



MAPA

Revista de Ciencias Sociales y Humanísticas

<http://revistamapa.org/index.php/es>

ISSN: 2602-8441

Fecha de presentación: septiembre, 2022 Fecha de aceptación: noviembre, 2022 Fecha de publicación: enero, 2023

Aplicación de balances de materiales y energía mediante simuladores de procesos en la metodología de producción más limpia

1

Application of heat and material balance through process simulators in cleaner production methodology

Daylen Yara Font Prieur¹

dfprieur@ucf.edu.cu

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5656-9050>

Lilieth Sánchez Martínez²

lsmartinez@ucf.edu.cu

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1683-1485>

Gabriel Orlando Lobelles Sardiñas³

glsardiñas@ucf.edu.cu

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2128-6146>

Cita sugerida (APA, séptima edición)

Font Prieur, D. Y., Sánchez Martínez, L. y Lobelles Sardiñas, G. O. (2023).

Aplicación de balances de materiales y energía mediante simuladores de procesos en la metodología de producción más limpia. Revista Mapa, 1(30), 1 –13.

<http://revistamapa.org/index.php/es>

¹Docente del Departamento de Química, Universidad de Cienfuegos “Carlos Rafael Rodríguez”, Cuba

²Trabajadora de la Empresa de servicio a trabajadores de Cienfuegos, Cuba

³Trabajador de la Refinería Cienfuegos S.A. , Cuba

MAPA | Revista de Ciencias Sociales y Humanística

Volumen 7| No 30 | noviembre-enero, 2023



RESUMEN

La metodología de producción más limpia es una estrategia de gestión empresarial preventiva, aplicada a productos, procesos y organización del trabajo, encaminada a minimizar emisiones tóxicas y residuos, reduciendo así los riesgos para la salud humana y ambiental, y elevando simultáneamente la competitividad. Sin embargo, la efectividad de dicha metodología se ve afectada por la poca precisión de los balances materiales que se utilizan para su implementación. Objetivo es aplicar balances de materiales y energía mediante simuladores de procesos en la metodología de producciones más limpias para la recuperación de H_2S y NH_3 . Métodos se seleccionó el proceso y el simulador de proceso para desarrollar dicho balance. Se obtuvo el modelo de simulación y se seleccionó el paquete termodinámico. Para la validación del mismo se corrió el simulador logrando realizar el balance de materiales requerido y con la mayor precisión. Se realizan las pruebas de sensibilidad del modelo. Resultados como resultado relevante se alcanza una mayor exactitud en el control de las principales variables operacionales del proceso, lo que permitió lograr la recuperación de 1 368 553 $m^3/año$ de agua con un costo de 2 121 257 dólares. A razón de 1,55 dólar/ m^3 . Se recuperaron 23 071 t/año de H_2S , que alimentadas a la unidad recuperadora de azufre permitirá la producción de 22 840 t/año de azufre elemental, lo que significa un ingreso de 2 443 880 dólares. Se recuperan 10 910 toneladas/año de NH_3 , para la venta a la industria química para la producción de fertilizantes.

Palabras claves: estrategia preventiva, metodología, riesgos de salud

ABSTRACT

The cleaner production methodology is a preventive business management strategy, applied to products, processes and work organization, aimed at minimizing toxic emissions and waste, thus reducing risks to human and environmental health, and simultaneously increasing competitiveness. However, the effectiveness of this methodology is affected by the low precision of the material balances used for its implementation. The objective is to apply material and energy balances through process simulators in the cleaner production methodology for the recovery of H_2S and NH_3 . Methods The process and the process simulator were selected to develop said balance. The simulation model was obtained and the thermodynamic package was selected. For its validation, the simulator was run, achieving the required balance of materials and with the highest precision. Model sensitivity tests are performed. Results As a relevant result, greater accuracy is achieved in the control of the main operational variables of the process, which allowed the recovery of 1,368,553 $m^3/year$ of water at a cost of 2,121,257 dollars. At a rate of 1.55 dollars/ m^3 . 23,071 t/year of H_2S were recovered, which fed to the sulfur recovery unit will allow the production of 22,840 t/year of elemental sulfur, which means an income of 2,443,880 dollars. 10,910 tons/year of NH_3 are recovered for sale to the chemical industry for the production of fertilizers.

