move Up Move Down



Los resultados obtenidos son:



Caso 13						
Stream ID		FEED	OXIGENO	PETROLEO	PRODUCTO	VAPOR
Temperature	C	497,1	500,0	500,0	500,0	500,0
Pressure	bar	10,000	10,000	10,000	10,000	10,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	127,347	10,000	100,000	185,622	17,347
Mass Flow	kg/hr	27366,719	319,988	26734,226	27366,719	312,506
Volume Flow	cum/hr	665,909	64,422	435,410	1110,039	110,473
Enthalpy	MMkcal/hr	-4,558	0,036	-3,661	-3,843	-0,933
Mole Flow	kmol/hr					
WATER		17,347			0,451	17,347
OXYGE-01		10,000	10,000		trace	
CARBO-01					28,086	
CARBO-02					4,405	
HYDRO-01					14,079	
PC215C		0,839		0,839	21,622	
PC225C		2,005		2,005	55,699	
PC239C		2,299		2,299	23,213	
PC254C		2,909		2,909	10,713	
PC267C		5,086		5,086	5,710	
PC281C		6,692		6,692	21,033	
PC295C		9,655		9,655	0,365	
PC309C		10,519		10,519	0,137	
PC323C		10,637		10,637	0,056	
PC337C		12,151		12,151	0,029	
PC350C		12,434		12,434	0,015	
PC364C		10,059		10,059	0,006	
PC377C		8,514		8,514	0,003	
PC392C		5,783		5,783	0,001	
PC399C		0,418		0,418	0,001	
Mole Frac						
WATER		0,136			0,002	1,000
OXYGE-01		0,079	1,000		trace	
CARBO-01					0,151	
CARBO-02					0,024	
HYDRO-01					0,076	
PC215C		0,007		0,008	0,116	
PC225C		0,016		0,020	0,300	
PC239C		0,018		0,023	0,125	
PC254C		0,023		0,029	0,058	
PC267C		0,040		0,051	0,031	
PC281C		0,053		0,067	0,113	
PC295C		0,076		0,097	0,002	
PC309C		0,083		0,105	736 PPM	
PC323C		0,084		0,106	303 PPM	
PC337C		0,095		0,122	157 PPM	
PC350C		0,098		0,124	82 PPM	
PC364C		0,079		0,101	30 PPM	
PC377C		0,067		0,085	15 PPM	
PC392C		0,045		0,058	5 PPM	
PC399C		0,003		0,004	4 PPM	

CONCLUSIONES:

Los caudales de agua y/o aire necesarios para obtener un gas de síntesis con una relación  $\text{CO}/\text{H}_2=2$  y una conversión del 99% de la carga inicial se muestran en la siguiente tabla.

<b>Caso</b>	<b>Agua (Kmol/h)</b>	<b>Aire/Oxígeno (Kmol/h)</b>
<b>Aire</b>	20,989	10
<b>Oxígeno puro</b>	17,374	10

Como podemos observar al utilizar oxígeno puro se disminuye la cantidad de vapor de agua necesaria para producir la reacción.