

procesos - investigación

Simulación de Procesos: Aplicación al diseño de una planta de agua pesada

POR ING. EDUARDO CAO, ING. PATRICIA SUAREZ Y LIC. JULIO
PANTALEON (UBA, DEPTO. INGENIERIA QUIMICA-
CNEA, Dirección Proyectos Agua Pesada)

"Los programas de simulación son en la actualidad una herramienta de gran utilidad para el ingeniero de procesos. Normalmente se asocia la simulación de un proceso químico con programas de tipo modular desarrollados por empresas especializadas que emplean gran cantidad de subrutinas y a los cuales es difícil tener acceso. Sin embargo, a veces es posible desarrollar programas más simples que pueden ser adaptados para manejar diagramas de proceso complejos. El programa que se presenta en este trabajo fue originalmente desarrollado para calcular una columna de destilación de platos. Con algunas adaptaciones, pudo ser utilizado en la CNEA para simular la operación de una planta de agua pesada por el proceso sulfhídrico-agua."

Se utilizó en este trabajo un programa de cálculo de balances de materia y entalpías en columnas de platos (*).

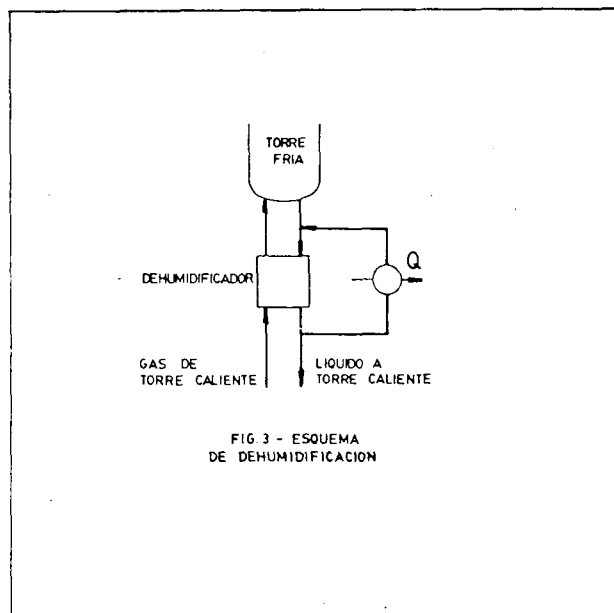
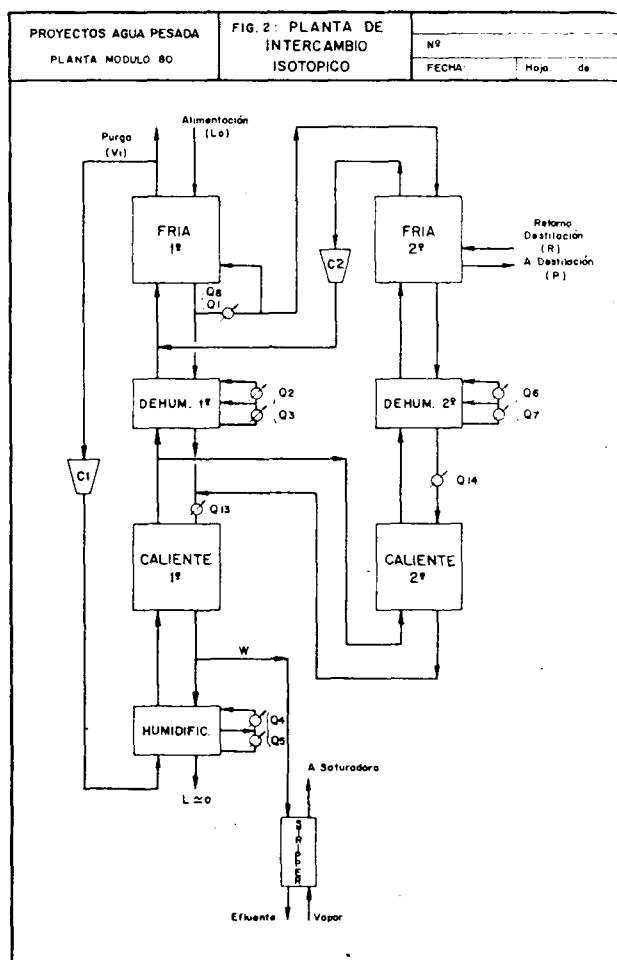
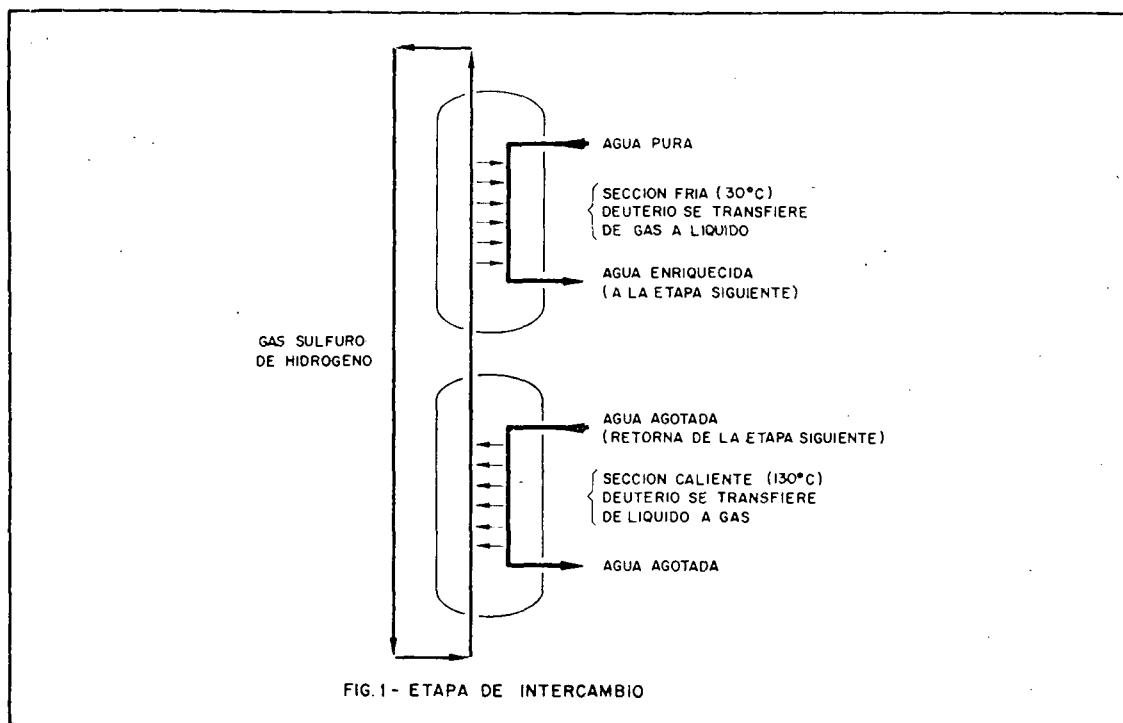
El programa está basado en el método de Tomich-Broyden (1) y permite las siguientes posibilidades:

- Alimentación en cada plato
- Cargas de calor en cada plato
- Extracciones laterales en cada plato
- Reciclos y by-passes con o sin intercambio de calor
- Strippers laterales
- Especificaciones de performance

Esta última característica (especificaciones de performance) consiste en la posibilidad de dar como dato al programa determinadas condiciones que debe cumplir el equipo en operación (por ejemplo, valores determinados en las temperaturas o en los caudales de líquido y vapor en algunos platos). Por cada especificación realizada se debe dar al sistema un grado de libertad (por ejemplo, la cantidad de calor a entregar o extraer en algún plato o reciclo). El programa, entonces, calculará el valor de esta variable de forma tal que se logre el objetivo propuesto. Esta posibilidad que brinda el programa permite una gran flexibilidad para realizar la simulación de sistemas complejos, como se verá más adelante.

Aplicación al proceso de producción de agua pesada

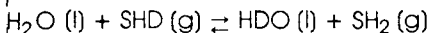
El agua pesada, utilizada como moderador en los reactores de uranio natural, tiene una molécula en la que se han sustituido uno o los dos átomos de hidrógeno por el isótopo deuterio. El agua pesada se encuentra en una concentración 0.015% molar en deuterio en el agua natural. Para poder ser utilizada en los reactores se la debe concentrar hasta 99.8%. Esto se realiza mediante dos procesos de



concentración. El primero, en el que se lleva desde 0.015% a 15 %, es el proceso agua-sulfhídrico (2) de intercambio isotópico entre agua y sulfuro de hidrógeno. El segundo proceso, en el que se llega al grado reactor, es una destilación al vacío. La parte más costosa de la planta está constituida por el proceso GS.

Descripción del proceso

La separación de isótopos del hidrógeno está determinada por el equilibrio:



La constante de esta reacción indica un desplazamiento hacia la derecha a bajas temperaturas y en forma inversa a altas.

Por lo tanto, la configuración básica para lograr la separación isotópica está formada por dos torres (fría y caliente) que operan a 30 y 130°C y a una presión de 2MPa (ver figura 1).

El agua de alimentación ingresa al tope de la torre fría donde se enriquece progresivamente a partir del gas. Luego ingresa en la torre caliente donde pierde deuterio enriqueciendo al gas sulfhídrico.

Por lo tanto, en la torre fría existe un flujo neto de deuterio hacia abajo, mientras que en la torre caliente hay un flujo neto hacia arriba. Esto hace que el deuterio tienda a concentrarse en el centro del sistema, de donde se lo extrae. Puesto que hay una extracción de producto concentrado, el líquido de fondo de la torre caliente estará más agotado en el isótopo que la alimentación. El gas SH_2 actúa como gas carrier y realiza un circuito cerrado.

Este sistema simple constituye una etapa elemental de concentración en el proceso. El producto extraído es a su vez enviado a una segunda etapa donde se lo concentra aún más. El efluente que sale agotado de la torre caliente de la 2ª etapa se envía a la 1ª etapa para continuar su agotamiento.

El efluente de 1ª etapa se envía a un stripper donde se le elimina el SH_2 y se devuelve al río.

El circuito de gas en la 2ª etapa

es una derivación de la primera, el conjunto está representado en la figura 2.

Dado que las torres interconectadas presentan un $\Delta t = 100^\circ\text{C}$, las corrientes de gas y líquido deben acondicionarse antes de entrar a cada equipo.

Para enfriar el gas que sale de la torre caliente se utiliza un dehumidificador con el arreglo que se muestra en la figura 3. El calor se extrae del equipo mediante un reciclo líquido y, a través del contacto G-L en un determinado número de platos, se logra llevar el gas a saturación y 30°C, calentando el líquido hasta los 130°C necesarios para la entrada en la torre caliente.

Para calentar el gas, que proveniente de la torre fría accede a la torre caliente, se utiliza un humidificador, el cual presenta un arreglo similar al anterior y donde se suministra el calor a través de un reciclo líquido. Es fundamental entonces el diseño de estos equipos para lograr que las torres trabajen a las temperaturas deseadas.

Además se impone el desarrollo de una eficiente red de intercambio de calor con el fin de lograr el máximo aprovechamiento de la energía utilizada. Este hecho, además de la indicación económica de efectuar el proceso en 2 etapas cada una con un par de torres, fría y caliente, propone un diagrama de procesos complejo y con abundantes reciclos como el que se muestra en la figura 4, en la cual no se incluye la red de intercambio calórico.

Uno de los problemas de diseño es optimizar el sistema para lograr el acondicionamiento de las corrientes. Es decir, calcular la cantidad óptima de reciclos de los dehumidificadores y humidificadores, caudales de los mismos, temperaturas de extracción e inyección de platos.

El interés de la simulación reside entonces en calcular los perfiles de caudal y temperatura mediante el estudio del intercambio $\text{SH}_2 - \text{H}_2\text{O}$, en toda la planta, para un dado diseño donde se fijan los parámetros de todos los equipos, las cargas

de calor y los caudales de reciclo.

Para simular el proceso en las condiciones descritas se utilizó el programa aquí presentado, tratando de aprovechar al máximo sus posibilidades para simplificar el diagrama de simulación. El resultado se muestra en la figura 5 donde toda la planta se representa por una única torre con reciclos. Este único equipo es manejado integralmente por la rutina, que controla totalmente la convergencia del sistema.