Keywords: preventive strategy, methodology, health risks



INTRODUCCIÓN

Es conocido que el 25 % de las reservas de agua dulce se consume en procesos industriales, cuyos residuales contaminan severamente las fuentes de abasto. (Lobelles y col, 2019) El aumento en la contaminación ambiental, la extinción de algunas especies animales y vegetales, son algunos ejemplos de los efectos perjudiciales causados por dicha industria. (Meira-Carteá, 2020). Para contrarrestar esos impactos se han desarrollado nuevas tecnologías que descontaminan los residuales, partiendo de factores fundamentales como la factibilidad de la reutilización, (Lobelles y col, 2021) la economía y la eficiencia de los procesos. (Pliego, 2012). Sin embargo, en los últimos años, la efectividad de esos procesos se ha visto seriamente limitada debido a restricciones ambientales cada vez más severas. (NC-521:2007; NC-27:2012)

En tal sentido, la Refinería Cienfuegos S.A trabaja con parámetros de calidad reconocidos según las normas internacionales y con un tratamiento primario de sus residuales, con el objetivo de minimizar los costos de producción y mitigar los impactos medioambientales. Entonces, en el caso particular de la unidad recuperadora de H_2S y NH_3 (Unidad 121), caso de estudio, es necesario destacar que, para el diseño de dicha unidad, cuyo objeto social estaba definido, se tomaron en cuenta básicamente, las características de los crudos a procesar en el futuro, con vista a garantizar materia prima para la industria petroquímica. No obstante, hoy día esa perspectiva ha cambiado, por cuanto se requiere realizar la rehabilitación de dicha unidad, pero ahora como un proceso auxiliar, básicamente con fines medioambientales. Entonces, se impone la perspectiva de las producciones más limpias como su razón de ser. Por tanto, atendiendo a los requerimientos actuales, y las normas de emisiones antes mencionadas; se hace necesario lograr una total rehabilitación de la misma. Partiendo en primer lugar, de un preciso balance de materiales y energía para poder establecer mayor control sobre los parámetros operacionales de la unidad; toda vez que, sobre el diseño de los equipos ya no es posible actuar y un rediseño resulta en extremo costoso. Entonces, se precisa del uso de programas de cómputo para lograr la mayor exactitud en

dichos balances. De ellos dependerá en gran medida el control de las principales variables operacionales y, consigo, la eficiencia de su proceso. Cada día es más común que las empresas inviertan grandes cantidades de dinero en la adquisición de programas de cómputo para el dimensionamiento de equipos y plantas de proceso. Si bien, en algunos casos se utilizan herramientas de cálculo como Excel, o el de un programa específico como PRO II o Chemcad, éstos solo son calculados en algunos casos sin la experiencia adecuada para llegar propiamente a la especificación de diseño. Todavía, se siguen utilizando tablas y gráficas para especificar los cálculos de manera artesanal y se realiza mucho trabajo a mano. Bajo estas condiciones fue diseñado el proceso objeto de estudio. Pero también, por la necesidad de integrar procesos contiguos de un complejo industrial, desde el enfoque de las Producciones Más Limpias (Ochoa, 2008), con el objetivo de propiciar algún valor agregado a diferentes residuales y a su vez que puedan utilizarse como materia prima de otros procesos.

Para dar solución a la problemática presentada, es objetivo del presente estudio: Aplicar balances de materiales y energía mediante simuladores de procesos en la metodología P+L para la recuperación de H_2S y NH_3 .

