

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

SIMULACIÓN DE REACTORES DE PRODUCCIÓN DE POLIETILENO EN SUSPENSIÓN

TUTOR ACADÉMICO: Prof. Berenice Blanco.

TUTOR INDUSTRIAL: Dr. Heriberto Ortega.

Ing. Rabij Abou Harb.

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Para optar al Título
de Ingeniero Químico
Por la Br. Fusco G., Giovanna M.

Caracas, Diciembre 2003

Caracas, 4 de Diciembre 2003

Los Abajo firmantes, miembros del jurado designado por el Consejo de Escuela de Ingeniería Química para evaluar el Trabajo Especial de Grado presentado por la bachiller Giovanna M. Fusco, titulado:

“Simulación de reactores de producción de polietileno en suspensión”

Consideran que el mismo cumple con los requisitos exigidos por el plan de estudios conducente al título de Ingeniero Químico, y sin que ello signifique que se hacen solidarios con las ideas expuestas por el autor, lo declaran APROBADO.



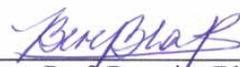
Prof. Rosalba Sciamanna

Jurado



Prof. Aimee Ramos

Jurado



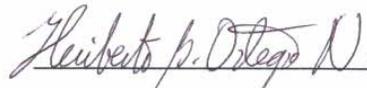
Prof. Berenice Blanco

Tutor Académico



Ing. Rabij Abou H.

Tutor Industrial



Dr. Heriberto Ortega.

Tutor Industrial

AGRADECIMIENTOS

Primero que todo quiero agradecerle a *Dios*, a la *Virgen de Guadalupe* y a *María Francia*, por darme la fuerza para llegar hasta aquí.

A mis padres por brindarme una excelente educación y siempre ser pilares fundamentales en mi vida. A mi madre, no sé que hubiese sido de mí sin tu apoyo y la fuerza que me brindas, *gracias* mamá, por siempre creer en mí, por siempre ayudarme y quererme tanto. A mi Nona, abuelita gracias por tu preocupación y tu apoyo. A mi hermana, Nenetta sé que siempre me has ayudado ¡¡gracias!!

A mi novio, José Gregorio, gracias mi amor por tu apoyo incondicional, por ayudarme cada vez que tenía un problema, por siempre estar allí dándome fuerzas para seguir adelante con la carrera, y sencillamente por quererme tanto y tenerme paciencia.

A la Universidad Central de Venezuela, gracias por brindarme la oportunidad de pertenecer a esta extraordinaria institución, y gracias a los profesores de la Escuela de Ingeniería Química, y al Profesor José Moreno de la escuela Básica.

A María Esther y a su mamá, Sra. Esther gracias por ayudarme a seguir estudiando Ingeniería y brindarme siempre su apoyo. A Ingrid gracias por ayudarme, por tu comprensión y por creer siempre en mí. A Daniela, Hermann y los Arquitectos (Nathalia, Ana María y Jaime), amigos gracias por brindarme el apoyo necesario para estudiar Ingeniería, Ustedes siempre creyeron en mí como Ingeniero, gracias.

Gracias a mis amigos que conocí en la Facultad de Ingeniería: Luis, Juan, mi hermano Eduardo, Bárbara, al primo Nelson, Humberto, César, Mersha, Bruno, Gustavo y Neisy, gracias por todas esas horas de estudio, dedicación y risas. Especialmente: a Yoli, gracias amiga, como agradecerte tanto no lo sé, tu constancia y dedicación es abrumadora, gracias por ayudarme tanto a lo largo de la carrera, sin tí no estuviera donde estoy gracias amiga, por todas esas horas de estudio por siempre preocuparte por mí. Al amigo Armando, Wilys! las gracias se elevan al infinito lo mucho que me has ayudado, lo mucho que te has preocupado, gracias nunca me

cansaré de decirte gracias por ayudarme tanto con la tesis, no tengo palabras para agradecértelo. A Isabel, gracias amiga por todos esos días interminables de estudio, por brindarme tu amistad y por dejarme conocer a Natalia, gracias por siempre estar pendiente de mí. A Geilhy gracias amiga por tu apoyo durante toda la carrera y siempre estar pendiente de mí, tu amistad significa mucho para mí; a Gonzalo, no te imaginas lo mucho que te agradezco tu paciencia y tu constancia al ayudarme, gracias por tu amistad. A Javier no sé por donde comenzar, gracias amigo por siempre explicarme una y otra vez un ejercicio que no entendía, gracias por tus consejos y por siempre escucharme, durante toda la carrera, gracias por siempre estar allí para apoyarme. Angela gracias por tu amistad, porque en tan poco tiempo me has brindado tu ayuda incondicional y tu apoyo, gracias. A Patricia amiguita aunque estes lejos, gracias porque siempre conté con tu apoyo; a Nadya, Flaquita por tu amistad, Ana Karina, Ursula y José Luis gracias por siempre estar allí.

A la Profesora Berenice gracias por sus consejos profe, y por todo el apoyo que me brindo durante la realización de la tesis. Al Sr. Heriberto Ortega, gracias por su paciencia y por toda la ayuda que hizo posible que llegará hasta aquí. A Rabij, gracias por todo el apoyo y preocupación que me brindaste, gracias. A Iraida aunque nos conocemos poco, me has brindado tu apoyo incondicional, gracias.

A todas las personas de PDVSA-Intevep que se preocupaban por mí y me daban todo su apoyo incondicional: Sr. Urbano, Sra. Alicia, Guidia, Gherozka y la Sra. Iraima Fernández. Quisiera agradecer también a todas las personas del Soporte Técnico de ASPEN Tech, y todas aquellas personas de Intensa que me ayudaron a instalar el simulador, gracias!. Al Sr. Humberto González de Indesca, gracias por su ayuda. Quisiera agradecer a la Sra. Noralba Moreno y al Sr. Juan Carlos Perfetti.

Y a todas esas personas que de alguna forma me han ayudado a alcanzar esta meta en mi vida, para ellos gracias.....

Fusco G., Giovanna M.

**SIMULACIÓN DE REACTORES DE PRODUCCIÓN DE POLIETILENO EN
SUSPENSIÓN**

**Tutor Académico: Prof. Berenice Blanco. Tutor Industrial: Dr. Heriberto
Ortega. Ing. Rabij Abou H. Tesis. Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería.
Escuela de Ingeniería Química. Año 2003, 124 p.**

Palabras Claves: Polietileno de alta densidad, proceso en suspensión, simulación,
Aspen Plus, intercambiadores de pasta.

Resumen.

En el presente trabajo se llevo a cabo la simulación de algunos equipos de la sección de polimerización utilizada en el Complejo Petroquímico del Tablazo, Edo. Zulia, para la producción de polietileno de alta densidad en suspensión, con el objeto de predecir el desempeño de los reactores de polimerización, disponer de una plataforma de estudios para la optimización y diversificación de su producción y funcionamiento.

Para realizar la simulación de los intercambiadores de calor de pasta de polietileno se empleó el paquete ASPEN B-JAC; para lo cual fue necesario, entre otras cosas, definir el modelo a utilizar en Polymer Plus especificando el diagrama de flujo del proceso, el tipo de intercambiador a emplear (modelo Hetran para intercambiadores de carcarza y tubo, y HeatX para los condensadores de tope), los nombres y características de los componentes, el modelo cinético de polimerización (Ziegler-Natta), etc.

Una vez especificadas todas las variables, se llevó a cabo la simulación y validación de las corridas. Para realizar la simulación de los reactores de polimerización se utilizó el paquete ASPEN Polymer Plus. Para ello, se especificaron, entre otras, las variables asociadas al proceso, el tipo de reactor a utilizar (Reactor de

tanque con agitación continua o RCSTR), los modelos para representar las propiedades termodinámicas del sistema (POLYNRTL para equipos asociados al polímero, y NRTL para los que no lo están), el modelo cinético (Ziegler-Natta), etc. Para validar los resultados obtenidos de la simulación de todas las unidades acopladas se realizó un balance de masa para cada circuito de polimerización y se comparó el flujo final del producto con las variables de operación.

Los resultados obtenidos para los intercambiadores de calor demuestran que dadas las características del polímero, es probable que existan restos del mismo a través del área efectiva de estos equipos, por lo que presentan factores de ensuciamiento distintos de cero. Adicionalmente, se observó que para los dos casos planteados tanto la suspensión concentrada como el agua de enfriamiento generaron tendencias bastante aceptables con porcentajes de desviación con respecto a los valores de operación que no superan el 1,17% y 0,6%, respectivamente. Sin embargo, el método termodinámico utilizado por el simulador dispone de mayor información para el lado agua, y por lo tanto genera mejores resultados.

En cuanto al circuito de polimerización para los reactores del proceso, se tiene que en el primer reactor se obtiene un producto monodisperso (índice de polidispersidad de 2), con peso molecular y flujo de polietileno de alta densidad con porcentajes de desviación de 4% y 2% respectivamente, en comparación con los valores de operación. En el segundo reactor se obtiene un producto polidisperso (índice de 4), con porcentaje de desviación con respecto a los valores de operación de 6% y 5% para el peso molecular y el flujo de polietileno, respectivamente.

Por último, en cuanto al estudio de sensibilidad sobre el aumento de la calidad y la producción de polietileno de alta densidad, se obtuvo que el flujo de etileno es la variable que maximiza de mejor manera estos factores, presentando los mayores incrementos en cuanto a flujo, peso molecular, e índice de polidispersidad del mismo.

ÍNDICE GENERAL

INDICE DE TABLAS	X
INDICE DE FIGURAS.....	XIV
ABREVIATURAS.....	XVII
1. INTRODUCCIÓN	1
2. OBJETIVOS	3
2.1 Objetivo General	3
2.2 Objetivos Específicos	3
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	4
3.1 Polímeros.....	4
3.2 Clasificación de los polímeros	4
3.3 Estructura de los polímeros	5
3.4 Reacciones de polimerización	8
3.4.1 Polímeros de adición o de crecimiento en cadena	8
3.4.2 Polimerización por condensación	11
3.5 Suspensión concentrada (“slurry”).....	11
3.5.1 Tamaño y forma de partícula	13
3.5.2 Comportamiento de la cadena que forman las suspensiones concentradas	14
3.5.3 Regímenes de flujo y flujos de diseño	15
3.5.4 Caracterización de las suspensiones concentradas	15
3.6 Manufactura de polímeros.....	16
3.7 Polietileno.....	21
3.7.1 Propiedades de los polímeros	21
3.7.2 Tipos de polietileno	24
3.7.3 Procesos para la manufactura del polietileno.....	26

3.8 Descripción del proceso de producción de polietileno de alta densidad (PEAD) del Complejo Petroquímico El Tablazo	32
3.9 Simulación del proceso	35
3.9.1 Aspen Plus TM	35
3.9.2 Parámetros de la simulación	41
4. METODOLOGÍA	43
4.1 Identificación de los aspectos bibliográficos involucrados con la producción de Polietileno de Alta Densidad	43
4.2 Entrenamiento en el uso de la plataforma de simulación ASPEN 11.1 / Polymer Plus TM	44
4.3 Establecer el esquema de flujo del proceso en estudio, balance de masa y condiciones de operación	44
4.4 Simulación del intercambiador de calor de pasta de polietileno utilizando Aspen B-JAC	46
4.4.1 Definir el modelo a utilizar en Polymer Plus	47
4.4.2 Simulación en B-JAC	49
4.4.3 Diagrama de bloques del intercambiador de calor	50
4.4.4 Validación de resultados del intercambiador	51
4.5 Coeficientes de transferencia de calor calculados en Delphi 6.0	52
4.6 Simulación de los reactores en serie utilizando Aspen Polymer Plus	53
4.6.1 Definir el modelo a utilizar en Polymer Plus	53
4.6.2 Diagrama de bloques del reactor	55
4.6.4 Validación de resultados de todo el sistema acoplado	56
4.6.5 Estudio de la sensibilidad del proceso para producir polietileno de alta densidad ..	57
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	58
5.1. Validación y simulación caso N° 1	59
5.2. Validación y simulación caso N° 2	66
5.3 Comparación de coeficientes de transferencia de calor en ASPEN Plus y Delphi 6.0 ..	73

5.4. Estudio del esquema de flujo del proceso	76
5.5. Validación y simulación del circuito de polimerización para los dos reactores.....	80
5.6. Estudio de la sensibilidad para producir polietileno de alta densidad.....	84
6. CONCLUSIONES	94
7. RECOMENDACIONES.....	97
8. BIBLIOGRAFÍA	99
9. APENDICE.....	102
10. ANEXOS	123

INDICE DE TABLAS

Tabla N°	Pág.
1. Clasificación de los polímeros según su estructura física.....	7
2. Algunos polímeros de adición más comunes y sus usos más importantes.....	8
3. Clasificación de reacciones de polimerización por adición.....	9
4. Terminología descriptiva aplicada a partículas minerales redondas y subangulares.....	13
5. Procesos para la manufactura del polietileno.....	27
6. Programas que se utilizan ASPEN B-JAC.....	39
7. Parámetros de la simulación.....	42
8. Directivas operacionales de la planta Polinter-Alta.....	46
9. Lista de componentes utilizados en el modelo	48
10. Esquema de reacción del proceso en suspensión para el polietileno de alta densidad.....	49
11. Validación de la simulación del E-104 para bases de diseño.....	58

INDICE DE TABLAS (Cont.)

Tabla. N°	Pág.
12. Validación de la simulación del E-123 para bases de diseño.....	58
13. Valores promedios de operación para la validación del intercambiador E-104	59
14. Simulaciones para el flujo de suspensión concentrada en el E-104.....	60
15. Simulaciones para el flujo de agua de enfriamiento en el E-104.....	62
16. Datos de Validación del Intercambiador E-123.....	63
17. Simulaciones para el flujo de suspensión Concentrada en el E-123.....	64
18. Simulaciones para el flujo de agua de enfriamiento en el E-123.....	65
19. Datos de validación del Intercambiador E-104.....	67
20. Simulaciones para el flujo de suspensión concentrada en el E-104.....	67
21. Simulaciones para el flujo del agua de enfriamiento en el E-104	69
22. Datos de validación del Intercambiador E-123.....	70

INDICE DE TABLAS (Cont.)

Tabla N°	Pág.
23. Simulaciones para el flujo de suspensión concentrada en el E-123.....	71
24. Simulaciones para el flujo de agua de enfriamiento en el E-123.....	72
25. Resultados de la simulación utilizando el programa realizado en Delphi, para los intercambiadores, con $D_p = 200\mu$	75
26. Balance de masa para el circuito del primer reactor.....	80
27. Balance de masa para el circuito del segundo reactor.....	81
28. Resultados de la simulación del primer reactor para la polimerización de PEAD a Presión de $7,8 \text{ Kg/cm}^2$ y Temperatura de $82 \text{ }^\circ\text{C}$	82
29. Resultados de la simulación para el segundo reactor para la polimerización de PEAD a Presión de $3,5 \text{ Kg/cm}^2$ y Temperatura de $80 \text{ }^\circ\text{C}$	83
30. Conversión de etileno en los reactores de polimerización.....	83
31. Influencia de los cambios realizados al proceso, en los resultados de las simulaciones.....	93
32. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-104.....	102
33. Resultados del cálculo de calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-104.....	103
34. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-123.....	104
35. Resultados del cálculo de calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-123.....	104
36. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-104 (Caso N° 2).....	105
37. Resultados del cálculo de calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-104.....	106
38. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-123 (Caso N° 2).....	107

INDICE DE TABLAS (Cont.)

Tabla. N°	Pág.
39. Resultados del cálculo del calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-123 (Caso N° 2).....	108
40. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-101, al aumentar el flujo de etileno.....	108
41. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-121, al aumentar el flujo de etileno	109
42. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-101, al aumentar el flujo de hidrógeno	110
43. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-121, al aumentar el flujo de hidrógeno.....	111
44. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-101, al aumentar el flujo de recicló.....	112
45. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-121, al aumentar el flujo de recicló.....	113
46. Datos del flujo de suspensión concentrada utilizados en el programa de Delphi.....	113
47. Geometría del Intercambiador E-123.....	114
48. Propiedades de la suspensión concentrada.....	114
49. Propiedades del hexano.....	118
50. Propiedades del agua de enfriamiento utilizadas en el cálculo.....	122

INDICE DE FIGURAS

Figura N°	Pág.
1. Síntesis y purificación del monómero.....	18
2. Polimerización.....	19
3. Recuperación / Seperación.....	20
4. Procesamiento del polímero.....	20
5. Distribución de peso molecular de un polímero.....	23
6. Proceso de polietileno a baja presión en fase suspensión catalizado a través de metales de transición.....	30
7. Diagrama de la planta para la producción de PEAD de Polinter C. A. en el Complejo Petroquímico El Tablazo, Edo. Zulia.....	34
8. Diagrama de bloques del intercambiador de calor.....	51
9. Diagrama de bloques del reactor de tanque con agitación continua.....	56
10 Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el Intercambiador E-104.....	61
11 Variación de la temperatura de salida del flujo del agua de enfriamiento en el intercambiador E-104.....	62
12 Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el Intercambiador E-123.....	65
13 Variación de la temperatura de salida del flujo de agua de enfriamiento en el Intercambiador E-123	66
14. Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el Intercambiador E-104 para el caso N° 2	68

INDICE DE FIGURAS (Cont.)

Figura N°	Pág.
15. Variación de la temperatura de salida del flujo de agua de enfriamiento en el Intercambiador E-104 para el caso N° 2	69
16. Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el E-123 para el caso N° 2	71
17. Variación de la temperatura de salida del flujo de agua de enfriamiento en el Intercambiador E-123.....	73
18. Variación del flujo de calor con respecto a la variación del diámetro de partícula.....	76
19. Proceso en suspensión para la obtención de polietileno.....	77-79
20. Variación del flujo de polietileno para el primer circuito de polimerización.....	85
21. Variación del flujo de polietileno para el segundo circuito de polimerización	86
22. Variación del peso molecular de polietileno para el primer circuito de polimerización.....	87
23. Variación del peso molecular de polietileno para el segundo circuito de polimerización	88
24. Variación del índice de polidispersidad para el primer circuito de polimerización	89
25. Variación del índice de polidispersidad para el segundo circuito de polimerización	90
26. Variación de la conversión global para el primer circuito de polimerización	91
27. Variación de la conversión global para el segundo circuito de polimerización	92
28. Ventana del simulador ASPEN Plus para un intercambiador sencillo.....	123

INDICE DE FIGURAS (Cont.)