Descripción de la configuración del programa

Nos referimos a la figura 5. El sector superior entre los platos 1 y 18 (F1) incluye la torre fría de primera etapa con la sección de dehumidificación. En el tope se introduce la alimentación.

El sector entre los platos 19 y 23 (C1) abarca la torre caliente de primera etapa y su humidificador. En la base de ésta llega el reciclo de gas que parte del tope de la torre fría. La sección entre los platos 24 y 41 (F2) indica la torre fría de 2ª etapa con su dehumidificador. Si observamos la figura 4 vemos que el gas de tope de esta torre se dirige a la base de la torre fría de 1ª etapa. Ello se simuló como un by-pass de gas hacia la base de dicha torre en la sección superior.

La sección inferior entre los platos 42 y 43 (C2) simula la torre caliente de 2ª etapa. Su base está conectada por reciclos con el tope de la 2ª sección.

Los cambios de entalpía producidos por los compresores se simulan como cargas de calor aplicadas a los reciclos de gas correspondientes.

Las especificaciones de performance permiten en este caso completar la descripción del problema.

La primera de ellas determina que no hay flujo de líquido desde la base de la 2ª sección (humidificador de 1ª etapa) hacia el tope de la 3ª sección (torre fría de 2ª etapa).

Como variable alternativa fue seleccionada la carga de calor aplicada en el humidificador. Esta especificación es similar a un control de nivel en el fondo

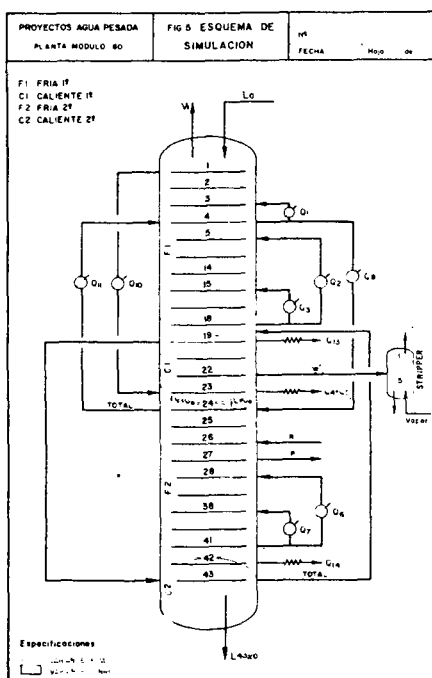
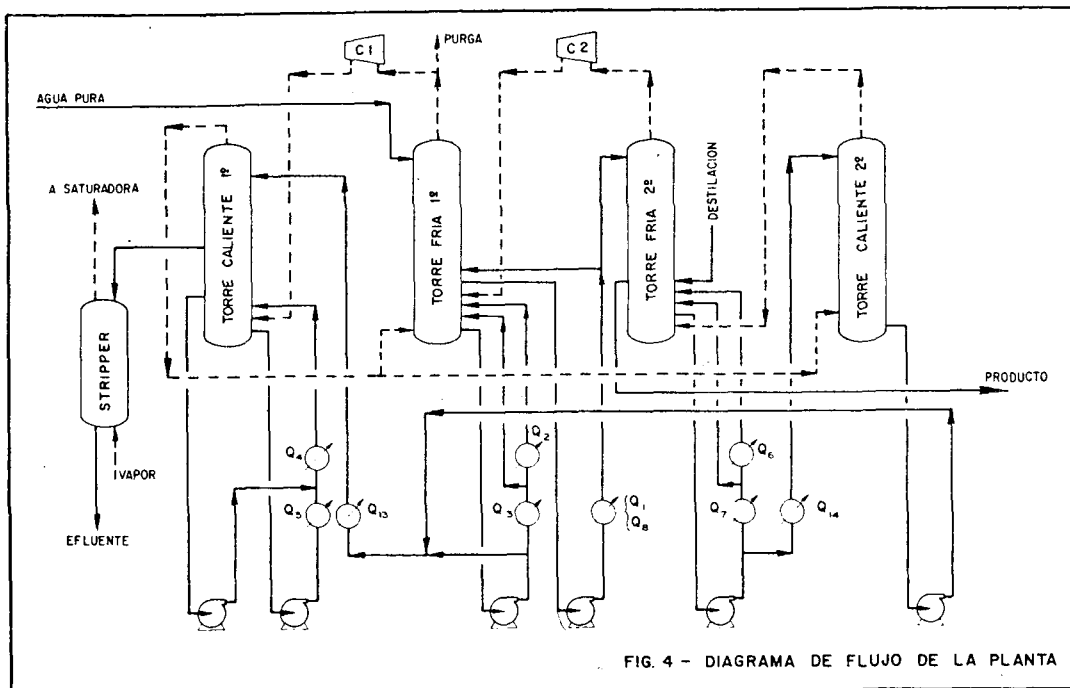
de dicho equipo.
La segunda fija un caudal nulo de líquido en la base de la 4ª sección (torre caliente de 2ª etapa). Esto implica que todo el líquido que deja la columna se recicle al tope de la torre caliente de 1ª etapa (ver fig. 4). Como variable alternativa se utiliza el caudal de efluente que va al stripper. También en este completamente a través de un reciclo.