MATERIALES Y MÉTODOS

Para la presente investigación se seleccionó el simulador de procesos ProMax® 2.0; (BR&E, 2015) y fue necesario señalar el modelo termodinámico por el cual serán calculadas las propiedades de cada corriente. Visto así, se selecciona el paquete termodinámico Electrolytic ELR-PR, el mismo puede aplicarse en simulaciones de torres despojadoras, hidrotratadoras, unidades de crudo o cualquier proceso que contenga hidrocarburos, gases ácidos y agua. (Alvarez, 2007). Después de elegirla termodinámica del proceso, mediante la opción "Components", se añaden los componentes presentes en el caso de estudio: H_2O , H_2S , NH_3 , CO_2 .

Se confeccionó un diagrama de flujo de información (DFI), que consta con varios módulos, dos columnas de destilación de 38 platos, que además de

su alimentación requiere de la instalación de un rehervidor y la extracción de una corriente de tipo flujo circulante por el plato 34 que retorna en el plato 38. Para calcular este módulo se consideraron, además, la especificación de capacidad de intercambio del rehervidor igual a 8 500 000 kcal/h, el flujo de la corriente de recirculación (168 474 kg/h) y la temperatura de retorno de esa corriente (55 °C). A este módulo entrará por el plato 33 la alimentación de agua agria definidas en la Tabla 1 y se espera que las salidas sean agua despojada y vapor despojado.

Para la validación del modelo se simuló el proceso de la torre recuperadora a las condiciones de diseño y se compararon los resultados obtenidos, estimándose el error que se comete al estudiar el sistema con el modelo simulado. Como criterio de comparación se tomó el error relativo:

$$e_{relativo} = \left| \frac{X_{diseño} - X_{calculada}}{X_{diseño}} \right| * 100 \% \quad (1)$$

Tabla 1. Variables definidas de entrada a las torres recuperadoras.

Corrientes	1A	1B	1C	1D	1E	1F
Descripción de la corriente	Agua Agria	Agua Agria	Agua Agria	Agua Agria	Agua Agria	Agua Agria
Fase	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
Flujo molar total (kmol/h)	2889	46	1148	1902	384	2607
Flujo másico total (kg/h)	52 104	837	20 832	34 623	7000	47 527
Temperatura (°C)	45	40	50	52	50	48
Presión (kg/cm²)	5,5	5,5	5,5	5,5	5,5	5,5
Peso molecular	18,0	18,2	18,1	18,2	18,2	18,2
Entalphía (kcal/kg)	-3762,1	-3667,9	-3688,4	-3652,3	-3654,9	-3643,9
Flujo másico total por componentes (kg/h)						
H₂O	51 992,9	808,0	20 314,0	33 380,0	6 755, 0	45 625,8
H₂S	111,0	19,0	345,1	828,9	175,0	1267,5
NH₃	--	10,0	172, 9	414,1	70,0	633,7

Nota: La tabla muestra el resultado alcanzados en las torres recuperadoras. Información extraída de la investigación. (2023)

Para medir la sensibilidad del modelo de simulación se hacen corridas manipulando una variable dentro de los rangos de operación. Las demás variables se mantienen estables para poder observar cuales son los mejores resultados. Para cada caso se presentan los resultados gráficos involucrando la variable composición de NH_3 y H_2S , tanto, en el vapor despojado como en el agua despojada, teniendo en cuenta que son los que provocan la mayor contaminación. Estos contaminantes deben ser controlados con mayor rigurosidad debido a que después de ser despojados se envían a la unidad de recuperación de azufre, donde el sulfuro de hidrógeno en presencia de oxígeno se convierte en azufre elemental mientras el amoníaco es totalmente destruido, por acción de las altas temperaturas en el reactor de oxidación térmico para evitar que se formen sales de amonio. (Sassi and Gupta, 2008; Abedini et .al, 2010; Hamid et.al, 2012)

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Implementación y validación del modelo de simulación en ProMax®

2.0. La implementación y validación del modelo de simulación se realiza según la metodología explicada anteriormente y los resultados se muestran y en las tablas 2 y 3 con una comparación entre los resultados que se obtienen con el modelo de simulación y los parámetros de diseño y operación, así como en la figura 1.

Tabla 2. Análisis comparativo para los flujos de gas de salida en las torres recuperadoras.