Figura N°	Pág.
29. Ventana del simulador ASPEN Plus para un intercambiador tipo carcaza y tubo.....	123
30. Ventana del programa realizado en Delphi 6.0.....	124

NOMENCLATURA

A_S	Área transversal de Flujo del agua de enfriamiento	(m^2)
A_{ST}	Área de la sección transversal del tubo interno	(m^2)
B	Espaciamiento entre los deflectores	(m)
C	Distancia entre los tubos	(m)
$C_{p_{HEX}}$	Capacidad Calorífica del hexano	(J/Kg K)
$C_{p_{SL}}$	Capacidad Calorífica de la suspensión concentrada	(J/Kg K)
C_{p_S}	Capacidad Calorífica de la suspensión líquido-sólido	(J/ Kg K)
C_S	Concentración másica del Polietileno en la mezcla	(adim)
d_e	Diámetro equivalente de la carcaza	(m)
D_{int}	Diámetro interno de la carcaza	(m)
d_{int}	Diámetro interno del tubo interno	(m)
D_p	Diámetro de la partícula en el Suspensión concentrada	(μm)
$F_{m_{AF}}$	Flujo másico del Agua de enfriamiento	(Kg/h)
F_{SL}	Flujo másico de la suspensión concentrada	
G_{AF}	Velocidad másica del Agua de enfriamiento	(Kg / m^2 K)
K_{SL}	Conductividad Térmica de la suspensión concentrada	(W/m-K)

NOMENCLATURA (Cont.)

N_t	Número de tubos	(adim)
Nu_{SL}	Número de Nusselt	(adim)
h_{SL}	Coeficiente local de transferencia de calor de película del Suspensión concentrada	(W/m ² K)
Re_{AF}	Número de Reynolds del flujo de Agua de enfriamiento	(adim)
Re_{SL}	Número de Reynolds de la suspensión	(adim)
Pt (Pitch)	: Grado de inclinación	(m)
ρ_{AF}	Densidad del Agua de enfriamiento	(Kg/m ³)
ρ_{HEX}	Densidad del hexano	(Kg / m ³)
ρ_S	Densidad peomedio líquido-sólido	
ρ_{SL}	Densidad de la suspensión concentrada	(Kg / m ³)
ϕ	Relación de viscosidades	(adim)
μ_{HEX}	Viscosidad de la Hexano	(Kg/ m-seg)
μ_S	Viscosidad de la Suspensión concentrada	(Kg/ m-seg)

ABREVIATURAS

ANSI	Normas Americanas de dimensiones.
BSI	Instituto Británico de Normas.
CETIC	Combustión Engineering Technology Investment Corporation.
DIN	Normas Alemanas de dimensiones.
DFP	Diagrama de flujo de Proceso.
DTI	Diagrama de Tubería e Instrumentación.
HMW-PE	Polietileno de gran peso molecular.
HTRI	Instituto de Investigaciones de Intercambio de Calor.
IPHL	Internacional Petrochemical Holding Limited.
ISO	Normas Internacionales de dimensiones
PDI	Índice de polidispersidad
PEAD	Polietileno de Alta Densidad.
PEBD	Polietileno de Baja Densidad.
PELBD	Polietileno lineal
PEQUIVEN	Petroquímica de Venezuela S.A.
POLINTER	Polioléfinas Internacionales C.A.
POLYNRTL	Método no aleatorio de propiedades de dos líquidos para polímeros
RCSTR	Reactor de Tanque con Agitación Continua.
SI	Sistema Internacional de Unidades.
SQP	Método de Secuencia Cuadrática.
TEMA	Asociación de Fabricantes de Tubos Intercambiadores.

1. INTRODUCCIÓN

La producción de poliolefinas es una de las actividades de mayor importancia dentro de la industria química y petroquímica. El polietileno de alta densidad (PEAD), entre otros, es uno de los constituyentes mayoritarios de películas, cauchos, fibras y otras aplicaciones de moldeo que se desarrollan en la industria ^(González, M., 1989). En la actualidad, el proceso de polimerización en suspensión es el que domina la producción. Este tipo de polimerización en fase líquida ha llegado a ser un proceso de importancia, ya que tiende a generar costos de operación sustancialmente menores y una separación del polímero y solvente mucho más simple que en los procesos donde el polímero es disuelto en el solvente ^(Mcketta, J., 1993).

El rediseño y dimensionamiento de cualquier planta industrial, en el caso particular de la polimerización de etileno en suspensión, para el incremento de la capacidad de producción, implican grandes costos de inversión y cambios a nivel del proceso que deben ser cuidadosamente seleccionados para garantizar la operabilidad de la planta y la calidad de los productos obtenidos.

Los procesos de modelaje y simulación permiten estudiar estos cambios de una forma sencilla y a un bajo costo de inversión y además permiten definir si los cambios seleccionados son factibles a escala industrial.

De esta forma el presente proyecto, desarrollado a través de PDVSA-Intevep, tiene como finalidad el desarrollo de modelos de simulación de reactores para producir PEAD en suspensión. Esta simulación tiene el objetivo de predecir el desempeño de los mismos, y puede ser empleada como plataforma para estudios de optimización y diversificación de la producción de polietileno en suspensión. Adicionalmente permitirá realizar asistencia técnica al proceso empleado en el Complejo del Tablazo, Estado Zulia, donde se produce el PEAD, ya que se pueden predecir condiciones de operación, sin la necesidad de realizar estos ensayos a escala

comercial. También se espera contribuir con la generación de conocimientos que lleven a la optimización del uso de estos sistemas, y disponer de una metodología para realizar estas predicciones evitando pérdidas económicas por concepto de: materia prima, mano de obra, insumos y mantenimiento de equipos, entre otros, lo cual consecuentemente va en beneficio de los usuarios de las simulaciones.

Para la realización de este estudio, se utilizó el paquete de simulación ASPEN Polymer PlusTM 11.1 en conjunto con el paquete ASPEN B-JAC, estableciendo el diagrama de flujo del proceso, balance de masa y las condiciones de operación tanto de los intercambiadores de calor asociados al sistema de reactores, como del sistema en conjunto o sección de polimerización.

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo General

Desarrollar un modelo para la simulación del proceso de producción de Polietileno de Alta Densidad en Suspensión en Reactores de mezcla completa, utilizando el paquete de simulación Aspen® 11.1/ Polymers Plus ® y Aspen B-JAC®.

2.2 Objetivos Específicos

- ❖ Familiarizarse con el proceso de producción de polietileno en suspensión con diluyente pesado y con los conceptos básicos de polimerización, propiedades de control de calidad del producto y condiciones de operación.
- ❖ Estudiar los diagramas de flujo de proceso (DFP) y los diagramas de tuberías e instrumentación (DTI) referentes al procesamiento para la producción de Polietileno de Alta Densidad.
- ❖ Familiarización y entrenamiento en la plataforma de simulación de el paquete de simulación Aspen® 11.1/ Polymers Plus ® y Aspen B-JAC®, para la revisión de los modelos disponibles.
- ❖ Simular un intercambiador de calor para el reactor agitado de producción de polietileno en suspensión., para su incorporación en los reactores.
- ❖ Simular el circuito de polimerización de dos reactores agitados en serie para la producción de polietileno en suspensión.
- ❖ Realizar un estudio de sensibilidad del proceso de producción de polietileno de alta densidad para el aumento de la producción y de la calidad del producto.

3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1 Polímeros

Un polímero es una macromolécula construida a partir de varias unidades repetidas más pequeñas que le proporcionan una estructura lineal o ramificada. Aunque una gran variedad de polímeros se producen naturalmente, los polímeros sintéticos o hechos por el hombre pueden ser hechos a la medida para satisfacer necesidades específicas del mercado, por lo que los mismos afectan nuestras vidas diarias a una tasa siempre creciente. La producción global de polímeros sintéticos es de aproximadamente 100 millones de toneladas anuales, generando productos como plásticos, caucho, fibras, pinturas, y adhesivos empleados en la manufactura de materiales de empaque y construcción, neumáticos, ropa, y productos de protección y/o decorativos (Polymer Plus User Guide, 2000).

3.2 Clasificación de los polímeros

Los polímeros sintéticos son clasificados de varias formas según (Wiseman, P., 1986):

- El tipo químico de monómero: poliolefinas, poliésteres, poliamidas.
- La reacción de formación: polimerización por adición o condensación
- El proceso utilizado: por cargas, en solución, suspensión, o en emulsión.
- Su utilización: termoestables, termoplásticos, fibras, plásticos, enchapado, etc.

Las características del polímero son usualmente generadas por el nombre del polímero, como el polietileno y el poliestireno, o por el tipo de monómero químico como acrílico o poliéster. Los polímeros son también con frecuencia distinguidos por sus aplicaciones finales como *elastómeros*, *fibras* y *plásticos*.

Como se puede notar, existen numerosos métodos de clasificación de los polímeros; sin embargo este trabajo tratará mas específicamente acerca de los plásticos. Estos son sustancias relativamente fuertes de elevado peso molecular. Un

plástico usualmente llega a ser lo suficientemente suave al calentarlo como para llevar a cabo moldeo bajo presión. Existen dos tipos de plásticos comerciales: los termoplásticos y los plásticos termoestables. Los termoplásticos son aquellos plásticos que se ablandan con el calor. Ejemplos de polímeros termoplásticos son el polietileno y el polipropileno. Los termoplásticos usualmente poseen una cristalinidad moderada y pueden alcanzar una amplia elongación; sin embargo, su elongación no es reversible como en el caso de los elastómeros. Los plásticos termoestables son usualmente rígidos debido a la gran cantidad de entrecruzamiento que existe entre sus cadenas de polímero. Ejemplos de éstos son los poliestéres insaturados y las resinas de urea y fenol formaldehído.

3.3 Estructura de los polímeros

Como ya se mencionó antes, los polímeros pueden ser definidos como largas moléculas o macromoléculas donde una estructura pequeña se repite a lo largo de la cadena. Por esta razón, los polímeros tienden a presentar diferentes comportamientos físicos a los de las moléculas pequeñas, también denominadas *monómeros*, que son las unidades de construcción de los polímeros. Los polímeros sintéticos son producidos cuando los monómeros son enlazados a través de la polimerización llegando a ser una estructura repetitiva de *segmentos* dentro de la cadena. Cuando dos o más monómeros se enlazan entre sí se forma un polímero. Las cadenas pequeñas de polímeros contienen 20 o menos unidades repetitivas que son usualmente denominadas *Oligómeros* ^(Polymer Plus User Guide, 2000).

El hecho de que a lo largo de la cadena de polímero sea posible encontrar de forma repetida segmentos identificables, provee de vías convenientes para categorizar polímeros. Los polímeros pueden ser clasificados basados en la composición de los segmentos o en su secuencia como:

- Homopolímeros – Contienen un tipo de unidad repetida, la cual puede ser observada dentro de un segmento, cuando se emplea el mismo monómero.
- Copolímeros – Los cuales tienen dos o más unidades repetidas. Los copolímeros pueden encontrarse en configuraciones al azar, alternadas, en bloque.

Si consideramos los arreglos de una cadena dada, aparece otro tipo de clasificación. Según ésta, los polímeros pueden ser: lineales, ramificados (con cadenas largas o cortas), estrella, escalera y malla.

Otra clasificación que resulta de la estructura del polímero tiene que ver con el estado físico. Un polímero sólido puede ser:

- Amorfo – Cuando las cadenas no están arregladas en una forma en particular.
- Cristalino – Cuando las cadenas están arregladas de una forma en particular.

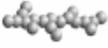
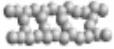
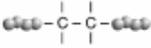
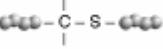
Una clasificación relacionada a la anterior, divide los polímeros en base a sus propiedades térmicas y mecánicas en:

- Termoplásticos (pueden ir de sólido a fundido y viceversa).
- Termoestables (permanecen sólidos a través del calentamiento).
- Elastómeros (los cuales poseen propiedades elásticas).

Finalmente, los polímeros pueden ser clasificados basados en su forma de manufactura dentro de: plásticos, fibras, películas, capas, adhesivos, espumas, y compuestos.

En la Tabla N° 1 se ilustran los diferentes tipos de polímero basada en la estructura de la cadena de polímeros.

Tabla N° 1. Clasificación de polímeros según su estructura física *(Polymer Plus User Guide, 2000)*.

Clasificación	Tipo	Estructura física
Estructura de la cadena de polímeros	Lineales	
	Ramificados	Corto 
		Largo 
	Estrella 	
	Tipo Escalera 	
Malla 		
Composición / Secuencia de Segmentos	Homopolímero	
	Copolímero	Alternado 
Bloque 		
Estado Físico	Amorfo 	
	Cristalino 	
Estructura de la Cadena	Homocadena (solo carbón en la cadena)	
	Heterocadena (carbón y otros átomos en la cadena)	

3.4 Reacciones de polimerización

Los polímeros sintéticos son formados a través de dos reacciones generales: Las *reacciones en cadena* (polimerización por adición), y las *reacciones por etapa* (polimerización por condensación) (Wiseman, P., 1986).

3.4.1 Polímeros de adición o de crecimiento en cadena

Este es el tipo de reacción de polimerización más empleado. Ejemplos importantes de este tipo de polimerización son el polietileno, poliestireno, y varios elastómeros. La Tabla N° 2 contiene los polímeros de adición más comunes y sus usos más importantes.

Tabla N° 2. Algunos polímeros de adición más comunes y sus usos más importantes

(Wiseman, P. 1986)

Nombre del polímero	Monómero	Polímero	Uso general
Polietileno Baja densidad LDPE Alta Densidad HDPE	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$ CH_2-CH_2	Termoplástico
Polipropileno PP	$\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \dots\text{CH}-\text{CH}_2 \end{array}$	Termoplástico
Polivinilcloruro PVC	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{Cl}$	$\begin{array}{c} \text{Cl} \\ \\ \dots\text{CH}-\text{CH}_2 \end{array}$	Termoplástico
Poliestireno	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_5 \\ \\ \text{CH}_2=\text{C} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_5 \\ \\ \text{C}-\text{CH}_2 \\ \\ \text{H} \end{array}$	Plástico
Polibutadieno	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$... $\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2$...	Elastómero

La polimerización por adición es usualmente iniciada por radicales libres; sin embargo también es posible emplear catalizadores catiónicos, aniónicos y de

coordinación. La polimerización se lleva a cabo por la auto-adición de moléculas insaturadas una a otra sin perder moléculas pequeñas. Este tipo de polimerización se realiza a través de reacciones en cadena, (aunque algunas pueden ser llevadas a cabo por mecanismos de reacción por etapa). Una característica distintiva de las cadenas de polimerización por adición es que los polímeros de alto peso molecular son formados inmediatamente aún a bajas conversiones, y que el monómero está siempre presente en cantidades apreciables durante la polimerización (Wiseman, P., 1986).

La clasificación de las reacciones de polimerización se muestran en la Tabla N° 3, pero se tratará más específicamente acerca de la polimerización por coordinación, debido a que esta es la reacción utilizada para la simulación de los reactores de producción de PEAD.

Tabla N° 3. Clasificación de reacciones de polimerización por adición (Wiseman, P., 1986).

Reacciones de polimerización	Principales aspectos
Polimerización vía radical libre.	Los iniciadores de radical libre son compuestos químicos que poseen un enlace covalente débil que se rompe fácilmente en dos radicales libres cuando son sometidos a una fuente de calor. Ejemplos de este tipo de compuestos son los peróxidos, hidroperóxidos y los compuestos azo. En cada etapa que ocurre, la reacción de un radical libre es acompañada por la formación de un nuevo radical libre para continuar la cadena de reacción. Las cadenas también pueden ser terminadas por contacto con las paredes del contenedor en otras formas similares. El resultado global de las reacciones de transferencia de cadena es un polímero con un peso molecular promedio bajo.
Polimerización iónica	Estas reacciones son catalizadas a través de una especie iónica o por un par de iones el cual es formado con el monómero en un paso inicial y puede adicionar más monómeros. Las reacciones de adición de cadenas iónicas son diferentes a las reacciones de adición de radicales libres. En la primera, está involucrado un ión opuesto y se encuentra en extrema proximidad de la cadena de propagación del polímero; mientras que en la segunda, los radicales se encuentran libres.

Tabla N° 3 (Cont.).

Reacciones de polimerización	Principales aspectos
Polimerización catiónica.	<p>La polimerización catiónica es inducida a través de iniciadores químicos o por irradiación. Las especies activas están conformadas por iones carbonios. Unión carbonio es un grupo de átomos que contiene un átomo de carbón con sólo seis electrones y una carga positiva.</p> <p>La polimerización catiónica no es tan útil como la polimerización aniónica en cuanto al control de la estructura del polímero. Es utilizada con mayor frecuencia cuando el control no es necesario</p>
Polimerización aniónica	<p>La polimerización aniónica es iniciada empleando bases como, por ejemplo, el Li^+NH_2^-. Los compuestos organometálicos como el n-butil-litio son también efectivos como catalizadores de polimerización aniónica. Este tipo de polimerización puede ser utilizada para polimerizar óxidos orgánicos.</p>
Polimerización por coordinación	<p>Como esta polimerización es la que se va a utilizar en la simulación, se comentará de ella más adelante.</p>

3.4.1.1 Polimerización por coordinación.

En la polimerización iónica los iones de transporte de cadena están siempre balanceados por un ión de carga opuesta. Estos iones no se encuentran usualmente asociados uno con el otro. Sin embargo, si el centro reactivo y el metal son apreciablemente covalentes, el proceso es denominado *polimerización por coordinación*. Este es un tipo de polimerización vía iónica aún cuando un anión separado no se encuentre presente. Su reactividad se debe a su carácter tipo aniónico.

Los catalizadores Ziegler-Natta están entre los tipos de catalizadores de coordinación más importantes a nivel industrial y son complejos de haluros de metales de transición con compuestos organometálicos. La combinación más importante es cloruro de titanio-alquilo de aluminio.

Las polimerizaciones de este tipo poseen dos ventajas distintas en comparación con la polimerización vía radical libre: genera polímeros lineales y permite el control estereoquímico.