Esto implica un caudal nulo de vapor que entra en la base de la 2ª sección, variando el caudal reciclado.

Datos fisicoquímicos

Las propiedades fisicoquímicas fueron extraídas de la referencia (3). Corresponden al caso la acción es equivalente a un control de nivel en el fondo de la columna caliente de 2ª etapa.

Hay una especificación de tipo indirecto en el by-pass, donde el caudal de vapor que sale del tope de la 3ª sección se deriva sistema agua-sulfuro de hidrógeno, ya que el contenido isotópico no altera el comportamiento térmico del sistema. Una de las salidas del programa se muestra en la tabla N° 1.



Tratamiento de resultados

Trabajando con el programa es posible proponer distintos diagramas de flujo del tipo del indicado en la figura 4. La tarea realizada consistió en modificar los parámetros de diseño (caudales, cargas de calor, n° de platos) hasta lograr las condiciones de proceso deseadas en todas las torres. Se pueden así seleccionar tantas alternativas de proceso como las combinaciones posibles de estas variables. Dado que en cada alternativa existen corrientes a calentar o enfriar, el paso siguiente es sintetizar, para cada alternativa, la red de intercambio de calor óptima que permite cumplir con las cargas térmicas necesarias. Esto se realiza recurriendo a métodos sistemáticos de síntesis de redes de intercambiadores. Finalmente, de todas las alternativas resultantes se selecciona la más conveniente por medio de técnicas de optimización de sistemas de variables múltiples.

Referencias

- (1) John F. Tomich, "A new simulation method for equilibrium stage processes", AIChE Journal, Vol. 16, n° 2. (1970)
- (2) J.F. Proctor, "Production of heavy water Savannah River and Dana plants", Technical Manual DP-400, United States Atomic Energy Commission (1959).
- (3) H.J. Neuburg, J.F. Atherley and L.G. Walker, "GIRDLER SULFIDE PROCESS PHYSICAL PROPERTIES", Technical Manual AECL-5702, Atomic Energy of Canada (1977).