Corriente	Vapor despojado		
	Diseño (kg/h)	Simulación (kg/h)	% Error
Componentes			
H_2O	3765,20	3655,303	2,92
H_2S	2746,9	2746,597	0,011
NH_3	1300,8	1298,9	0,023
Total (kg/h)	7812,9	7702,401	1,41

Nota: La tabla muestra los resultados comparativos entre el modelo de simulación y los parámetros de diseño y operación. Información extraída de la investigación. (2023)

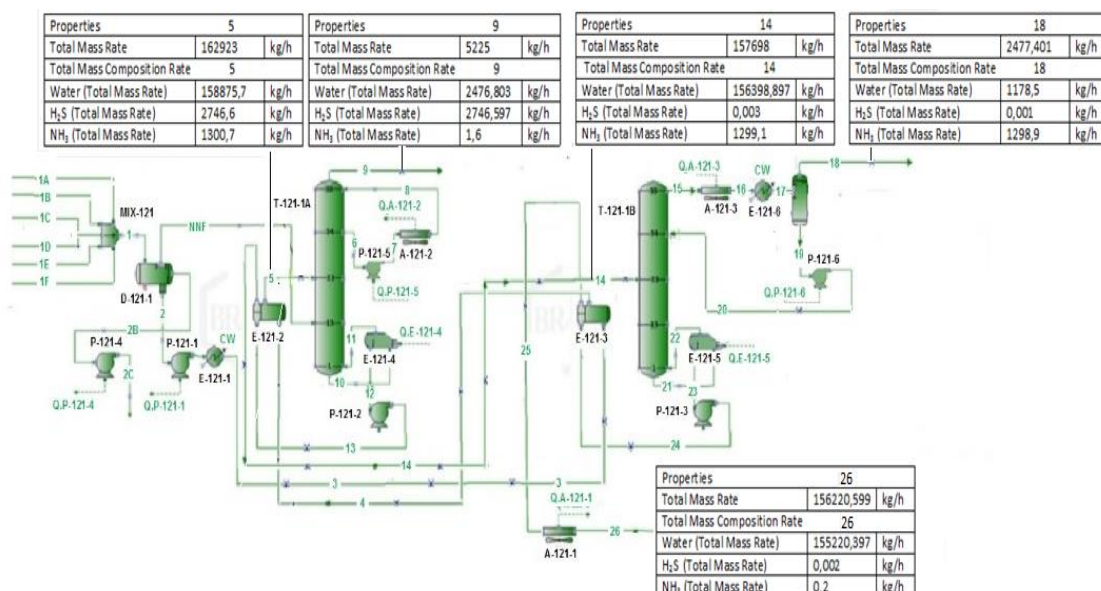
Tabla 3. Análisis comparativo para los flujos de líquido de entrada y salida en las torres recuperadoras.

Corriente	Agua Agria			Agua Agria		
	Diseño (kg/h)	Simulación (kg/h)	% Error	Diseño (kg/h)	Simulación (kg/h)	% Error
Componentes						
H ₂ O	158878,3	158875,7	0,002	155224,197	155220,397	0,003
H ₂ S	2746,9	2746,6	0,01	0,002	0,002	0
NH ₃	1300,8	1300,7	0,007	0,19	0,2	5,26
Total (kg/h)	162926	162923	0,001	155224,389	155220,599	0,024

Nota: La tabla muestra los resultados comparativos entre los flujos de líquido de entrada y salida en las torres recuperadoras. Información extraída de la investigación. (2023)

Después de utilizar el criterio de error como criterio de comparación entre los datos de diseño y los datos obtenidos por el *software*, se puede concluir que ningún % sobrepasa el 10 % permisible, lo que indica que los valores mostrados por la simulación se acercan a la realidad. Teniendo en cuenta estos elementos, se considera que el modelo se ajusta a los parámetros de este tipo de proceso.

Figura 1. Modelo de simulación de las torres recuperadoras.



Nota: La figura el comportamiento del modelo de simulación de las torres recuperadas.

Información extraída de la investigación. (2023)

Gráfico 1 Resultados del análisis de sensibilidad.