La polimerización vía radical libre del etileno, por ejemplo, produce un polímero con una estructura ramificada o polietileno de baja densidad, PEBD. El polietileno producido empleando un catalizador de coordinación es esencialmente libre de ramificación. Las moléculas se ubican muy cerca unas de otras para producir polietileno de alta densidad, PEAD, el cual posee un alto grado de cristalinidad y mayor rigidez que el polietileno de baja densidad.

3.4.2 Polimerización por condensación

La condensación o *reacción por etapas de condensación*, en general, procede a partir de la reacción entre dos moléculas con la eliminación de una de menor tamaño, a medida que la molécula resultante crece hacia una macromolécula. La de menor tamaño es usualmente agua. Los pasos son esencialmente independientes y los reactantes deben ser di o poli funcionales. En la polimerización por etapas, el monómero desaparece mucho más rápido que en la polimerización por cadenas de reacción. Primero se forma un dímero, luego un trímero, un tetramero, etc. Los polímeros de elevado peso molecular se obtienen al final de la polimerización. Se requieren largos tiempos de reacción para obtener conversiones elevadas. La reacción de polimerización más importante de este tipo de mecanismo son la esterificación, la formación de amidas y varias reacciones de condensación de formaldehído.

3.5 Suspensión concentrada (“slurry”)

Es importante destacar que las corrientes de flujo de pasta de polietileno que se manejan tanto en la simulación del intercambiador como en la simulación del reactor se encuentran en fase suspensión concentrada.

Las suspensiones concentradas se encuentran en diversas industrias, y según su utilidad se definen como: ^(Brown, N., 1991)

- Caldos o mezclas de líquido y partículas sólidas, en industrias de biotecnología.
- Dispersiones (o partículas coloidales) en industrias de químicos finos.
- Lodos en industrias de perforación.
- Pastas en las industrias farmacéuticas y de alimentos.
- Pulpas en industrias de papel y de la madera, y en el procesamiento industrial de minerales.
- Cienos cuando son dragados de cursos de agua.
- Enfangados concentrados y colado en procesamiento mineral.
- Fangos cuando están asociados con aguas residuales y desperdicios.
- Suspensiones a lo largo y ancho de la industria.

El aspecto común de todas estas mezclas es que consisten de sólidos mezclados con un líquido y que pueden ser consideradas como “mezclas sólido-líquido de dos fases”. Las suspensiones concentradas son fluidos que pueden ser transportados en tuberías, en contraste con otros sólidos húmedos que no pueden ser bombeados y no fluyen bajo la influencia de la gravedad. Tales mezclas de sólido y líquido son mejor transportadas por otros medios más apropiados para volúmenes de sólido como cintas transportadoras y tornillos de alimentación. El comportamiento de flujo de mezclas sólido-líquido se extiende desde aquellos similares a líquidos de fase sencilla hasta aquellos que apropiadamente pueden ser considerados sólidos y líquidos en fases definitivamente separadas ^(Brown, N., 1991).

El enorme rango de mezclas descritas como suspensiones concentradas, se encuentran en un amplio rango de sectores industriales que incluyen la ingeniería química, ingeniería civil (mecanismos de suelo, aguas residuales, bombeo de concreto), procesamiento mineral, y la industria de los alimentos. Los esquemas de

clasificación tratan de generar una base racional para describir la apariencia física y el comportamiento de flujo de las mezclas sólido-líquido.

Los atributos que usualmente son utilizados para caracterizar una suspensión concentrada son las propiedades físicas de sus constituyentes, en particular la de los sólidos tales como: *densidades* de las fases constituyentes, *concentración* de sólidos, *tamaño de partícula característica* (o, de forma más apropiada, distribución de tamaño de partícula), *características* de la forma de la partícula.

3.5.1 Tamaño y forma de partícula

La terminología asociada con los diferentes tamaños de partícula se han desarrollado dentro de varias disciplinas; el esquema que se muestra en la tabla N° 4 fue generado por ingenieros civiles (BSI 1975) ^(Brown, N., 1991).

Tabla N° 4. Terminología descriptiva aplicada a partículas minerales redondas y sub-angulares.

Rango de tamaño, d/(mm)	Sub-descripción	Descripción principal
$d < 0.002$		Arcilla
$0.002 < d < 0.006$	Fino	Cieno
$0.006 < d < 0.02$	Medio	Cieno
$0.02 < d < 0.06$	Grueso	Cieno
$0.06 < d < 0.2$	Fino	Arena
$0.2 < d < 0.6$	Medio	Arena
$0.6 < d < 2$	Grueso	Arena
$2 < d < 6$	Fino	Grava
$6 < d < 20$	Medio	Grava
$20 < d < 60$	Grueso	Grava

3.5.2 Comportamiento de la cadena que forman las suspensiones concentradas

Las partículas irregulares, granulares y no-cohesivas usualmente se asocian con las suspensiones concentradas que poseen cierta tendencia de asentamiento o sedimentación, en cambio se utiliza el término de partículas finas para aquellos con una baja tendencia al asentamiento. La cuantificación de estas descripciones subjetivas debe ser realizada considerando el tiempo de estructuración en el cual la sedimentación, es muy importante.

Para propósitos de diseño, se puede tratar una suspensión concentrada de arreglo de sedimentación como una suspensión que no se encuentra concentrada si, por ejemplo, el tiempo de residencia principal de las suspensiones concentradas en la línea o tubería es pequeño, al ser comparado con el flujo de sedimentación de la partícula. De manera similar, lo que puede parecer una suspensión concentrada de sedimentación relativamente lenta, puede llegar a ocasionar grandes problemas en una tubería de longitud amplia y casi horizontal. Por ejemplo, el tiempo de residencia de una suspensión concentrada con una velocidad de flujo de 1 m s^{-1} en una tubería de 100 Km de longitud es de aproximadamente 30 h. Este tiempo es lo suficientemente largo como para que partículas con una velocidad de sedimentación de 0.001 mm s^{-1} doblen la concentración en la primera mitad de 200 mm de tubería. El efecto de los sólidos que sedimentan incrementará la resistencia a la fricción de la suspensión concentrada, lo que puede llegar a generara precipitados, junto con excesivos requerimientos de bombeo.

Existe una tendencia frecuente de clasificar las suspensiones concentradas rígidamente dentro de casos límite de *sedimentación* y *no sedimentación* como resultado de un comportamiento de muestra estática de la suspensión concentrada. Un esquema de este tipo es indudablemente útil para un amplio rango de las suspensiones concentradas, pero como cualquier esquema general, se debe aplicar con precaución.

Mientras los atributos físicos son de gran utilidad, los comportamientos de flujo y propiedades reológicas de las suspensiones concentradas son los de mayor importancia ya que los mismos reflejan la resistencia de la suspensión concentrada a fluir.

3.5.3 Regímenes de flujo y flujos de diseño

Las suspensiones concentradas que muestran una marcada tendencia de sedimentación de sólidos bajo condiciones de no-flujo, exhiben un comportamiento de dos fases. Para flujos horizontales o casi horizontales la distribución de partículas sobre la sección transversal de la tubería es por lo general descrita en función del régimen de flujo. Los flujos dominados por la gravedad también presentan un amplio rango de flujos de diseño que son empleados para describir el movimiento de las partículas a través de una sección recta de la tubería. Aunque ambos términos son empleados para asistir la descripción de flujos no-verticales, en la práctica su uso es limitado debido a la alta naturaleza subjetiva de la terminología.

Las características de flujo que presentan los arreglos de las suspensiones concentradas resultan de un proceso complejo de intercambio de momento entre las dos fases. Si se interpreta correctamente, las características del flujo proveen una guía considerable para la selección racional de técnicas para predecir el comportamiento hidráulico y las condiciones de operación más apropiadas para las tuberías.

3.5.4 Caracterización de las suspensiones concentradas

Cuando se consideran características de flujo es conveniente clasificar las suspensiones concentradas como pertenecientes a una o dos clases; como la suspensión concentrada que no sedimenta, en la cual la fase sólida no muestra tendencia de presentar sedimentación bajo condiciones de no-flujo, o una muy pequeña; o como suspensiones concentradas *de sedimentación*. Las suspensiones concentradas que generalmente muestran poca tendencia a generar sedimentaciones

son fangos de aguas residuales, barros de perforación, soluciones de carbón fino y suspensiones concentradas de piedra caliza fina (como el material que se alimenta a los hornos de cemento).

En la práctica, este esquema de clasificación es frecuentemente realizado a partir de consideraciones referentes a las técnicas experimentales disponibles para generar estimados de los requerimientos de energía para bombear las suspensiones concentradas a través de las tuberías. Las suspensiones concentradas de no-sedimentación pueden ser tratadas con frecuencia como sistemas de fase sencilla. Las técnicas de viscosímetro pueden frecuentemente ser utilizadas para proveer datos apropiados de suspensiones concentradas de no-sedimentación de forma similar a como son empleadas para líquidos de fase sencilla. Sin embargo, la fase de separación bajo esfuerzo, no asociada con las fuerzas gravitacionales, se puede presentar y debe ser valorada o tomada en cuenta. Las técnicas de viscosímetro desarrolladas para sistemas de fase sencilla no son aplicables para las suspensiones concentradas que presentan sedimentación de sólidos cuando la mezcla no es sometida a un esfuerzo. Estas suspensiones deben ser probadas bajo ensayos más elaborados. Desde un punto de vista mecánico las mezclas que tienen tendencia a generar sedimentación presentan un comportamiento de dos fases distinto, y los mecanismos bajo los cuales el momento es transferido a través del material pueden ser considerados separadamente para cada fase.

3.6 Manufactura de polímeros

Las moléculas de polímero poseen los mismos enlaces químicos y fuerzas intermoleculares que otras especies químicas más pequeñas. Sin embargo, las interacciones son aumentadas debido al tamaño molecular del polímero. Otros aspectos importantes en la producción de polímeros son la proporción de optimización de la producción, la minimización de las pérdidas y acatamiento de las normas ambientales, el incremento en el rendimiento, y la calidad del producto.

Sumado a estas consideraciones, las características del procesamiento de los productos terminales y sus propiedades deben ser tomadas en cuenta en la producción de polímeros ^(Polymer Plus User Guide, 2000).

❖ *Etapas del proceso de manufactura de polímeros*

Los procesos de manufactura de polímeros están usualmente divididos en las siguientes etapas básicas ^(Polymer Plus User Guide, 2000).

1. Síntesis y purificación del monómero.
2. Polimerización.
3. Recuperación/Separación.
4. Procesamiento de polímero.

Estos cuatro pasos pueden ser llevados a cabo por el mismo manufacturador dentro de una planta simple integrada, ó en uno o más pasos por compañías específicas. A continuación se muestran estos pasos:

❖ *Síntesis y purificación del monómero*

En la Figura N° 1 se muestra un esquema de la síntesis y purificación del monómero. Durante el desarrollo de esta etapa, la mayor preocupación es la pureza. Esto se debe a la presencia de contaminantes, tales como agua o gases disueltos, que pueden afectar las etapas subsecuentes de la polimerización por: envenenamiento del catalizador, agotamiento de los iniciadores o producción de reacciones indeseables de transferencia de cadena o de ramificación. Otra preocupación de este paso es prevenir la degradación del monómero a través de un manejo apropiado de los mismos o con la adición de estabilizadores. El control de emisiones, y la disposición de las pérdidas son también factores importantes en este paso.

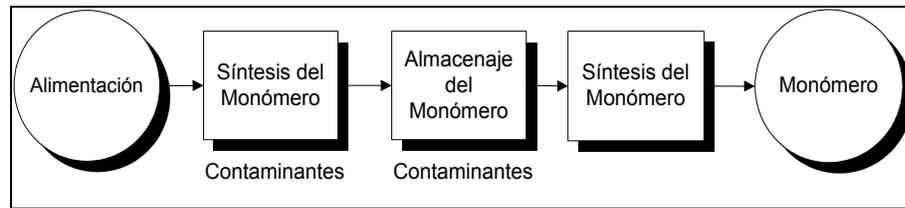


Figura N° 1. Síntesis y purificación del monómero.

❖ *Polimerización*

El paso de polimerización es usualmente el más importante en términos de viabilidad económica de los procesos de manufactura. El resultado deseado para este paso es un producto polimérico con propiedades específicas, tales como: distribución de peso molecular, índice de fluidez, composición, cristalinidad / densidad y viscosidad.

Los obstáculos que se deben afrontar para alcanzar este propósito dependen tanto del mecanismo de síntesis del polímero (crecimiento en cadena o paso de crecimiento), y del proceso de polimerización empleado. Los procesos de polimerización pueden ser por cargas, semi-carga, o continuos; adicionalmente, pueden ser llevados a cabo en volumen, solución, suspensión concentrada, en fase gas, en suspensión, o en emulsión ^(Polymer Plus User Guide, 2000). Las reacciones de polimerización por adición son generalmente exotérmicas; por lo tanto, es necesario controlar el calor de la reacción. Esto puede ser controlado de alguna forma a partir del uso de un solvente apropiado, empleado en la polimerización en solución, o limitando la reacción a bajas conversiones (como en la polimerización por cargas), o a través del uso de medios externos de enfriamiento.

Los procesos más importantes empleados en las reacciones de polimerización son: carga, solución, suspensión, y emulsión. La productividad de la polimerización depende de la cantidad de remoción de calor y los niveles de conversión alcanzados por el monómero. La viscosidad de los polímeros en solución y las partículas de los

polímeros en suspensión y la mezcla son consideraciones importantes. Estos factores influyen en la selección de cual tipo de polimerización se va a seleccionar, en suspensión concentrada, solución versus o polimerización en fase gaseosa. Otro ejemplo es la selección de la polimerización en emulsión que es frecuentemente dictada por la forma del producto final, capa base-agua o adhesivo. Otras consideraciones importantes pueden incluir la salud, seguridad y el impacto ambiental (Polymer Plus User Guide, 2000).

En resumen, para el paso de polimerización, las reacciones que ocurren usualmente causan cambios dramáticos en el medio de reacción, lo cual se refleja en una alta cinética de conversión, la distribución del tiempo de residencia, agitación y transferencia de calor, los problemas más importantes en la mayoría de los tipos de procesos. En la Figura N° 2 se muestra un esquema de la polimerización.

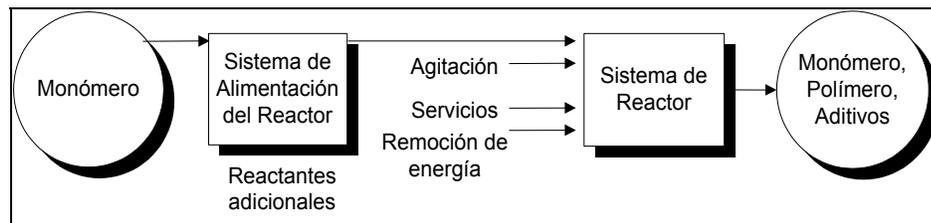


Figura N° 2. Polimerización.

❖ *Recuperación /Separación*

El paso de Recuperación /Separación puede ser considerado como el paso donde al polímero producido se le realiza una purificación adicional o es aislado de los subproductos o reactantes residuales. Como se puede observar en la Figura N° 3 en esta etapa, los monómeros y solventes son separados y purificados para su reciclaje. Los problemas principales de este paso son las transferencias de masa y calor.

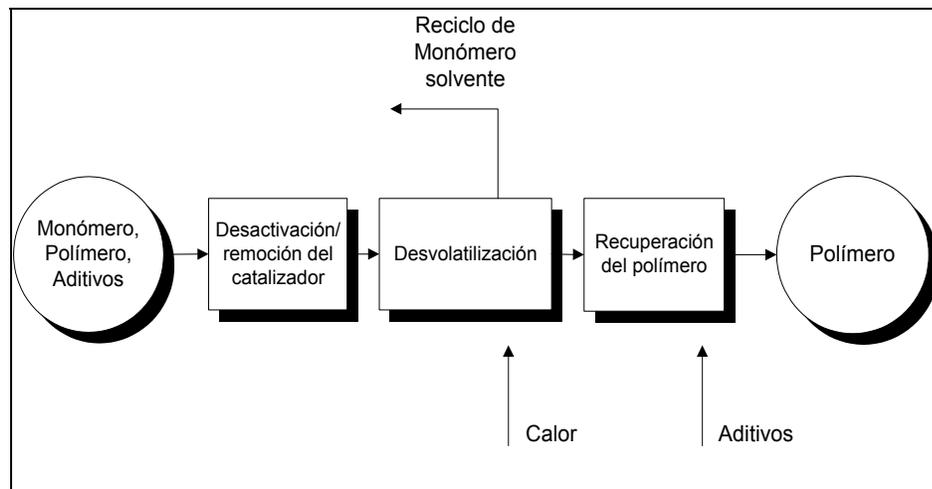


Figura N° 3. Recuperación / Separación.

❖ *Procesamiento del polímero*

El último paso, el procesamiento del polímero, puede ser también considerado como una etapa de recuperación., el polímero que se encuentra en suspensión, es convertido en pellets sólidos o astillas. Un factor importante en esta etapa es el calor de vaporización. En la Figura N° 4 se muestra un esquema del procesamiento del polímero.

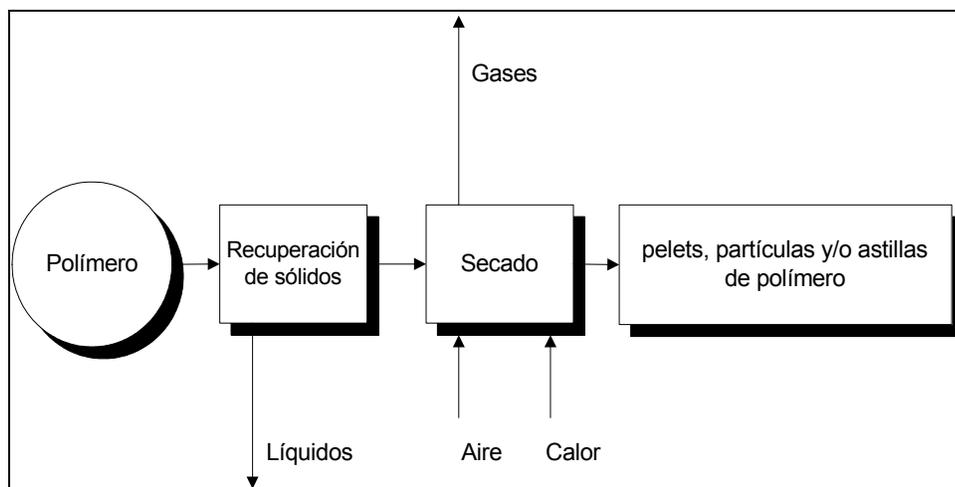


Figura N° 4. Procesamiento del Polímero.