(*) Este trabajo forma parte de un programa copatrocinado por UBA y CNEA

TABLA N°1: COLECCION DE RESULTADOS

2. PERFIL DE LA COLUMNA

PLATO	TEMP. KELVIN	LIQUIDO	FLUJO TOTAL VAPOR	KMOL/SEG ALIMENT. PRODUCT.	CALOR EXTR. WATT	PRESION PASCAL
1	303.095	3.0596	0.0628	3.0597 L		2050000.
2	303.177	3.0595	6.1810			2050000.
3	303.244	7.1383	6.1810			2050000.
4	305.247	2.1389	6.1871			2050000.
5	304.822	4.5677	4.3249			2050000.
6	306.359	4.5662	4.3730			2050000.
7	308.975	4.5646	4.3715			2050000.
8	313.345	4.5644	4.3699			2050000.
9	320.350	4.5702	4.3697			2050000.
10	330.673	4.5916	4.3755			2050000.
11	343.730	4.6365	4.3968			2050000.
12	357.050	4.6980	4.4417			2050000.
13	367.927	4.7574	4.5033			2050000.
14	375.377	4.8022	4.5627			2050000.
15	379.919	11.0674	4.6075			2050000.
16	385.704	11.1576	4.6896			2050000.
17	392.023	11.2621	4.7799			2050000.
18	398.029	2.8027	4.8844			2050000.
19	403.056	4.0048	4.9887		-1050555.0	2050000.
20	403.087	4.0050	7.1265			2050000.
21	403.094	4.0050	7.1267			2050000.
22	403.095	1.0084	7.1267	2.9967 L		2050000.
23	403.095	-0.0000	7.1268		-58086816.0	2050000.
24	301.949	0.9196	0.0			2050000.
25	302.361	0.9195	1.8551			2050000.
26	302.701	0.9198	1.8550	0.0004 L		2050000.
27	302.980	0.9191	1.8549		0.0006 L	2050000.
28	303.208	1.9707	1.8548			2050000.
29	304.155	1.9702	1.8759			2050000.
30	305.795	1.9695	1.8754			2050000.
31	308.608	1.9687	1.8747			2050000.
32	313.337	1.9686	1.8739			2050000.
33	320.944	1.9717	1.8738			2050000.
34	332.093	1.9824	1.8768			2050000.
35	345.901	2.0042	1.8876			2050000.
36	359.495	2.0326	1.9094			2050000.
37	370.165	2.0585	1.9377			2050000.
38	377.224	4.7689	1.9637			2050000.
39	383.247	4.8086	1.9976			2050000.
40	390.197	4.8576	2.0373			2050000.
41	397.058	1.2016	2.0862			2050000.
42	402.911	1.2022	2.1374		-490542.5	2050000.
43	403.032	0.0	2.1379			2050000.

3. CORRIENTES DE ALIMENTACION Y PRODUCTO

ALIMENTACION	1	ES LIQUIDO	AL PLATO	1
ALIMENTACION	2	ES LIQUIDO	AL PLATO	26
PRODUCTO	1	ES LIQUIDO	DEL PLATO	22
PRODUCTO	2	ES LIQUIDO	DEL PLATO	27

4. RECICLOS Y BYPASSES

1	0.4072670E+01	(LIQUIDO)	DEL PLATO	4	AL PLATO	3
	CALOR EXTRAIDO	0.1255388E+07				
2	0.2380717E+01	(LIQUIDO)	DEL PLATO	18	AL PLATO	5
	CALOR EXTRAIDO	0.1787483E+08				
3	0.6183016E+01	(LIQUIDO)	DEL PLATO	18	AL PLATO	15
	CALOR EXTRAIDO	0.1092784E+08				
4	0.1030574E+01	(LIQUIDO)	DEL PLATO	41	AL PLATO	28
	CALOR EXTRAIDO	0.7690251E+07				
5	0.2676529E+01	(LIQUIDO)	DEL PLATO	41	AL PLATO	38
	CALOR EXTRAIDO	0.4646682E+07				
6	0.9179000E+00	(LIQUIDO)	DEL PLATO	4	AL PLATO	24
	CALOR EXTRAIDO	0.2829399E+06				
7	0.1202400E+01	(LIQUIDO)	DEL PLATO	43	AL PLATO	19
8	0.6118400E+01	(VAPOR)	DEL PLATO	1	AL PLATO	23
	CALOR EXTRAIDO	-5.114124E+07				
9	0.1853407E+01	(VAPOR)	DEL PLATO	24	AL PLATO	4
	CALOR EXTRAIDO	-1.1552144E+07				
10	0.2138160E+01	(VAPOR)	DEL PLATO	19	AL PLATO	43

5. ESPECIFICACIONES

N	VALOR ESPECIFICADO	VALOR CALCULADO		
1	0.9196260E+00 (L- 24)	-5808682E+08	CALOR EXTRAIDO DEL PLATO	23
2	0.0 (L- 43)	0.2996660E+01	LIQUIDO EXTRAIDO DEL PLATO	22