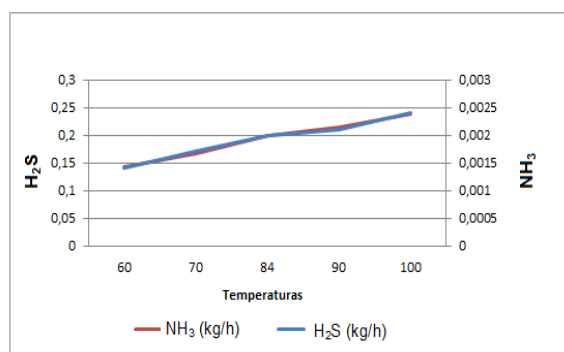


Figura 2 Comportamiento de H_2S y NH_3 en el agua despojada ante variaciones en la temperatura de alimentación a la torre

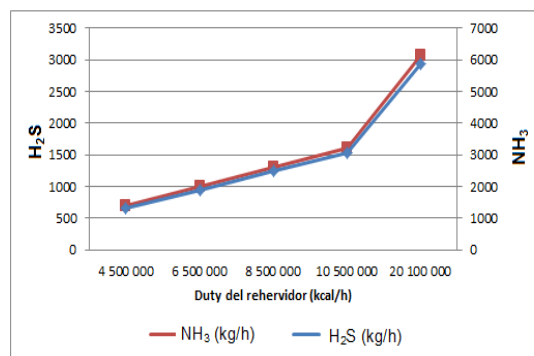


Figura 3. Comportamiento de H_2S y NH_3 en el vapor despojado ante variaciones en el duty del rehervidor

Nota: El gráfico muestra los resultados de sensibilidad alcanzados. Información extraída de la investigación. (2023)

Las figuras 2 y 3 muestran primero, que la presencia de los compuestos sulfuro de hidrógeno y amoníaco, en la composición del agua despojada disminuye a medida que aumenta la temperatura de alimentación a la torre, comportamiento lógico porque ocurre mayor despojamiento de dichos compuestos. En el segundo caso, la presencia de los compuestos sulfuro de hidrógeno y amoníaco, en la composición del vapor despojado, aumenta en la misma medida que aumenta el valor de la capacidad de intercambio del rehervidor, por consiguiente, se logra un mayor despojamiento de ambos compuestos, al mismo tiempo que aumenta el reflujo circulante, quien regula la temperatura en el tope de la torre.

Tabla 4.1 Balance de materiales y propiedades de las corrientes de alimentación.

Corriente de Alimentación	Unidad	1A	1B	1C	1D	1E	1F
Tasa molar total	kmol/h	2889	46	1148	1902	384	2607

Nota: La tabla muestra los resultados del balance de materiales y propiedades de las corrientes de alimentación. Información extraída de la investigación. (2023).

Tabla 4.2 Balance de materiales y propiedades de las corrientes intermedias.

Corrientes Intermedias	Unidad	1	2	3	4	5	9
Tasa molar total	kmol/h	8976	8976	8976	8976	8976	222
Tasa másica total	kg/h	162923	162923	162923	162923	162923	5225
Temperatura	°C	48	48	40	40	84	93
Presión	kgf/cm ²	5,50	2,72	3,07	6,13	2,41	2,36
Peso molecular		18,2	18,2	18,2	18,2	18,2	23,5
Entalpía	kcal/kg	-3689,8	-3689,8	-3697,6	-3697,5	-3654,4	-939,5
Densidad	kg/m ³	989,9	989,9	993,3	993,2	969,9	
Composición másica total							
H ₂ O	kg/h	158875,7	158875,7	158875,7	158875,7	158875,7	2476,803
H ₂ S	kg/h	2746,6	2746,6	2746,6	2746,6	2746,6	2746,597
NH ₃	kg/h	1300,7	1300,7	1300,7	1300,7	1300,7	1,6

Nota: La tabla muestra los resultados del balance de materiales y propiedades de las corrientes intermedias. Información extraída de la investigación. (2023).