3.7 Polietileno

El polietileno se obtiene por la adición sucesiva de unidades de etileno; en general sus átomos se encuentran unidos en estructuras largas lineales o poco ramificadas cuya fórmula empírica es $(CH_2)_n$ ^(Proceso virtuales, 2002). El polietileno es un termoplástico, designación que se emplea para aquellos polímeros que se ablandan cuando son expuestos al calor, y que retornan a su condición original cuando son enfriados a temperatura ambiente. En la actualidad constituye el mayor volumen de material termoplástico producido y utilizado a nivel mundial ya que se estima que para el año 2005 la demanda global de polietileno será de 60 Millones de Toneladas.

3.7.1 Propiedades de los polímeros

El polietileno es un material utilizado para miles de aplicaciones de productos plásticos gracias a sus propiedades que combinan dureza, resistencia química y flexibilidad. Las propiedades del polietileno pueden ser controladas y modificadas convenientemente, cambiando la densidad peso molecular promedio, y la distribución de peso molecular, mediante la manipulación de las variables del proceso ^(Torres, H., 2003).

3.7.1.1 Propiedades morfológicas

Las propiedades morfológicas requeridas en la producción de polietileno son: densidad aparente alta, tamaño de partícula alto y distribución de tamaño de partícula angosta ^(Torres, H., 2003).

Densidad: Hay que distinguir entre la densidad propiamente dicha y la llamada densidad aparente. La primera esta basada en el volumen del material sólido, homogéneo y compacto, y la última sobre el volumen de un compuesto en forma de polvo. En el caso de los plásticos (polvos de moldeo o productos acabados) en general, sólo se tiene interés la densidad aparente. En el estudio de polvos de moldeo, tiene importancia la densidad aparente de polvos normales, la densidad aparente por

compresión, el factor compresivo y, en algunos casos, la densidad aparente por sacudida o vibración.

Densidad Aparente: La densidad aparente de un polvo de moldeo (norma Española UNE 53.015) se define como la masa dividida por el volumen ocupado por el polvo cuando ha sido vertido de un modo determinado. Se expresa en gramos por mililitro (DIN 53 468).

3.7.1.2 Propiedades dependientes de la estructura del polímero

Distribución de peso molecular: la distribución de peso molecular (Ver Figura N° 5) y otros parámetros tales como, peso molecular promedio, la distribución y el grado de ramificaciones, pueden influenciar fuertemente las propiedades físicas, mecánicas y reológicas de un material polimérico. El polietileno no se escapa de dicha aseveración, ya que sus propiedades mecánicas varían ampliamente, permitiendo su utilización en aplicaciones que exigen buena flexibilidad y dureza, sin mencionar las ventajas al momento de su procesamiento ^(Ortega, 1995)

Peso molecular promedio: los polímeros presentan un peso molecular que es heterogéneo o polidisperso, pues cuando se habla de peso en polímeros, en este contexto se refiere a cantidades promedios. Los promedios de peso molecular más frecuentemente utilizados son el peso molecular promedio en número, que se define como peso total de todas las moléculas dividido por el número total de moléculas, y el peso molecular promedio en peso, que se define como la suma de las fracciones en peso de cada molécula multiplicada por su peso molecular, como se puede observar en la Figura N° 5 ^(Madruga, 1995).

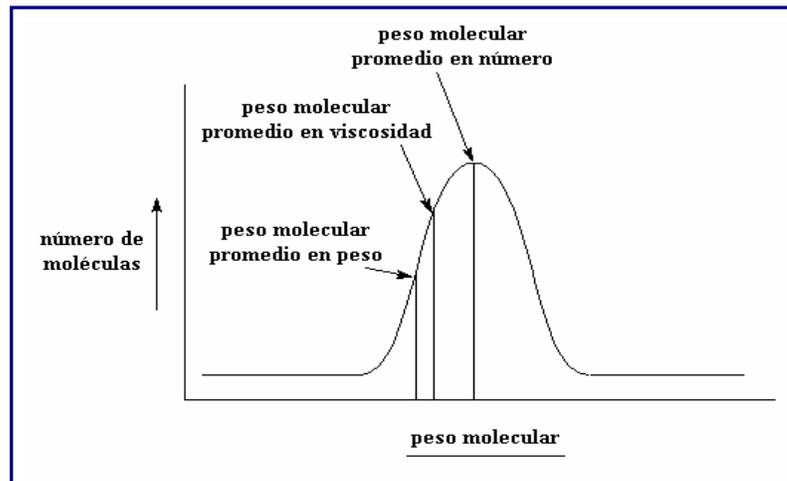


Figura N° 5.Distribución de peso molecular de un polímero.

(www.pscr.usm.edu/macrog/index/htm)

Distribución de peso molecular (PDI): la relación entre el peso molecular promedio en peso y el peso molecular promedio en número, es conocido como el factor de polidispersidad. El valor del factor de polidispersidad da una idea de la distribución de pesos moleculares de una muestra polimérica, considerándose homodispersa cuando el factor de polidispersidad es igual a la unidad y se considera heterodispersa cuando el valor del factor de polidispersidad se aleja más de la unidad.

La distribución de peso molecular es una medida de uniformidad del polímero relacionada al peso molecular (ver Figura N 5). Los polímeros formados por moléculas con pesos moleculares similares poseen una distribución de peso molecular (PDI) angosta; mientras que polímeros constituidos por moléculas que poseen pesos moleculares variados tiene una distribución de peso molecular ancha. Resinas de polietileno con PDI angosta permite obtener productos con mayor fuerza al impacto, mayor brillo y mejor resistencia que otros con PDI anchas; de cualquier modo, el polietileno con amplia distribución de peso molecular es generalmente más fácil de procesar en la fabricación de equipos debido a las bajas temperaturas y por ende menor consumo de energía requerido durante la fabricación.

Durante la fabricación del polietileno, las variables de operación son controladas para alcanzar la densidad, peso molecular promedio y distribución de pesos moleculares deseados ^(Mcketta, 1993).

3.7.2 Tipos de polietileno

El Polietileno se encuentra dividido en los siguientes grupos ^(Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, 1986).

Polietileno de Baja Densidad (PEBD) incluye polímeros realizados mediante polimerización vía radical libre: homopolímeros con densidades entre 0.915 - 0.930 g/cm³, que contengan ramificaciones alquilas, con 2 - 8 átomos de carbonos (lo más común son 4) así como largas ramificaciones, formadas durante la síntesis, y copolímeros que contengan grupos polares como resultado de la copolimerización utilizando vinil acetato entre otros.

Polietileno lineal de baja y media densidad (PELBD) solamente incluye copolímeros α -olefinas con densidades entre 0.915 - 0.940 gr/cm³, usualmente contiene 1-butano, 1-hexano o 1-octano. La mayoría de estos se producen mediante catálisis tipo Ziegler, excepto para algunos polietilenos con densidades entre 0.938 - 0.940 gr/cm³ que se producen mediante catálisis Philips.

Polietileno de Alta Densidad (PEAD) incluye polímeros que se producen a partir de catálisis Philips o Ziegler, homopolímeros con densidades entre 0.960 - 0.970 gr/cm³, incluyendo el Polietileno de gran peso molecular (HMW-PE), y copolímeros α -olefinas con densidades entre 0.940 - 0.958 gr/cm³, usualmente contienen 1-buteno o 1-hexano.

Polietileno de ultra alto peso molecular son polietilenos especiales con peso molecular diez veces mayor que los productos de HMW-PE; esencialmente no tienen ramificaciones y requieren técnicas de síntesis y fabricación especiales.

Es importante mencionar que hay que tener en cuenta que las propiedades del polietileno varían ampliamente para las diferentes clases o grados de cada uno de ellos.

❖ *Propiedades del polietileno de alta densidad* (Manual Sección 200, 1982).

❖ *Propiedades físicas*

El polietileno de alta densidad es un material rígido, inodoro, sin sabor y de color lechoso. La densidad del PEAD varía de acuerdo a su grado de cristalinidad, entre 0.95 y 0.97 gr/cm³ a 23 °C. A medida que aumenta la temperatura la densidad disminuye encontrándose el punto de fusión a unos 113 °C. Al igual que otros materiales plásticos, su conductividad térmica es baja.

❖ *Propiedades mecánicas*

Las propiedades mecánicas del PEAD dependen de la longitud alcanzada por las moléculas durante la polimerización y del porcentaje de cristalinidad presente en el artículo terminado. Cuanto más elevado es el peso molecular promedio mejores son las propiedades mecánicas, pero se hace más difícil su procesamiento por lo que debe existir una relación entre ambos. Debido a su alto porcentaje de cristalinidad, en comparación con otros materiales termoplásticos, el PEAD tiene una excelente rigidez, la cual permite su uso en aplicaciones que requieren materiales con un módulo de elasticidad alto. Su resistencia a los impactos inclusive a temperaturas de -80 °C hace al PEAD un material excelente para aplicaciones en refrigeración.

❖ *Propiedades eléctricas*

El polietileno de alta densidad tiene una baja conductividad eléctrica por lo que es un aislante de primera calidad.

❖ *Propiedades químicas*

La naturaleza parafínica del polietileno de alta densidad y su alto porcentaje de cristalinidad hacen que el PEAD sea resistente a todos los solventes conocidos, a los ácidos, bases y sales en cualquier concentración. Es inerte a los aceites hidrocarburos.

El PEAD es totalmente atóxico, por ser un compuesto orgánico, no volátil e insoluble cuyas moléculas están formadas exclusivamente por átomos de carbono e hidrógeno el polietileno de alta densidad ha sido por muchos años un material idóneo para envasar productos alimenticios. El PEAD es además impermeable al agua con una permeabilidad muy baja al vapor de agua y otros gases, lo que garantiza la frescura de los alimentos contenidos en envases fabricados con este material.

3.7.3 Procesos para la manufactura del polietileno

Existen diversos procesos para la manufactura de polietileno, que dependen de factores como el producto a ser manufacturado, el grado de polimerización, cristalinidad, condiciones de operación, etc.

En la Tabla N° 5 se presenta una comparación de los distintos procesos de manufactura de polietileno y sus principales aspectos:

Tabla N° 5. Procesos para la manufactura del polietileno *(Mcketta, J., 1992)*.

Procesos para la manufactura del polietileno	Principales aspectos
Proceso a alta presión	<p>En el proceso a alta presión, el etileno es polimerizado a polietileno empleando presiones muy elevadas y catalizadores de radicales libres. Dependiendo del producto particular a ser manufacturado, pueden ser alimentados al proceso varios comonomeros y modificadores en conjunto con el etileno.</p> <p>El reactor puede ser o bien un tubo largo enchaquetado (por encima de 1600 metros de longitud) o un autoclave de mezclado. En cualquiera de los dos casos se requiere un tubo o recipiente de pared gruesa debido a las presiones muy elevadas que se necesitan durante el proceso. La conversión de etileno a polietileno en un reactor tubular generalmente se encuentra entre 20 y 30 %, lo cual resulta en un elevado reciclaje de monómeros, que deben ser recomprimidos hasta la presión de reacción.</p> <p>La naturaleza altamente ramificada de los polímeros limita el proceso para manufacturar productos con densidades por debajo de 0.930 gr/cm³. Aun cuando el proceso de alta presión de catalizador de radical libre es capaz de producir polietileno por encima de un amplio rango de índice de fluidez, la productividad del reactor es altamente sacrificada para la producción de materiales de muy bajo Índice de Fluidez.</p>
Proceso a Baja Presión en fase solución y catalizador de metal de transición	<p>Los procesos en solución de baja presión son operados a temperaturas por encima del punto de fusión del polímero o de su solubilidad en el medio de reacción. Los procesos en fase solución pueden variar por el tipo de solvente utilizado, presión de operación, y mecanismo de remoción del calor de polimerización. El peso molecular del polímero puede ser controlado sobre un amplio rango controlando la temperatura y por adición de hidrógeno.</p>

Tabla N° 5 (Cont.)

Procesos para la manufactura del polietileno	Principales aspectos
Proceso a baja presión en fase suspensión y catalizador de metal de transición	Se explicara más adelante
Proceso a baja presión en fase gas con catalizador de metales de transición.	<p>En el proceso de baja presión en fase gas la polimerización ocurre en estado gaseoso. El etileno y los comonomeros son circulados continuamente empleando un compresor en el lecho fluidizado del proceso a fin de proveer la resina de fluidización, un recurso de monómeros, y un método de remoción de calor de polimerización. El reactor de mezclado en fase gas emplea un agitador para generar la circulación. En este caso la temperatura promedio debe ser controlada por debajo del punto de fusión del polímero.</p> <p>El proceso en fase gas genera la mayor versatilidad de productos de todos los procesos de producción de polietileno. Las propiedades del producto son generalmente controladas por el tipo de catalizador, comonomero, y su concentración en el medio de reacción. El proceso es capaz de generar productos con densidades por encima del rango completo de la mayoría de las aplicaciones, desde películas lineales de baja densidad hasta productos de moldeado por soplado de alta densidad.</p>

- *Proceso a baja presión en fase suspensión y catalizador de metal de transición*

El presente proyecto tiene el objetivo de llevar a cabo el modelaje y simulación de reactores agitados de producción de polietileno en suspensión y por esta razón se va a explicar con más detalle este proceso en particular.

En el proceso a baja presión en solución, el etileno y los comonomeros son polimerizados a bajas presiones y temperaturas utilizando catalizadores de metales de transición. La reacción de polimerización se lleva a cabo a temperaturas por debajo del punto de fusión del polímero resultante de forma tal que el polímero se encuentra como partículas sólidas suspendidas en una mezcla de reacción de monómeros disueltos en un diluyente inerte.

El etileno, los comonomeros, y el diluyente son las materias primas básicas requeridas por el proceso en solución. Así, los comonomeros como propileno, 1-buteno, y 1-hexeno son utilizados para controlar la densidad del polímero, dependiendo de las propiedades del producto deseado. El diluyente seleccionado depende en particular del proceso en solución utilizado; varios se encuentran en operación comercial. El proceso mostrado en la figura N° 6, puede ser utilizado con un diluyente ligero, como isobutano, o con un diluyente relativamente pesado, como el hexano.

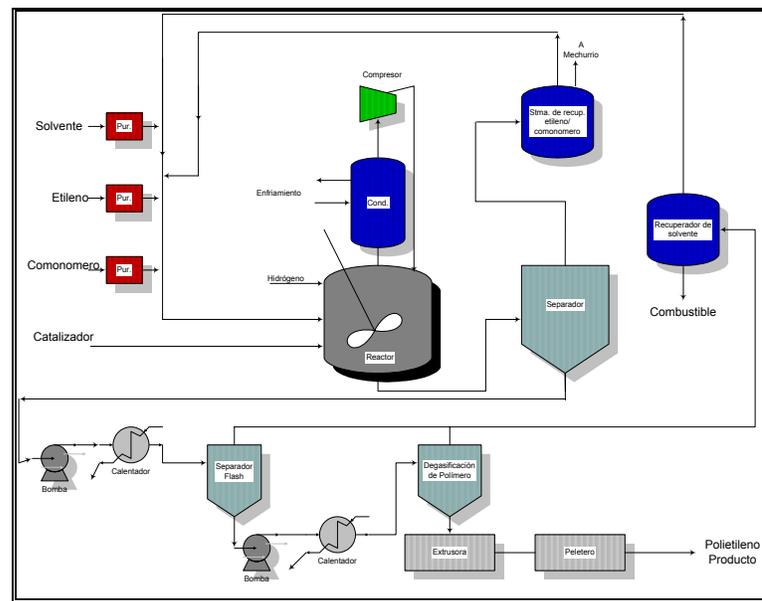


Figura N° 6. Proceso de polietileno a baja presión en fase suspensión catalizado a través de metales de transición (Mcketta, J., 1993)

- *Purificación de la materia prima*

El etileno, comonomero, y diluyente son alimentados al separador del sistema de purificación que remueve trazas e impurezas comúnmente presentes en las materias primas disponibles a nivel comercial. Estas impurezas pueden incluir partes por millón (ppm) de agua, oxígeno, compuestos sulfurados, monóxido de carbono (CO), y dióxido de carbono (CO₂), que funcionan como veneno para el catalizador de metal de transición. El sistema de purificación de etileno típicamente incluye tamices moleculares dependiendo de la calidad de las materias primas. Los separadores requeridos para la desgasificación también son instalados tanto para las corrientes de comonomeros como para las de diluyente.

- *Reacción.*

Luego de la purificación, las materias primas son alimentadas al reactor, el cual posee una chaqueta de enfriamiento de agua para remover el calor del proceso de polimerización. El catalizador del metal de transición, el diluyente, y los monómeros son añadidos y movidos continuamente a través del agitador. Los monómeros

polimerizan como una solución suspendida que es circulada a través del reactor. El polímero es removido a través de un asentador que se encuentra en forma vertical, donde las partículas se pueden asentar en alguna extensión del diluyente. Estas partículas concentradas en diluyente son removidas por descarga intermitente en la sección de separación del proceso.

- *Separación Monomero-Polímero.*

La mezcla de polímero, monómeros no reactantes, y diluyente es separada bajando la presión en una etapa de separación del sistema. Las partículas de polietileno son alimentadas de la sección de separación a un secador donde una purga de nitrógeno remueve el diluyente residual; luego son alimentadas a un mezclador en el cual pueden ser incorporados los aditivos; y finalmente se envían a un extrusor y sistema donde el producto es llevado a su forma final (en pelletas) para su almacenaje y transporte. La combinación de diluyente separado y monómeros no reactantes es enviada al sistema de recuperación.

- *Recuperación de monomeros y diluyente.*

El diluyente y los monómeros son separados en el paso de recuperación de diluyente. El etileno disuelto y el comonomero en el diluyente son destilados y enviados ya sea a la unidad de recuperación de monómero o son quemados como combustible. Si la unidad de producción de etileno se encuentra cercana, los monómeros pueden ser reciclados hacia esa unidad de recuperación; de otra forma, se requiere de una unidad de recuperación de monómeros a fin de recuperar los monómeros no reactantes. El diluyente es secado y enviado a almacenaje y luego es recirculado de regreso al reactor.

- *Propiedades del producto y sus Aplicaciones.*

La densidad del producto es controlada por la concentración y tipo de comonomero mantenido en el reactor. El índice de fluidez es controlado por la temperatura del reactor y por el agente de transferencia de cadena, como el

hidrógeno. La temperatura debe ser controlada en un rango reducido para evitar que el polímero se hinche, lo que ensuciaría el reactor. Los procesos en suspensión son capaces de producir todos los productos de moldeo por soplado del PEAD, las películas, y aplicaciones de tubería, y la mayoría de las aplicaciones de moldeo por inyección y rotacional. Este proceso es capaz de generar productos para las aplicaciones de baja densidad; sin embargo, dado que la solubilidad de las resinas se incrementa con una disminución de la densidad, los productos comercialmente disponibles a partir de los procesos en suspensión poseen densidades generalmente por encima de los 0.930 g/m^3 .

3.8 Descripción del proceso de producción de polietileno de alta densidad (PEAD) del Complejo Petroquímico El Tablazo

El proceso de producción del polietileno en el Complejo Petroquímico del Tablazo, se encuentra en manos de Poliolefinas Internacionales. C.A. (POLINTER C.A.). Esta compañía es una de las llamadas empresas mixtas, cuyo capital está conformado por la participación accionaria de Petroquímica de Venezuela, S.A (PEQUIVEN), International Petrochemical Holding Limited (IPHL), Grupo Zuliano, C.A., Sofilago, S.A., Grupo de Empresas Mitsui y Combustion Engineering Technology Investment Corporation (CETIC). Esta empresa produce polietilenos de alta y baja densidad, polietilenos lineales así como también, mezclas de polietilenos, llamando a su producto final polietilenos *venelene*. La cadena de suministro de esta empresa, se inicia en PDVSA, empresa que se encarga de procesar el gas natural asociado del petróleo, obteniendo etano. Posteriormente, el etano es convertido en etileno por PEQUIVEN, S.A., procesando al etano en sus plantas de olefinas.

A partir de allí, POLINTER, C.A, a través de los procesos de polimerización, utiliza el etileno como materia prima para la producción de los diferentes tipos de polietilenos; para ello, cuenta con 3 plantas de producción; la planta de polietileno de alta densidad con tecnología de baja presión, la planta de producción de polietilenos

lineales, con tecnología de mediana presión y por último, la planta productora de polietileno de baja densidad, con tecnología de alta presión (Aguirre, L., 2002).

A continuación se describirá el proceso de producción de Polietileno de Alta Densidad, empleado en el Complejo Petroquímico El Tablazo. Se desarrolla con detalle este proceso en particular debido a que es el esquema en el que se fundamentará la simulación del proceso para la producción de polietileno en suspensión en el presente proyecto.

A nivel de planta, es posible hablar de siete zonas o etapas de proceso (como se puede observar en la figura N° 7), en cada una de las cuales se lleva a cabo una tarea determinada. La primera etapa corresponde a la zona de preparación de catalizadores, en donde, como su nombre lo indica, se introducen dentro de la unidad las materias primas necesarias para la elaboración del *slurry* o suspensión concentrada de catalizador que posteriormente se utilizará en el proceso de polimerización. En este punto, también es alimentado el cocatalizador al proceso.

Luego a esta etapa, se encuentra la zona de polimerización como tal, en donde se encuentran dos reactores de polimerización tipo suspensión en serie, a los cuales les son introducidas las diferentes corrientes necesarias para llevar a cabo el proceso; la corriente de la suspensión concentrada de catalizador, la corriente de hidrógeno, la corriente de etileno y la corriente de comonomero.

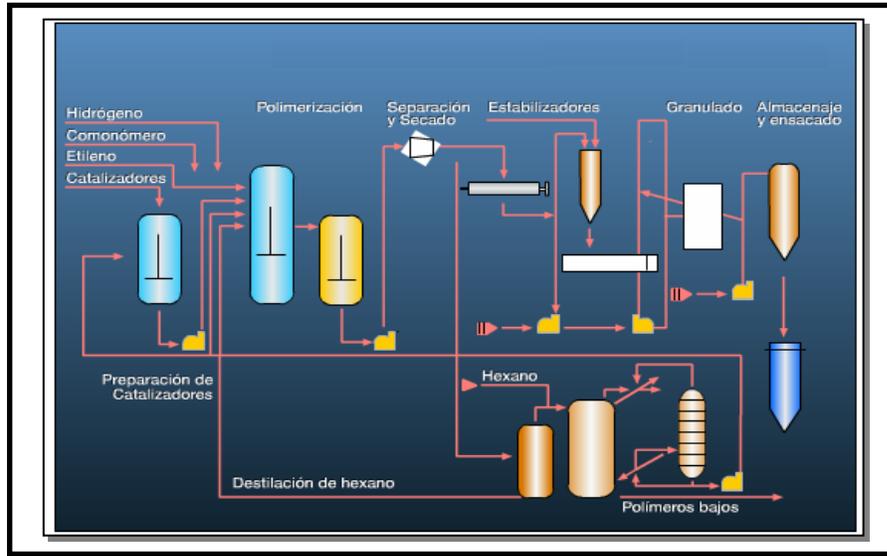


Figura N° 7.Diagrama de la planta para la producción de PEAD de Polinter C.A. en el Complejo Petroquímico El Tablazo, Edo. Zulia ^(Aguirre, L., 2002).

Cuando el polímero se forma, éste entra a la zona de separación y secado, para así obtener el polímero puro, es decir, sin que éste se encuentre mezclado con solvente, catalizador, etc.

Posterior al secado, el polímero entra a las zonas de la planta que lo hacen comercial. Estas zonas son la zona de estabilización, la de peletizado y la de almacenaje y ensacado, en donde básicamente, el polímero obtenido se peletiza y se empaca para así poder comercializarlo.

Por último, se encuentra el área de destilación de hexano, (el cual trabaja como diluyente dentro del proceso de polimerización). En esta zona de la planta, se garantiza el suministro de este componente al proceso con el nivel de calidad necesario para que en primer lugar, se pueda dar el proceso de polimerización del etileno, y en segundo lugar, para que el polímero que se obtenga sea de alta calidad.

3.9 Simulación del proceso

El proceso de simulación para la producción de polietileno de alta densidad implica tanto el montaje en el paquete ASPEN Polymer Plus, como su validación tal como se explica a continuación:

3.9.1 Aspen PlusTM

La simulación del proceso se va a realizar utilizando el paquete de simulación, ASPEN PlusTM. Este paquete ha sido desarrollado por Aspen Technology, Inc y es un programa de simulación de flujos de procesos utilizado para predecir, evaluar y optimizar el comportamiento en el mundo real de los procesos químicos (Polymer Plus User Guide, 2000).

El proceso de simulación con Aspen PlusTM permite predecir el comportamiento de un proceso utilizando relaciones básicas de ingeniería tales como el balance de masa y energía, equilibrio químico y fase, y reacciones cinéticas. Al ingresar la información termodinámica confiable, condiciones operativas reales, y modelos rigurosos de equipo en Aspen Plus, se puede simular el comportamiento real de una planta. Aspen Plus puede ayudar a diseñar mejores plantas e incrementar la rentabilidad de una planta existente.

En Aspen PlusTM se pueden cambiar especificaciones tales como la configuración del diagrama, condiciones operativas, y composiciones de suministro, para poner en marcha nuevos casos y alternativas de análisis. Para analizar los resultados, se puede generar planos, reportes, ilustraciones tipo PDF y archivos extensos.

Aspen PlusTM permite realizar un rango amplio de tareas adicionales, tales como:

- Realizar estudios de sensibilidad y estudio de casos
- Generar resultados gráficos habituales y tabulares
- Estimar propiedades físicas
- Establecer modelos de simulaciones a la información de plantas
- Optimizar un proceso
- Intercambiar resultados con archivos extensos
- Compartir entradas y resultados entre otras aplicaciones de Microsoft Windows®.

Aspen Plus contiene información, propiedades, modelos de unidades operativas, incumplimiento establecidos, reportes, y otras capacidades y cualidades desarrolladas para las aplicaciones industriales específicas, tales como simulación de refinación del petróleo.

3.9.1.1 ASPEN Polymers PlusTM

ASPEN Polymers PlusTM es un sistema de modelaje de procesos con propósitos generales para la simulación de procesos de manufactura de polímeros. El sistema de modelaje incluye modelos para estimar propiedades termoplásticas y bloques para realizar los cálculos del funcionamiento de la cinética de polimerización y los balances de masa y energía asociados a la misma. ASPEN Polymers PlusTM también incluye modelos para la caracterización de la estructura molecular del polímero, permite realizar cálculos de reología y propiedades mecánicas; y permite buscar estas propiedades a través de hojas de flujo (Polymer Plus User Guide, 2000).

Los módulos del Polymer Plus también incluyen caracterización de la estructura molecular del polímero y cálculo de las propiedades mecánicas y

reológicas. Existen otras características adicionales que permiten simular los procesos de manufactura en su totalidad.

ASPEN Polymers PlusTM proporciona las herramientas que permiten manufacturar polímeros para obtener el modelo y los beneficios del proceso. Este paquete puede ser utilizado para construir modelos de procesos en dos formas: utilizando ASPEN Plus para estados estacionarios; y utilizando ASPEN Dynamics o ASPEN Custom ModelerTM para modelos dinámicos. En ambos casos, las herramientas utilizadas para representar sistemas de polimerización incluyen las siguientes categorías: caracterización del Polímero, propiedades físicas, reacciones cinéticas y datos.

Los modelos correlativos y predecibles se encuentran disponibles en Polymers Plus para representar las propiedades termo-físicas de un sistema de polímeros, la fase de equilibrio y los fenómenos de transporte; además es posible la combinación de algunos métodos de propiedades físicas con estos modelos.

El paso de polimerización representa la etapa más importante en un proceso de polímeros. En este paso la cinética juega un papel fundamental; ASPEN Polymers PlusTM proporciona un mecanismo de construcción cinética para diferentes procesos de polimerización: crecimiento por cadena o crecimiento por pasos. También existen modelos para representar la modificación de reacciones de polimerización, y para modelos cinéticos estándares de química.

En general ASPEN Polymers PlusTM es una herramienta completa de simulación que permite desarrollar y obtener:

- Metodologías para caracterización de la estructura molecular del polímero (composición, peso molecular, ramificaciones).

- Propiedades físicas, termodinámicas y mecánicas.
- Base de Datos de parámetros de propiedades.
- Equilibrio de Fases.
- Modelos cinéticos de Polimerización (radicales libres, Ziegler – Natta, emulsión).
- Modelos de Operaciones Unitarias.
- Establecer balances de masa y energía para un esquema de proceso dado.
- Predecir las propiedades del polímero: grado de Polimerización (en número y en peso), peso molecular (en número y en peso), ramificaciones: tipo y frecuencia y densidad.
- Cálculo de la conversión.
- Calor de Reacción, flujos de calor.

En este caso los métodos de propiedades físicas utilizados para los polímeros es el Método POLYNRTL, utiliza el modelo NRTL de polímeros para solucionar los cálculos de propiedades termodinámicas y el modelo de van Krevelen para cálculos de propiedades termofísicas. Los modelos de van Kravelen son utilizados para calcular la entalpía de los polímeros, la energía libre de Gibbs y el volumen molar, estas propiedades son esenciales para los cálculos de balances de masa y energía.

3.9.1.2 Aspen B-JACTM

Todos los intercambiadores de calor determinan las condiciones térmicas y las fases de una mezcla con una o más corrientes de entrada. Los modelos de intercambiadores simulan el funcionamiento de los condensadores, enfriadores o de intercambiadores de dos o más corrientes, y permiten generar las curvas de calentamiento o de enfriamiento ^(Aspen Plus Unit Operation Models, 2001). El software de Aspen B-JACTM incluye un número de programas para el diseño térmico, diseño mecánico, estimación de costos, y diagramas para intercambiadores de calor y recipientes a presión ^(Aspen B-JAC User Guide, 2001).

Los programas que utilizan ASPEN B-JACTM son listados en la Tabla N° 6.

Tabla N° 6 .Programas que utilizan Aspen B-JACTM.

Programa	Función
Aspen Hetran TM	Diseño de transferencia de calor de Intercambiadores de carcaza y tubo
Aspen Temas TM	Diseño mecánico, costos de estimación y diagramas de diseño de intercambiadores de carcaza y tubo y de recipientes a presión.
Aspen Aerotran TM	Diseño de transferencia de calor de equipos de aire acondicionado, intercambiadores de calor, recuperación de combustible caliente y secciones de convección de calentamiento de fuego

Los programas Aspen B-JAC *Hetran* y *Aerotran* se encuentran completamente integrados con el software de simulación de procesos Aspen PlusTM. Es posible tener acceso a los modelos desde Aspen Plus seleccionando en la unidad de operación de transferencia de calor los bloques *Hetran* o *Aereotran*. Los datos de las corrientes y las propiedades de los compuestos para esa simulación pueden ser suministrados a los programas de Aspen B-JAC, desde el archivo de Aspen Plus o desde los archivos de entrada de Aspen B-Jac, los cuales se encuentran referenciados en los registros de entrada de Aspen Plus para la simulación. Todos los datos de la geometría del intercambiador de calor deben ser especificados en los registros de entrada de Aspen B-JAC.

Durante la simulación, Aspen Plus llamará muchas veces al programa de análisis Aspen B-JAC para predecir las condiciones de salida del equipo de transferencia de calor. Los resultados del análisis regresan a Aspen Plus. En el

ambiente de Aspen Plus se pueden observar los resultados de la simulación del intercambiador; o bien, o todos los detalles de los resultados de la simulación de ese bloque se pueden observar a través de la interface de Aspen B-Jac.

Aspen Hetran es el programa para diseñar, evaluar y llevar a cabo la simulación térmica de intercambiadores de carcaza y tubo. Este programa abarca la gran mayoría de las aplicaciones industriales de intercambiadores de tubo y carcaza, incluyendo la mayoría de combinaciones de condensación, vaporización y en los casos que no existan cambios de fases ^(Aspen B-JAC User Guide, 2001).

En el modo de diseño, *Aspen Hetran* investiga el intercambio de calor óptimo para satisfacer la función del calor específico dentro de los límites permitidos de cambios en la presión, velocidad, carcazas, diámetros, longitud de tubos, y otras restricciones específicas del usuario. En este modo de diseño, el programa produce una vía óptima detallada, que muestra las alternativas consideradas por el programa a medida que va investigando cual puede ser el diseño satisfactorio. Estos “diseños intermedios” indican las restricciones que controlan el diseño, y señalan que parámetros se pueden modificar para reducir el tamaño del intercambiador. El modo de evaluación es utilizado para chequear el desempeño de un intercambiador con toda la geometría especificada bajo cualquier condición operativa deseada. El programa revisará para ver si existe suficiente área superficial para las condiciones especificadas del proceso y notifica al usuario si la unidad está bajo la superficie. En el modo de simulación, se especificará la geometría del intercambiador de calor y las condiciones de entrada del proceso, y así el programa predecirá las condiciones de salida para ambas corrientes.

El programa de Aspen Hetran tiene una extensa variedad de valores fijados por defecto. Esto permite especificar una cantidad mínima de entrada de información para evaluar el diseño. Para condensaciones y/o vaporizaciones complejas, el programa requiere información del equilibrio líquido-vapor y las propiedades a varios niveles

de temperatura, se puede ingresar la información directamente en el archivo de información, o puede ser que Aspen Hetran genere la curva.

El programa incluye un diseño mecánico básico, que determina el espesor de la carcaza, el cabezal del cilindro, y el espesor estimado de los tubos. Aspen Hetran™ incorpora todas las condiciones aplicables de las normas de conducta de la Asociación de Fabricantes de Tubos Intercambiadores (TEMA) y puede ser utilizado para diseñar todos los tipos de intercambiadores TEMA. El programa también incluye muchas de las normas ANSI, DIN e ISO que se aplican a los intercambiadores de calor.

Se estima un costo estimado para cada diseño generando información sobre el impacto de su valor en los cambios del diseño. La rutina que se utiliza para estimar el costo, es la misma utilizada en el programa Qchex y usa la misma base de datos del costo de materiales.

3.9.2 Parámetros de la simulación

En la simulación que se va a realizar, existen diferentes parámetros o variables, que son determinantes para realizar un análisis de los resultados obtenidos, estos parámetros se clasifican como se muestra en la Tabla N° 7.

Tabla N° 7. Parámetros de la simulación.

Parámetros fijos	Son los valores de diseño suministrados por hojas de datos de los equipos, o por los informes de diseño. Entre estos se encuentran: Flujos del proceso, temperatura y presión de operación, dimensiones de los equipos, composición de las cargas de entrada en los equipos y otras condiciones de operación.
Parámetros manipulables	Son parámetros que pueden variar sus valores al momento de realizar la simulación, entre este grupo se tiene: Métodos termodinámicos y propiedades físicas de los componentes, parámetros cinéticos, factor de ensuciamiento de los intercambiadores, caída de presión en los equipos.
Variables observadas	Estos son los resultados obtenidos después de realizar la simulación, temperatura y/o flujo de salida de los equipos, composición de las corrientes de salida y del reciclo del proceso, condiciones finales de operación de los equipos, entre otras.

4. METODOLOGÍA

Para cumplir con los objetivos propuestos se siguió la siguiente metodología:

4.1 Identificación de los aspectos bibliográficos involucrados con la producción de Polietileno de Alta Densidad

En la sección 3 de este trabajo se presentan los fundamentos teóricos involucrados con el conocimiento de polietileno de alta densidad y todo lo relacionado con su producción. Los aspectos más importantes pueden resumirse como sigue:

- Definición de conceptos básicos del polietileno y del proceso de polimerización de polietileno.
- Definición de procesos de producción de polietileno de alta densidad en suspensión, con diluyente pesado que se produce en Venezuela.
- Investigación sobre el método de cálculo que utiliza el simulador Aspen Plus para calcular los coeficientes de transferencia de calor.
- Variables influyentes en la operación del reactor mezcla completa sobre la calidad y rendimiento del producto.
- Investigación sobre las propiedades de control de calidad del producto y las variaciones de las condiciones de operación.
- Estudio del diagrama de flujo y del diagrama de Instrumentación del proceso de producción de polietileno encontrados en la literatura, con el fin de plantear un modelo adecuado para la simulación de la planta de producción de PEAD.