Tabla 4.3 Balance de materiales y propiedades de las corrientes intermedias.

Corrientes Intermedias	Unidad	13	14	18	25	26
Tasa molar total	kmol/h	8754	8754	105,24	8623	8623
Tasa másica total	kg/h	157698	157698	2477,401	155220,599	155220,599
Temperatura	°C	130	86	37	86	45
Presión	kgf/cm ²	2,72	2,41	1,00	8,68	7,00
Peso molecular		18,0	18,0	23,5	18,0	18,0
Entalpía	kcal/kg	-3683,8	-3728,1	-939,5	-3683,8	-3728,1
Densidad	kg/m ³	964,7	969,9		967,7	990,2
Composición másica total						
H ₂ O	kg/h	156398,897	156398,897	1178,5	155220,397	155220,397
H ₂ S	kg/h	0,003	0,003	0,001	0,002	0,002
NH ₃	kg/h	1299,1	1299,1	1298,9	0,2	0,2

Nota: La tabla muestra los resultados del balance de materiales y propiedades de las corrientes intermedias. Información extraída de la investigación. (2023).

Tabla 4.4 Balance de materiales y propiedades corrientes de recirculación

Corriente de Recirculación	Unidad	6 y 15 Extracción	8 y 20 Retorno	PTR
Tasa molar total	kmol/h	9230	9230	862
Tasa másica total	kg/h	168474	168474	15522,0
Temperatura	°C	101	55	45
Presión	kgf/cm ²	2,38	2,36	7,00
Peso molecular		18,3	18,3	18,0
Entalpía	kcal/kg	-3436,8	-3481,2	-3728,1
Densidad	kg/m ³	944,2	970,4	990,2
Composición másica total				
H ₂ O	kg/h	152198,3	152198,3	15522,0
H ₂ S	kg/h	5921,8	5921,8	0,002
NH ₃	kg/h	10353,9	10353,9	0,2

Nota: La tabla muestra los resultados del balance de materiales y propiedades de las corrientes de recirculación. Información extraída de la investigación. (2023).

Tabla 4.5 Balance de materiales y propiedades corrientes de productos

Corriente de Alimentación	Unidad	26A	26B	26C	26D	26E	26F
Tasa molar total	kmol/h	2505	42	958	1659	343	2255
Tasa másica total	kg/h	45093	723	17248	29860	6180	40594
Temperatura	°C	45	45	45	45	45	45
Presión	kgf/cm ²	7,00	7,00	7,00	7,00	7,00	7,00
Peso molecular		18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0
Entalpía	kcal/kg	-3728,1	-3728,1	-3728,1	-3728,1	-3728,1	-3728,1
Densidad	kg/m ³	990,2	990,2	990,2	990,2	990,2	990,2
Composición másica total							
H ₂ O	kg/h	45092,7	722,7	17247,7	29859,7	6179,7	40593,7
H ₂ S	kg/h	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002	0,002
NH ₃	kg/h	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2

Nota: La tabla muestra los resultados del balance de materiales y propiedades de las corrientes de productos. Información extraída de la investigación. (2023).

CONCLUSIONES

Los fundamentos teóricos de la investigación permitieron conocer las diferentes apreciaciones de la metodología de Producción Más Limpia, en las cuales se resalta la elaboración de los balances de materiales, en consecuencia, la simulación del proceso en el presente estudio permitió que:

1. Se obtuvo el modelo de simulación para el caso de estudio y se validó su implementación pues ninguno de los parámetros evaluados sobrepasó el 10% del error relativo establecido. Se realizaron los análisis de sensibilidad pertinentes para comprobar las variaciones del proceso y finalmente se desarrolló el balance de materiales y energía de la unidad objeto de estudio.
2. El balance de materiales y energía desarrollado mediante la simulación del proceso estudiado, permitió la aplicación eficiente de la metodología de Producción Más Limpia y en consecuencia se logra recuperar el 95,27% del agua despojada, lo que significa un ahorro de 1 368 553 m³/año con un costo de 2 121 257 dólares. Se recuperaron 23 071 t/año de H₂S como materia prima para la unidad recuperadora de azufre. Se recuperan 10 910 toneladas/año de NH₃ para la producción de fertilizantes.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abedini R, Koolivand M and Ghasemian S. Modeling and simulation of condensed sulfur in catalytic beds of Claus process: rapid estimation. Chemical Engineering Research Bulletin, 14, 2010, pp.110-114.
DOI:10.3329/cerb.v14i2.5595