4.2 Entrenamiento en el uso de la plataforma de simulación ASPEN 11.1 / Polymer PlusTM

El entrenamiento en la plataforma de simulación ASPEN 11.1 se realizó basado en los procedimientos que se describen con detalle, más adelante, en las secciones 4.4 y 4.5, y a partir de ciertos modelos que se obtuvieron previamente a partir de un estudio de las corrientes del proceso del circuito de polimerización correspondiente al reactor D-201, de *Polinter*. Este estudio se realizó bajo la suposición de equilibrio L/V en el reactor D-201 y en el acumulador de hexano D-205; se efectuó un balance de masa, alrededor de ese reactor que indicó un excesivo arrastre de hexano en la corriente gaseosa efluente del mismo ^(Informe Técnico Intevep, 1996).

4.3 Establecer el esquema de flujo del proceso en estudio, balance de masa y condiciones de operación

A partir de la revisión bibliográfica y de los diagramas de flujos suministrados por la compañía Polinter-Alta, se establecieron los diferentes equipos y los valores de los flujos necesarios para realizar la simulación.

La reacción de polimerización, se produce mediante un proceso de baja presión, que utiliza hexano como diluyente y se lleva a cabo mediante el empleo de dos polimerizadores o reactores, que se encuentran en serie.

El monómero etileno, el cual constituye la principal materia prima; hexano de alta presión deshidratado para el ajuste de la concentración de suspensión concentrada, y catalizadores Ziegler-Natta son continuamente alimentados a ratas específicas a los reactores.

Hidrógeno, como un controlador del peso molecular; así como propileno o 1-buteno, para el ajuste de la densidad se alimentan continuamente con etileno

gaseoso al gas de reciclo que llega a los reactores. Los gases son dispersados por un agitador y se disuelven en el hexano a temperatura de 75°C a 85°C, polimerizando el etileno en presencia del catalizador y formándose una pasta de polímero con una concentración determinada. La presión de polimerización es mantenida por la presión parcial del hidrógeno, el calor latente de hexano en un 80% y el resto por enfriamiento de las chaquetas de los reactores y por los intercambiadores del reciclo de la suspensión concentrada o pasta, gas de reciclo conteniendo gran cantidad de vapores de hexano es transferido, luego de ser condensado y enfriado, al acumulador de hexano, donde se separa en hexano condensado y gas.

Las materias primas utilizadas para el proceso de producción de polietileno de alta densidad son las siguientes:

- Etileno (C_2H_4): es la principal materia que se recibe en la planta, interviene en la reacción de polimerización como monómero del proceso.
- Hidrógeno (H_2): interviene en la reacción de polimerización como agente controlador de la longitud de las cadenas del polímero y por consiguiente en el índice de fluidez.
- *Comonómeros*: se utilizaron en el proceso de polimerización para controlar el valor de la densidad del producto final. Este control se logra ajustando la tasa de alimentación de comonómero versus la tasa de alimentación del etileno. El comonómero se adhiere lateralmente a las cadenas del polímero, creando ramificaciones que aumentan su volumen intersticial y por lo tanto, disminuye la densidad.

Los comonómeros utilizados para producir el polietileno de alta densidad son: el propileno y el 1-buteno.

Propileno (C_3H_6)

1-Buteno (C_4H_8)

- *Catalizadores Zigler –Natta*: para la producción del polietileno de alta densidad se utilizan dos tipos de catalizadores:

-Catalizador ($TiCl_4$): es un compuesto súper activo formado por tetracloruro de titanio soportado en base de magnesio.

-Catalizador $(C_2H_5)_3Al$: es un compuesto líquido a temperatura ambiente formado por trietil de aluminio.

- -Hexano (C_6H_{14}): este hidrocarburo es recibido en planta en estado líquido y almacenado en tanques, se utiliza para mantener la pasta de polietileno en suspensión.

En el balance de masa de los reactores se hicieron n-ecuaciones de balance por componente para obtener los flujos de salida. Para el resto de los equipos se realizaron n-1 balance por componente más un balance global con la finalidad de satisfacer el sistema.

Para establecer las condiciones principales del proceso se utilizaron las directivas operacionales que se muestran en la Tabla N° 8. Para el polímero producido, en este caso el grado de polímero es 6200 B.

Tabla N° 8. Directivas operacionales de la planta Polinter-Alta.

Grado Polímero	Reactor	Etileno Total (t/h)	Relación de Mezcla (%)	IF Reactor (gr/10min)	Presión (Kg/cm^2)	T($^{\circ}C$)
6200 B	D-101	14-15	55	100-150	7,3-7,8	83-85
	D-121		45	0,6-0,8	3,0-3,5	78-81

4.4 Simulación del intercambiador de calor de pasta de polietileno utilizando Aspen B-JAC

A continuación se presentan los pasos que se llevaron a cabo para realizar la simulación del intercambiador de calor de pasta de polietileno utilizando Aspen B-JAC.

4.4.1 Definir el modelo a utilizar en Polymer Plus

La simulación del intercambiador de la suspensión concentrada de polietileno se realizó utilizando las siguientes consideraciones ^(Polymer Plus User Guide, 2000):

- Se realizó el diagrama de flujo del proceso de producción de polietileno de alta densidad en suspensión bajo el ambiente del paquete de simulación ASPEN Polymers PlusTM.
- Se definió que el tipo de intercambiador a utilizar sería el modelo Hetran para el caso de los intercambiadores de carcasa y tubo debido a la disponibilidad de emplear el paquete ASPEN B-JAC, ya que dispone de una mayor cantidad de programas para el diseño térmico, mecánico y esquemas para este tipo de intercambiador. El modelo HeatX (Ver Figura N° 28), fue seleccionado para el caso de los condensadores de tope debido a que no disponía de bases de diseño suficiente para realizar un estudio riguroso de estos equipos, y este modelo posee correlaciones que permiten estimar coeficientes de películas de condensación.
- En la sección de especificaciones globales se colocó el título de la simulación y las unidades (sistema internacional) para los datos de entrada y de salida.
- Se definieron los componentes del sistema, identificando correctamente los polímeros y el segmento del polímero utilizado por el proceso, como se muestra en la Tabla N° 9.

Tabla N° 9. Lista de componentes utilizados en el modelo.

Identificación del compuesto	Tipo	Nombre del compuesto
CAT	Convencional	Tetraetilo de Titanio
COCAT	Convencional	Trietil-Aluminio
E ₂	Convencional	Etileno
H ₂	Convencional	Hidrógeno
HEXANO	Convencional	n-Hexano
HDPE	Polímero	Polímero de alta densidad
E2-SEG	Segmento	R-etileno
E ₃	Convencional	Propileno
E ₄	Convencional	1-Buteno
H ₂ O	Convencional	Agua
C1	Convencional	Metano
C ₂	Convencional	Etano
N ₂	Convencional	Nitrógeno

- Se definieron los 13 compuestos y se colocó el nombre de la librería de propiedades que le corresponde a cada compuesto.
- Se especificaron las características de los componentes. Atributos de los componentes del polímero, tipos de segmentos presentes y la concentración del sitio del catalizador.
- Se seleccionó el modelo POLYNRTL para representar las propiedades termodinámicas del sistema, y para aquellos equipos cuyos flujos están relacionados con el polímero. Adicionalmente, se utilizó el modelo termodinámico NRTL para los equipos que no involucran polímeros. en el caso del agua de enfriamiento se utilizó el método de las tablas de vapor.

- Se definió el modelo cinético de polimerización para representar el sistema de reacción; en este caso es Ziegler-Natta, como se muestra en la Tabla N° 10.

Tabla N° 10. Esquema de reacción del proceso en suspensión para el polietileno de alta densidad.

Tipo de reacción	Reacción	Especies	Descripción
Act-cocat	Catalizador	Cocatalizador	Activación del catalizador
Chain-ini	Etileno	-	Iniciación de la cadena con etileno
Propagación	Etileno	Etileno	Propagación
Chat-mon	Etileno	Etileno	Transferencia de cadena del monómero E-SEG
Chat-H ₂	Etileno	Hidrógeno	Transferencia de cadena para el hidrógeno
Chat-spon	Etileno	-	Transferencia espontánea de la cadena
Deact-spon	-	-	Desactivación espontánea del catalizador

- Se especificó en el bloque del intercambiador, el nombre del archivo del programa de B-JAC que se utilizó.
- Para las corrientes de entrada se especificó el valor del flujo, temperatura, presión y cantidad de componentes que contiene.
- Se corrió el programa en ASPEN y después se grabó bajo la extensión: *.apw.

4.4.2 Simulación en B-JAC

En el entorno ASPEN B-JAC, se especificaron en el diagrama de flujo las siguientes variables:

- El flujo de los componentes de las corrientes de entrada y de los componentes de las corrientes de salida.

- Se especificaron los diferentes parámetros de convergencia del intercambiador indicando que las fases son líquido-vapor en el caso de la suspensión concentrada, y fase líquida para el agua de enfriamiento. Para que B-JAC tome los datos de flujos, composición y propiedades de los compuestos de la simulación realizada en ASPEN, en la opción de propiedades, en la sección de “Datos de Propiedades Físicas”, se especificó la ruta del archivo en ASPEN. (este archivo aparecer con el mismo nombre que tiene en ASPEN pero con la extensión *.APPDF).
- Se especificaron los detalles del cálculo, es decir, direcciones de flujo, caída de presión del intercambiador.
- Se indicó en el archivo de ASPEN-BJAC, el tipo de configuración de la carcasa y de los tubos, señalando el número de tubos, deflectores y boquillas, entre otras especificaciones.

4.4.3 Diagrama de bloques del intercambiador de calor

En la figura N° 8 se presenta el diagrama de bloques del intercambiador que se simuló, se puede observar que las variables de entrada al bloque de balance de energía son flujos, constantes termodinámicas y condiciones de operación de entrada (P y T). Las variables de salida del bloque de balance de energía (Ts) entran al bloque de ecuaciones de diseño en el cual se calcula el calor transferido, y se verifican los parámetros de salida del bloque de balance de energía.

En el bloque de ecuaciones de diseño se mantienen fijos los datos del equipo para poder validar los datos de salida del bloque.

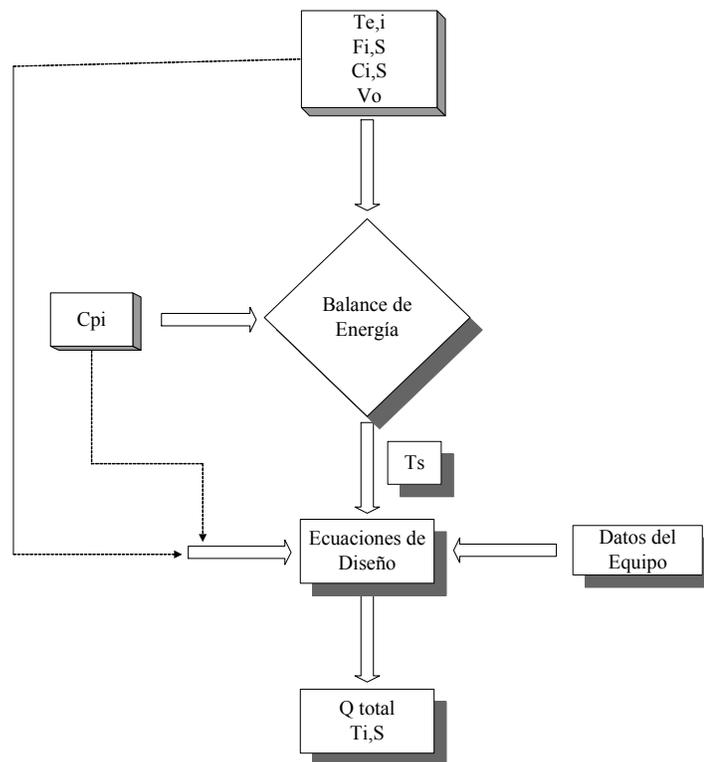


Figura N° 8. Diagrama de bloques del intercambiador de calor

4.4.4 Validación de resultados del intercambiador

Para validar los resultados obtenidos:

- A partir de los valores de las hojas de datos y con las bases de diseño, se realizó la simulación de los intercambiadores, E-104 y E-123.
- Utilizando datos de planta, para dos casos diferentes: (caso N° 1: carga de etileno de 12 t/h y datos del proceso para cada cinco minutos por una hora. caso N° 2: carga de etileno de 14,5t/h y datos del proceso para cada cinco minutos por una hora). Se calculó el calor retirado por el lado carcasa, (agua de enfriamiento), y con este valor y la temperatura de salida de la suspensión concentrada se encontró el valor del flujo. Para cada caso faltaba el valor del flujo de la suspensión concentrada que circulaba por los intercambiadores, por lo que se realizaron diferentes iteraciones utilizando la temperatura de

salida de la suspensión concentrada, hasta encontrar el valor del flujo. Para realizar esta iteración se utilizó un intercambiador tipo Heater (ver Anexos Figura N° 28).

- Realizando un promedio de los datos que se tenían para cada caso, y utilizando un intercambiador tipo Hetran, se realizó la simulación del proceso de intercambio de calor. Al realizar un análisis del flujo de calor y temperatura de salida de la suspensión concentrada, se realizó otra iteración para encontrar el valor adecuado del factor de ensuciamiento.
- Se realizaron las diferentes simulaciones para cada caso, y se calculó el porcentaje de desviación, utilizando la ecuación N° XVI, de las temperaturas de salida del simulador con respecto a las temperaturas de salidas de operación.
- Se compararon los valores de los coeficientes de transferencia de calor y del flujo de calor transferido, del modelo simulado en ASPEN con los coeficientes generados a partir del programa realizado en Delphi.

4.5 Coeficientes de transferencia de calor calculados en Delphi 6.0

Con la finalidad de llevar a cabo una comprobación de la simulación de los intercambiadores de calor realizada en ASPEN B-JAC, se desarrollo un programa bajo el ambiente Borland Delphi 6.0, que permitió comparar los resultados generados para diferentes correlaciones del coeficiente de transferencia de calor.

Para ello, se estudiaron diversas correlaciones encontradas para el cálculo de la viscosidad de la suspensión concentrada que es una de las variables que presenta más inconvenientes en este tipo de procesos, en publicaciones técnicas, literatura abierta, y manuales de diseño de PDVSA; y se seleccionaron aquellas que más se acercaban

a los valores de operación disponibles. A partir de estas correlaciones se elaboró el programa en Delphi 6.0 y se calcularon los coeficientes de transferencia de calor y el calor intercambiado para distintos diámetros de partícula seleccionados en base a los flujos de proceso en planta. Se puede apreciar en los apéndices el cálculo tipo realizado para calcular estos coeficientes de transferencia de calor.

4.6 Simulación de los reactores en serie utilizando Aspen Polymer Plus

Con la finalidad de realizar la simulación de los reactores de polimerización empleando ASPEN Polymer Plus fue necesario:

4.6.1 Definir el modelo a utilizar en Polymer Plus

Para definir el modelo en ASPEN Polymers Plus se utilizaron las siguientes consideraciones ^(Aspen Plus User Guide, 2001):

- Se realizó el diagrama de flujo del proceso de producción de polietileno de alta densidad en suspensión, bajo el ambiente del paquete de simulación ASPEN Polymers Plus, basándose en el diagrama del proceso estudiado, que se muestra en la Figura N° 18.
- Se definió que el tipo de Reactor a utilizar sería el modelo el reactor de tanque con agitación continua, (RCSTR).
- En la sección de especificaciones globales se colocó el título de la simulación, y las unidades para los datos de entrada y de salida.
- Se definieron los compuestos del sistema, y se identificó correctamente el polímero y el segmento del polietileno, y la concentración de los sitios del

catalizador. El catalizador y el cocatalizador son tratados como componentes convencionales estándar. Como se muestra en la Tabla N° 9.

- Se definieron los diferentes tipos de compuestos y se colocó el nombre de la librería de propiedades que le correspondía.
- Se seleccionaron como modelos a ser usados para representar las propiedades termodinámicas del sistema, el modelo POLNRTL, (para los equipos cuyos flujos están relacionados con polímeros), y el modelo NRTL, para los equipos que no se encuentren relacionados con polímeros. En el caso del lado de la carcasa de los intercambiadores (agua de enfriamiento) se utilizó el método de las tablas de vapor.
- Se definió, para cada reactor, el modelo cinético de polimerización para representar el sistema de reacción, en este caso es Ziegler-Natta.
- Se incorporó un mezclador y un intercambiador tipo Heater en la entrada de cada reactor. Este esquema se utilizó para garantizar una temperatura de entrada al reactor homogénea.
- En la salida de cada reactor se incorporó un separador flash para garantizar el equilibrio líquido-vapor y una buena separación a la salida del mismo.

Se especificaron en el diagrama de flujo las siguientes variables:

- Los flujos, temperatura y presión de los materiales de las corrientes de entrada.
- Se especificaron las condiciones de operación de los reactores: presión, la cantidad de calor, el volumen del reactor, el volumen del flujo de la fase de vapor, y se indicó que la reacción es tipo Ziegler-Natta. Para el primer reactor

se simula a una temperatura 82 °C y una presión de 7,8 Kg/cm²; y para el segundo reactor una temperatura de 80 °C y una presión 3,5 Kg/cm².

- Se especificó que el reactor trabajaría utilizando el método termodinámico POLYNRTL.
- Cuando se utilizaba una corriente en la cual existía un compuesto de polímero, se especificaron los atributos del mismo, tales como: composición del segmento, grado de polimerización, peso molecular, y la distribución de peso molecular.

En el modelo de Ziegler-Natta Polymer Plus se toman en cuenta las reacciones importantes presentes en la química del proceso, incluyendo la activación de los sitios, la iniciación de la cadena, la propagación de la cadena, la transferencia de cadena, la desactivación del sitio, la inhibición del sitio, las reacciones de ramificación, etc. El esquema de reacción del proceso en suspensión para el polietileno de alta densidad, se presentan en la Tabla N° 10. Es importante destacar que para obtener estos valores se realizaron iteraciones de las constantes cinéticas para la propagación y para la constante cinética de la transferencia de hidrógeno; y así se logró alcanzar valores óptimos de las características del producto final del polietileno de alta densidad.

4.6.2 Diagrama de bloques del reactor

En la figura N° 9 se presenta el diagrama de bloques del reactor que se va a simular. En el bloque de cinética y equilibrio de fases se introducen las constantes de equilibrio de fase y las constantes de velocidad de reacción (es decir, el orden de reacción “n” y la constante cinética “k”).

A partir de allí se obtienen los parámetros cinéticos para simular el reactor. Los mismos entran al bloque de balance de masa y energía junto con los flujos, temperaturas y constantes termodinámicas de entrada, que permiten tener un valor estimado de la masa del catalizador, volumen del reactor, y de la temperatura de operación.

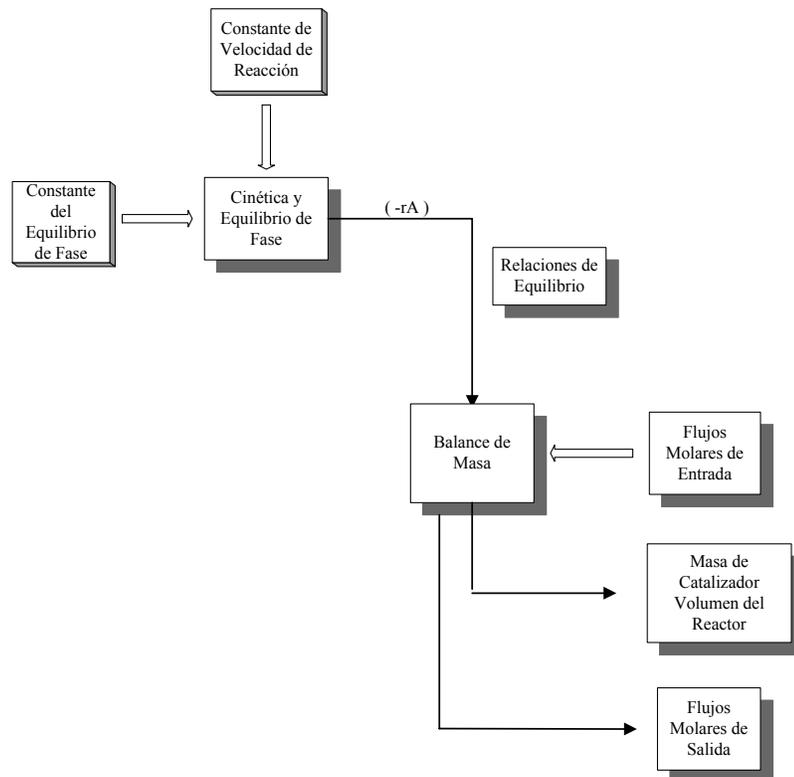


Figura N° 9. Diagrama de bloques del reactor de tanque con agitación continua.

4.6.4 Validación de resultados de todo el sistema acoplado

Para validar los resultados obtenidos de la simulación de las unidades necesarias para la producción de polietileno, se realizó un balance de masa para cada circuito de polimerización, y se comparó el flujo final del producto con las variables de operación hasta alcanzar un porcentaje de desviación igual o menor al 10%.

4.6.5 Estudio de la sensibilidad del proceso para producir polietileno de alta densidad

Para realizar una evaluación de la sensibilidad del simulador y de las variables del proceso se manipularon diferentes flujos en la entrada del reactor (Flujo de etileno, flujo de hidrógeno y flujo de reciclaje de suspensión concentrada) y se evaluó el comportamiento del proceso frente a estos cambios.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Una vez realizado el montaje de los Intercambiadores del proceso de producción de PEAD (E-104 y E-123) en el simulador ASPEN Plus, se introdujeron los valores de las hojas de especificaciones o “Data Sheet” de los mismos en el bloque de simulación a fin de verificar los valores generados en relación a los parámetros de diseño.

Las Tablas N° 11 y N° 12 muestran estos valores. Como puede apreciarse, tanto para el intercambiador del reactor primario (E-104), como para el intercambiador del segundo reactor (E-123), los resultados obtenidos se ajustan con un bajo porcentaje de desviación, entre 0.02 y 5% aproximadamente, en relación al conjunto de parámetros de diseño disponibles.

Tabla N° 11. Validación de la simulación del E-104 para bases de diseño.

Parámetro	Base de Diseño	Simulación	% Desviación
Calor Retirado (Kcal/h)	2.090.000	2.090.431	0,02
Coficiente Global de Transferencia de Calor U (Kcal/m ² h°C)	942,4	907,1	3,76
Temperatura de Salida de la Suspensión concentrada, T (°C)	71,00	74,93	5,53
Temperatura de Salida del Agua de enfriamiento, T (°C)	50,50	50,50	0,01
Área (m ²)	67,71	67,26	0,65
$\Delta TmLn$ (°C)	32,70	34,26	4,79
Factor de Corrección, F (Adim)	1,00	0,99	1,00

Tabla N° 12. Simulación del E-123 para bases de diseño.

Parámetro	Base de Diseño	Simulación	% Desviación
Calor Retirado (Kcal/h)	1.392.000	1.392.817	0,06
Coficiente Global de Transferencia de Calor U (Kcal/m ² h°C)	697,7	668,2	4,23
Temperatura de Salida de la Suspensión concentrada, T (°C)	68,00	71,26	4,79
Temperatura de Salida del Agua de enfriamiento, T (°C)	47,00	47,00	0,00
Área (m ²)	67,70	67,43	0,39
$\Delta TmLn$ (°C)	29,47	30,91	4,89
Factor de Corrección, F (Adim)	1,00	0,99	1,00

5.1. Validación y simulación caso N° 1

Al tener los intercambiadores de calor validados con los datos de diseño, se procedió a evaluar los mismos empleando valores reales de operación, correspondientes a la producción de PEAD en el Complejo Petroquímico El Tablazo.

Para el cálculo inicial, dado que se disponen de datos para el cálculo del calor retirado por el lado agua, se procedió a realizar este cálculo en el Intercambiador E-104, en un intercambiador sencillo (ver Tabla N° 32 del apéndice y la Figura N° 28 de los Anexos), con factor de ensuciamiento igual a cero, y tomando en cuenta valores promedios de operación (ver Tabla N° 13).

A partir de este calor obtenido, y con las temperaturas de entrada y de salida de la suspensión concentrada, se realizó una nueva simulación y a partir de un proceso iterativo con la temperatura de salida de la suspensión concentrada se buscó el valor del flujo de suspensión concentrada correspondiente para este caso. (ver Tabla N° 13 y Tabla N° 33 del Apéndice).

Tabla N° 13. Valores promedios de operación validación del intercambiador E-104.

Variable	Valor promedio de operación
Temperatura de entrada de la suspensión concentrada T(°C)	84,88
Temperatura de salida de la suspensión concentrada T(°C)	82,24
Flujo de la suspensión concentrada (t/h)	830
Temperatura de entrada del agua de enfriamiento T(°C)	38,67
Temperatura de salida del agua de enfriamiento T(°C)	44,92
Flujo del agua (t/h)	220
Calor teórico (Kcal/h)	1.368.081
Factor de ensuciamiento del agua (m ² °C/ W)	0,00033

Una vez obtenido valor del factor de ensuciamiento, se procedió a llevar a cabo la simulación de un intercambiador tipo carcasa y tubo, con factor de ensuciamiento

de cero. Se observó que el calor intercambiado no correspondía con el calculado por el lado agua. (ver Tabla N° 33 del apéndice). Por esta razón se llevó a cabo un estudio de sensibilidad, con el fin de determinar el factor de ensuciamiento que se ajustase mejor al valor esperad. Estos resultados nos indican que dadas las características del polímero, es probable que existan restos del mismo a través del área efectiva del intercambiador, que en consecuencia aumenta el factor de ensuciamiento del mismo.

En la Tabla N° 14 se muestran los resultados obtenidos a partir de la simulación para el flujo de suspensión concentrada en el intercambiador E-104. Se observa un bajo porcentaje de desviación entre (0.63% y 1.32%) entre la temperatura de salida de operación, y la temperatura de salida obtenida a partir de la simulación; lo que indica un buen ajuste de estos valores en el proceso de simulación.

Tabla N° 14. Simulaciones para el flujo de suspensión concentrada en el E-104.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	84,63	82,40	81,31	1,32
5	85,33	82,84	81,96	1,06
10	85,45	82,89	82,07	1,00
15	85,37	82,78	82,06	0,87
20	85,21	82,54	81,84	0,85
25	84,96	82,17	81,60	0,70
30	84,65	81,80	81,28	0,63
35	84,27	81,50	80,92	0,71
40	84,29	81,60	80,93	0,82
45	84,43	81,73	81,06	0,82
50	84,68	81,92	81,27	0,79
55	84,86	82,22	81,44	0,94
60	85,36	82,71	81,91	0,96

En la figura N° 10 se muestra el comportamiento de la variación de la temperatura, en el intercambiador E-104 para el primer caso de 12 t/h de carga de etileno. La tendencia generada por el simulador sigue el mismo comportamiento que la que presentan las variables de operación; las fluctuaciones de estos valores son

ocasionadas en el reactor ya que ocurre una reacción exotérmica que es controlada por la chaqueta del mismo, el condensador de tope y el intercambiador E-104, entre todos estos bloques existe un equilibrio dinámico el cuál presenta estas fluctuaciones de temperatura.

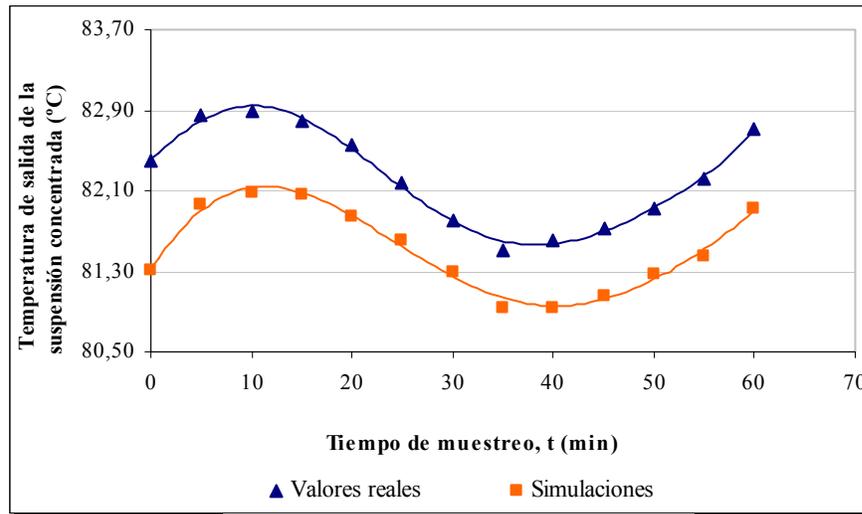


Figura N° 10. Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el Intercambiador E-104.

En la Tabla N° 15 se observan los resultados para la misma simulación, pero por el lado carcasa (flujo de agua de enfriamiento). Se observa que tanto el lado tubo, como el lado carcasa generan bajos porcentajes de desviación; en este último caso, entre 0,084% y 0,156%.

Tabla N° 15. Simulaciones para el flujo de Agua de Enfriamiento en el E-104.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	39,29	45,46	45,42	0,08
5	39,37	45,67	45,60	0,16
10	39,36	45,65	45,59	0,13
15	39,32	45,55	45,57	-0,04
20	39,12	45,36	45,35	0,03
25	38,89	45,10	45,11	-0,02
30	38,61	44,80	44,78	0,05
35	38,30	44,48	44,47	0,04
40	38,15	44,33	44,34	-0,02
45	38,03	44,26	44,26	0,01
50	37,98	44,26	44,28	-0,03
55	38,05	44,35	44,36	-0,02
60	38,34	44,61	44,65	-0,10

En la Figura N° 11 permite nuevamente apreciar estos resultados para lado del agua de enfriamiento, se observa un ajuste entre la tendencia real de operación y la tendencia de los valores simulados.

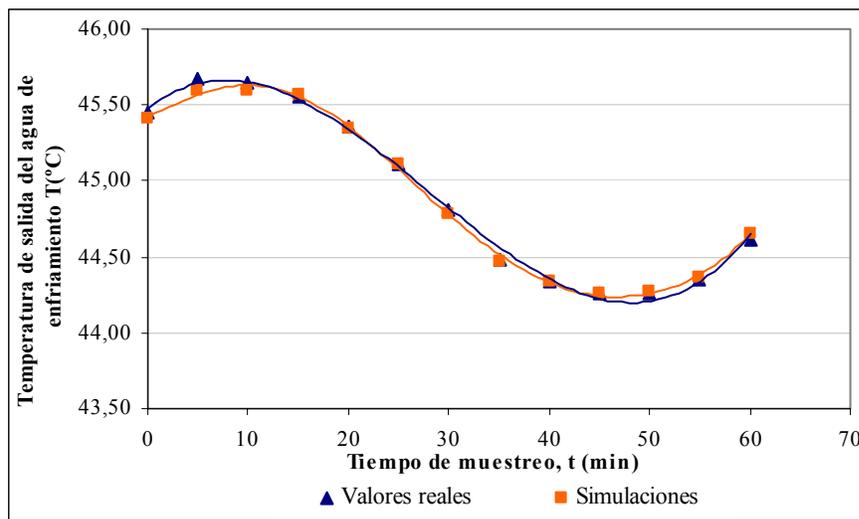


Figura N° 11. Variación de la temperatura de salida del flujo del agua de enfriamiento en el Intercambiador E-104.

Al comparar los resultados obtenidos para este caso en el E-104, (ver Tabla N°14 y Tabla N° 15), se puede observar que para el lado carcasa o lado agua, los porcentajes de desviación son menores que para el lado tubo (flujo de suspensión concentrada). Esto se debe a que para el lado agua, el método termodinámico utilizado (Tablas de Vapor) por el simulador es mucho más completo y se dispone de una mayor cantidad de información que para el lado de la suspensión concentrada (Método POLYNRTL).

En la Tabla N° 16, se pueden apreciar los valores promedios de operación empleados para llevar a cabo el proceso de validación inicial del intercambiador del segundo circuito E-123.

Tabla N° 16. Datos de Validación del Intercambiador E-123.

Variable	Valor Promedio de Operación
Temperatura de entrada de la suspensión concentrada T(°C)	80,99
Temperatura de salida de la suspensión concentrada T(°C)	78,45
Flujo de la suspensión concentrada (t/h)	1050
Temperatura de entrada del agua de enfriamiento T(°C)	38,73
Temperatura de salida del agua de enfriamiento T(°C)	61,68
Flujo del agua de enfriamiento (t/h)	66
Calor teórico (Kcal/h)	1.499.289
Factor de ensuciamiento del agua (m ² °C/ W)	0,00033

Utilizando el procedimiento antes descrito, a partir de los datos disponibles para el lado del agua de enfriamiento, se calculó el flujo de suspensión concentrada sometida a enfriamiento en este caso, (Tabla N° 34 del Apéndice).

Los resultados del proceso iterativo, para obtener el valor apropiado del factor de ensuciamiento del intercambiador de calor E-123, se muestran en la Tabla N° 35 del Apéndice. Al comparar estos valores con los valores obtenidos para el

intercambiador E-104, se puede observar que el segundo intercambiador presenta un menor factor de ensuciamiento (con una diferencia de aproximadamente cinco unidades). Esta diferencia se explica partiendo de la naturaleza del proceso, ya que en el primer reactor el producto de salida es polietileno con un menor peso molecular promedio en masa y sus propiedades termodinámicas son diferentes, mientras que el flujo de salida del segundo reactor es polietileno de mayor peso molecular, por lo tanto cambia sus características. Al aumentar el peso molecular también aumenta la viscosidad del fundido, lo cual dificulta la procesabilidad de la resina. ^(Mcketta, 1993), y permite que la suspensión concentrada se desplace a lo largo de los tubos del intercambiador.

En la Tabla N° 17 se muestran los resultados obtenidos a partir de la simulación para el flujo de suspensión concentrada en el intercambiador E-123. Para este intercambiador se observa una mayor desviación (entre 0,94% y 1.17%) entre las temperaturas de salida de operación y las temperaturas de salida generadas por ASPEN Plus; sin embargo siguen siendo los valores aceptables, ya que las mismas no superan el 1% de desviación.

Tabla N° 17. Simulaciones para el Flujo de Suspensión Concentrada en el E-123.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	80,88	78,45	77,59	1,10
5	80,91	78,46	77,62	1,07
10	81,00	78,53	77,69	1,07
15	81,00	78,45	77,69	0,97
20	81,00	78,44	77,68	0,97
25	80,91	78,41	77,59	1,04
30	80,88	78,28	77,54	0,94
35	81,30	78,82	77,90	1,17
40	81,07	78,45	77,69	0,96
45	80,92	78,37	77,55	1,04
50	81,08	78,44	77,69	0,96
55	80,88	78,29	77,52	0,99
60	81,08	78,53	77,71	1,05

La Figura N° 12 permite apreciar ampliamente esta diferencia. Es importante destacar que ambas series presentan, al igual que para el E-104, la misma tendencia; y esto es reflejo de una buena aproximación de la simulación hacia los valores de operación.

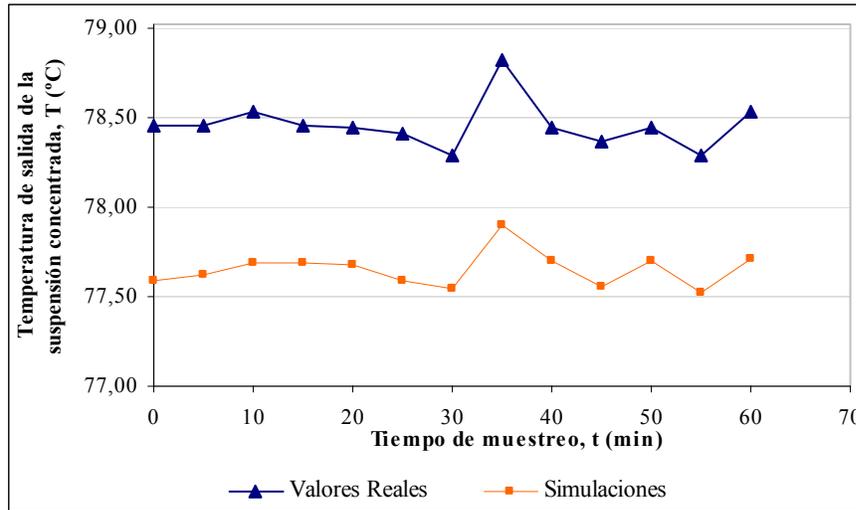


Figura N° 12. Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el Intercambiador E-123.