<https://www.banglajol.info> > CERB > article > view pdf

Álvarez, H. C. Optimización de la Unidad Despojadora de Aguas Agrias (T-2590) de la Gerencia Complejo Barrancabermeja mediante la aplicación de herramienta de simulación. 2007. Tesis de Grado, Santander; Colombia. <https://docplayer.es/24990935-Helver-crispiniano-alvarez-castro.html>

BR&E ProMax® with TSWEET® Process Simulation Software. 2015. Disponible en <https://www.bre.com/ProMax-Main.aspx>.



Hamid.R.M, Keyvan. K, Resa. H & Hooman. J. Effect of reaction furnace and converter temperatures on performance of SRUs. Journal of Petroleum Science Research (JPSR), 2012. 1, Issue 1, pp. 1-3.

<https://www.destechpub.com/wp-content/uploads/2019/01/JPSR-Volume-1-Issue-1-April-2012.pdf?x45684>

Lobelles-Sardiñas, G.O., López-Bastida, E., Cortés-Martínez, R., Pedraza-Garciga, J. Economía ecológica y gestión tecnológica integral de aguas sulfurosas en la refinería de Cienfuegos para minimizar emisiones. Tecnología Química. Vol.39, No.1, 2019, pp.22-43. ISSN:2224-6185.

<https://tecnologiaquimica.uo.edu.cu/index.php/tq/issue/view/302>

Lobelles-Sardiñas, G.O., Débora-Mira, L., Sabina-Delgado, A. Evaluación integral de una torre despojadora para recuperar aguas sulfurosas en la Refinería de Cienfuegos. Tecnología Química. Vol.41, No.1, 2021, pp.123-140. ISSN:2224-6185.

<https://tecnologiaquimica.uo.edu.cu/index.php/tq/issue/view/323>

Meira-Carteá, P.A., Andrade-Torales, M. Educación para una Cultura de la Sostenibilidad: eco-ciudadanía, políticas públicas y participación social. Pedagogía social: revista interuniversitaria. PSRI. Nº. 36, 2020, pp. 13-17. ISSN-e 1989-9742. DOI: 10.7179/PSRI_2020.36.01.

<https://recyt.fecyt.es/index.php/PSRI/issue/view/3960>

NC-521:2007. Vertimiento de aguas residuales a la zona costera y aguas marinas- Especificaciones. Ciudad Habana, Cuba: ONN. Oficina Nacional de Normalización. Web: www.nc.cubaindustria.cu.

NC-27:2012. Vertimiento de aguas residuales a las aguas terrestres y alcantarillado-Especificaciones. In. Ciudad Habana. Cuba: ONN. Oficina Nacional de Normalización. Web: www.nc.cubaindustria.cu

Ochoa-George P.A. Las Producciones Más Limpias en la gestión empresarial. Editorial Félix Varela. 2008. Pp: 15-24. ISBN: 978-959-07-0940-1

<https://isbn.cloud/9789590709258/las-producciones-mas-limpas-en-la-gestion-empresarial/>



Pliego-Rodríguez, G. Intensificación del proceso Fenton para el tratamiento de aguas residuales industriales. 2012. Tesis doctoral. Universidad Autónoma de Madrid.

<https://repositorio.uam.es/bitstream/handle/478.pdf>.

Sassi, M. & Gupta, A. K. Sulfur Recovery from Acid Gas Using the Claus Process and High Temperature Air Combustion (HiTAC) Technology. *American Journal of Environmental Sciences*, 2008, 4(5), 502-511. ISSN 1553-345X

<https://thescipub.com/pdf/ajessp.2008.502.511.pdf>