Tabla N° 18. Simulaciones para el Flujo de Agua de Enfriamiento en el E-123.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	39,27	61,78	61,71	0,12
5	39,45	61,95	61,77	0,28
10	39,43	62,02	61,79	0,37
15	39,34	61,95	61,73	0,36
20	39,17	61,90	61,69	0,34
25	38,97	61,81	61,51	0,49
30	38,71	61,61	61,37	0,39
35	38,40	61,84	61,48	0,59
40	38,24	61,57	61,30	0,44
45	38,14	61,32	61,21	0,18
50	38,05	61,41	61,24	0,27
55	38,08	61,26	61,20	0,10
60	38,31	61,44	61,46	-0,03

La Tabla N° 15 y la Figura N° 13 presentan los resultados para esta misma simulación por el lado del agua. Nuevamente se observa un mejor ajuste y una menor desviación (entre 0,03% y 0,59%) para estos valores al ser comparados con los obtenidos por el lado tubo (suspensión concentrada); y se adjudica este hecho a la mejor compatibilidad y disposición de información que posee el simulador en relación al agua.

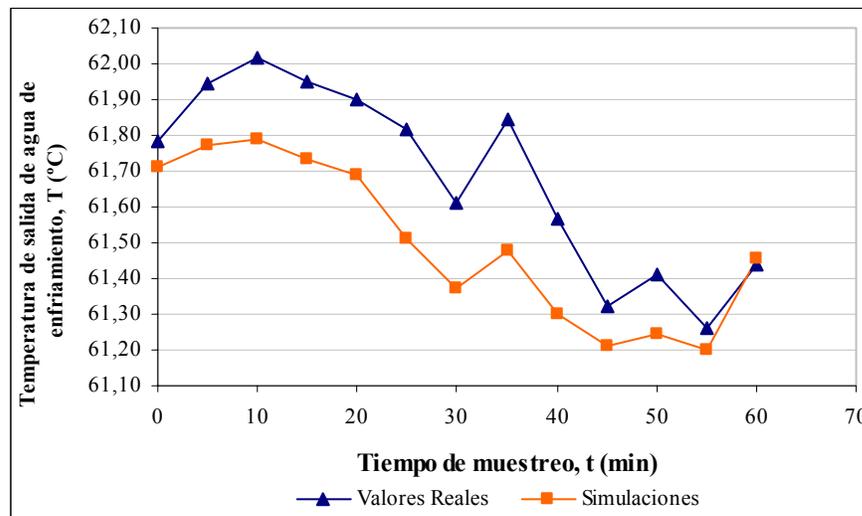


Figura N° 13. Variación de la temperatura de salida del flujo de agua de enfriamiento en el Intercambiador E-123.

5.2. Validación y simulación caso N° 2

Para este caso se llevó a cabo la iteración inicial para calcular el flujo de la suspensión concentrada, (ver Tabla N° 36 del Apéndice) empleando valores promedios de las variables de operación disponibles para el agua de enfriamiento en la producción de PEAD del complejo Petroquímico El Tablazo. (ver Tabla N° 19).

Una vez obtenido ese valor, se procedió a simular un intercambiador carcasa-tubo con factor de ensuciamiento de cero, y debido a la gran diferencia que se observó entre el calor calculado o suministrado, y el calor retirado (por el lado del agua de enfriamiento), se procedió a llevar a cabo un estudio de sensibilidad, que al

igual que en el caso anterior, permitió obtener mediante un proceso iterativo, el factor de ensuciamiento más apropiado para el intercambiador E-104, bajo estas condiciones de operación. (ver Tabla N° 19 y Tabla N° 36 del apéndice).

Tabla N° 19. Datos de Validación del Intercambiador E-104.

Variable	Valor Promedio de Operación
Temperatura de entrada de la suspensión concentrada T(°C)	85,04
Temperatura de salida de la suspensión concentrada T(°C)	81,72
Flujo de la suspensión concentrada (t/h)	580
Temperatura de entrada del agua de enfriamiento T(°C)	33,14
Temperatura de salida del agua de enfriamiento T(°C)	36,92
Flujo del agua (t/h)	309
Calor teórico (Kcal/h)	1.161.213
Factor de ensuciamiento del agua ($m^2 \text{ }^\circ\text{C}/\text{W}$)	0,00033

La Tabla N° 20 muestra los resultados obtenidos a partir de la simulación del flujo de suspensión concentrada en el intercambiador E-104. Se observa un bajo porcentaje de desviación (entre 0,03% y 0,16%) entre las temperaturas de salida de operación y la temperatura obtenida con el uso del simulador.

Tabla N° 20. Simulaciones para el Flujo de suspensión concentrada en el E-104.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	85,03	81,78	81,65	0,16
5	85,10	81,78	81,71	0,08
10	85,18	81,80	81,79	0,01
15	85,02	81,75	81,64	0,14
20	85,04	81,74	81,66	0,09
25	85,03	81,73	81,65	0,10
30	85,02	81,72	81,64	0,09
35	85,03	81,67	81,65	0,03
40	85,04	81,68	81,65	0,04
45	85,02	81,73	81,64	0,11
50	85,00	81,70	81,61	0,11
55	85,00	81,69	81,62	0,08
60	85,12	81,68	81,73	0,07

Al comparar estos resultados con los obtenidos en el E-104 para el caso anterior, se observó que para el caso de 14,5 t/h de etileno, los porcentajes de desviación son menores.

Las directivas operacionales de la planta (ver Tabla N° 8), indican que el flujo de alimentación total de etileno debe estar entre 14 y 15 ton/h para un proceso óptimo para la producción de polietileno de alta densidad. Como se puede observar en las tablas anteriores, la carga de etileno del caso N° 2 es la que genera un ajuste óptimo de las variables del proceso en cuanto al intercambio calórico generado en el primer reactor. Este resultado también se puede apreciar en la Figura N° 14.

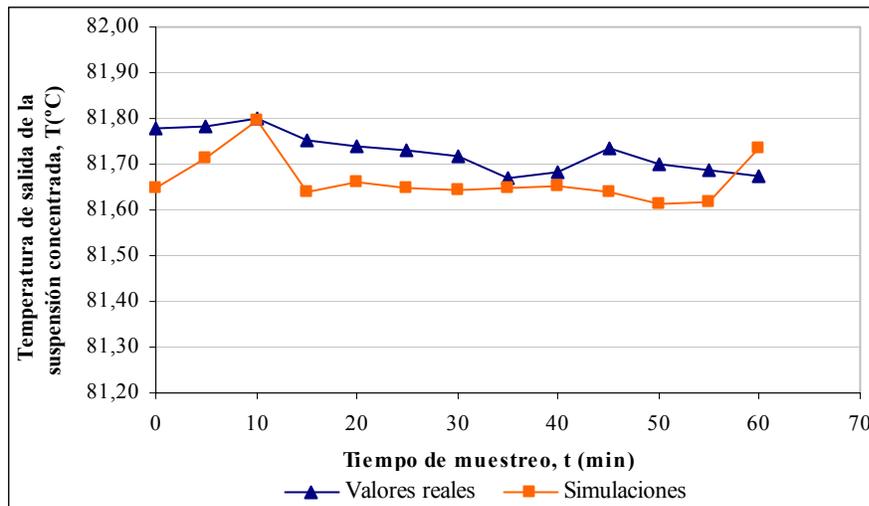


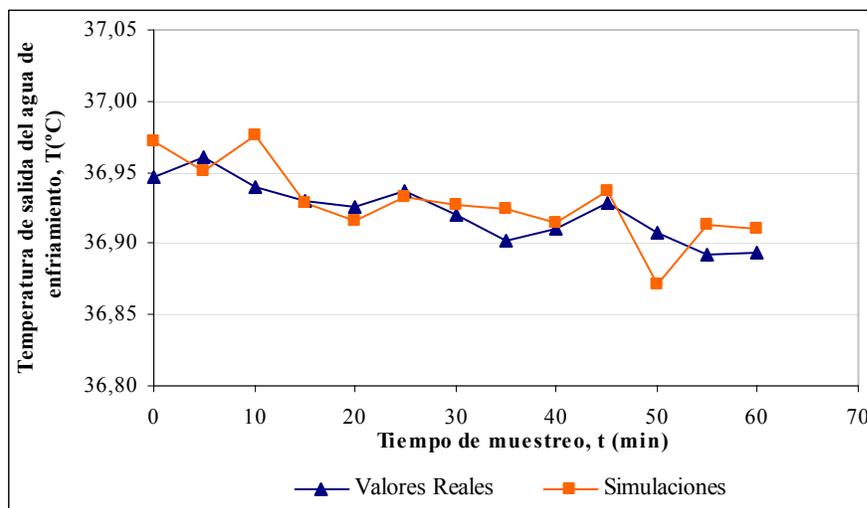
Figura N° 14. Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el intercambiador E-104 para el caso N° 2.

En la tabla N° 21 se observan los resultados para la misma simulación pero por el lado carcasa. De nuevo, se aprecia un bajo porcentaje de desviación (0,005% - 0,099%) entre las temperaturas de salida de operación, y las temperaturas generadas por el simulador.

Tabla N° 21. Simulaciones para el flujo del agua de enfriamiento en el E-104.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	33,19	36,95	36,97	0,07
5	33,17	36,96	36,95	0,03
10	33,19	36,94	36,98	0,10
15	33,15	36,93	36,93	0,01
20	33,13	36,93	36,92	0,03
25	33,15	36,94	36,93	0,01
30	33,15	36,92	36,93	0,02
35	33,14	36,90	36,92	0,06
40	33,13	36,91	36,91	0,01
45	33,16	36,93	36,94	0,02
50	33,09	36,91	36,87	0,10
55	33,13	36,89	36,91	0,06
60	33,12	36,89	36,91	0,05

La Figura N° 15 permite apreciar que en este caso tanto el ajuste como la tendencia son prácticamente iguales entre ambas series (valores reales y valores de simulación). Esto se debe tanto a la disposición de información que contiene el simulador de las propiedades del agua, y por una carga óptima de alimentación de etileno, según las directivas operacionales.

**Figura N° 15.** Variación de la temperatura de salida del flujo de agua de enfriamiento en el Intercambiador E-104, para el caso N° 2.

En la Tabla N° 22 se pueden apreciar los valores promedios de operación empleados para llevar a cabo el proceso de validación inicial del intercambiador E-123. Utilizando el procedimiento ya descrito, a partir de los datos del lado carcasa del agua de enfriamiento, (ver Tabla N° 38 del Apéndice) se calculó el flujo de suspensión concentrada sometida a enfriamiento. (Ver tabla N° 22).

Tabla N° 22. Datos de Validación del Intercambiador E-123.

Variable	Valor Promedio de Operación
Temperatura de entrada de la suspensión concentrada T(°C)	81,00
Temperatura de salida de la suspensión concentrada T(°C)	78,36
Flujo de la suspensión concentrada (t/h)	1025
Temperatura de entrada del agua de enfriamiento T(°C)	33,14
Temperatura de salida del agua de enfriamiento T(°C)	60,52
Flujo del agua de enfriamiento (t/h)	59,7
Calor teórico (Kcal/h)	1.633.478
Factor de ensuciamiento del agua ($m^2 \text{ } ^\circ\text{C}/ W$)	0,00033

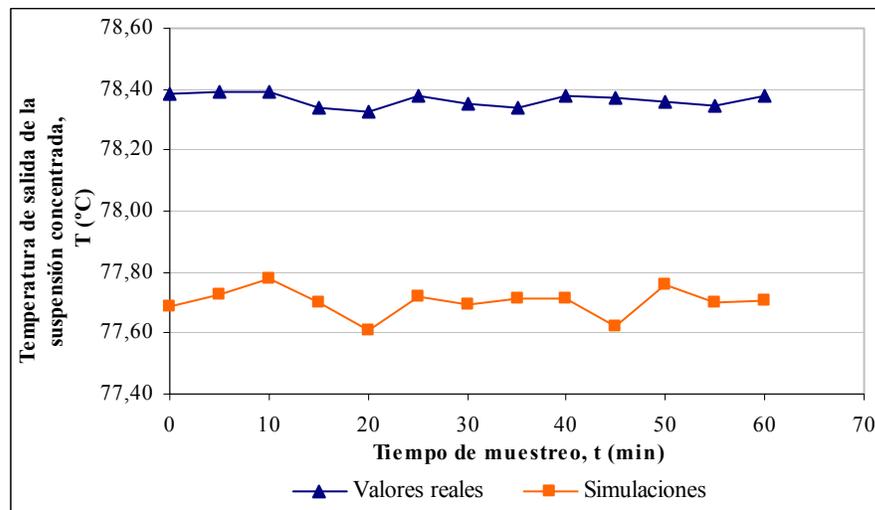
Los resultados del proceso iterativo (ver Tabla N° 35 del Apéndice), permitieron generar el factor de ensuciamiento más apropiado para el intercambiador E-123 en este caso. Al comparar este valor con el obtenido para el intercambiador E-123 en el caso N° 1, se puede observar que se obtienen resultados similares. Esto permite indicar que la densidad del polímero, la viscosidad, entre otras características, es un factor determinante sobre el factor de ensuciamiento de un intercambiador de calor.

En la tabla N° 23 se presentan los resultados obtenidos a partir de la simulación para el flujo de la suspensión concentrada en el E-123. Se observan porcentajes de desviación entre 0,77% y 0,96%, lo que es bastante similar a lo obtenido para el mismo intercambiador en el caso N° 1.

Tabla N° 23. Simulaciones para el Flujo de suspensión concentrada en el E-123.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	80,98	78,38	77,69	0,89
5	81,04	78,39	77,73	0,85
10	81,09	78,39	77,78	0,79
15	81,00	78,34	77,70	0,81
20	80,90	78,33	77,61	0,91
25	81,03	78,38	77,72	0,84
30	80,99	78,35	77,69	0,84
35	81,01	78,34	77,71	0,80
40	81,01	78,38	77,71	0,85
45	80,91	78,37	77,62	0,96
50	81,07	78,36	77,76	0,77
55	81,00	78,35	77,70	0,82
60	81,01	78,38	77,70	0,86

Sin embargo, si se observa la Figura N° 16, y se compara con la correspondiente figura en el caso anterior (Figura N° 13), se nota que para el caso de 14,5 ton/h de etileno las tendencias generadas son más uniformes (prácticamente lineales), con respecto a algunas pequeñas fluctuaciones observadas en el caso anterior. Este otro indicativo de una condición óptima de operación, definida en base a las directivas operacionales de la planta (ver Tabla N° 8).

**Figura N° 16.** Variación de la temperatura de salida del flujo de suspensión concentrada en el E-123 para el Caso N° 2.

La Tabla N° 24 presenta los resultados para la misma simulación, pero del lado carcasa, agua de enfriamiento. En este caso se obtuvieron porcentajes de desviación entre la temperatura de salida operacional y la simulada, por el orden de 0,01% y 0,14%. Al comparar estos resultados con los obtenidos en el E-123 para el Caso N° 1 se observa una menor desviación, en la Figura N° 17, se aprecia una tendencia menos uniforme, esto se debe a la gran cantidad de suspensión concentrada que se esta enfriando, ya que es más difícil que el flujo alcance una temperatura de equilibrio.

Tabla N° 24. Simulaciones para el flujo de agua de enfriamiento en el E-123.

Tiempo de muestreo (min)	Temperatura de entrada T (°C)	Temperatura de salida T (°C)	Temperatura de salida simulada T (°C)	% Desviación
0	33,18	60,53	60,56	0,06
5	33,17	60,55	60,48	0,11
10	33,16	60,57	60,55	0,03
15	33,15	60,51	60,54	0,05
20	33,15	60,47	60,53	0,10
25	33,14	60,53	60,44	0,14
30	33,15	60,54	60,49	0,07
35	33,13	60,53	60,58	0,09
40	33,14	60,51	60,58	0,12
45	33,14	60,57	60,46	0,18
50	33,14	60,50	60,49	0,01
55	33,13	60,51	60,60	0,14
60	33,12	60,54	60,47	0,13

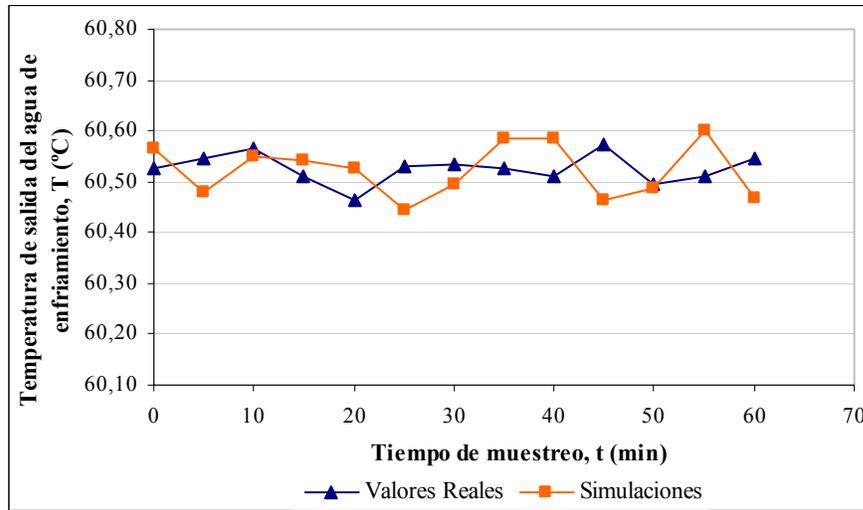


Figura N° 17. Variación de la temperatura de salida del flujo de agua de enfriamiento en el Intercambiador E-123.

Al comparar los resultados obtenidos con respecto al caso N° 1, se observa que para el mismo intercambiador (E-104), el factor de ensuciamiento es en este caso superior al anterior. Este aumento en el factor de ensuciamiento probablemente sea consecuencia del aumento de la carga del reactivo (etileno) que es alimentado al proceso, ya que un flujo mayor incrementa las posibilidades de contacto entre el polímero y las paredes del intercambiador, y por lo tanto aumenta el ensuciamiento en los tubos del intercambiador.

5.3 Comparación de coeficientes de transferencia de calor en ASPEN Plus y Delphi 6.0

En la Tabla N° 25 se tienen los resultados de las corridas del programa en Delphi para los distintos intercambiadores del proceso, y para un diámetro de partícula de 200 μm . Es importante destacar que se realizaron corridas del programa para un rango de diámetro de partícula entre 200 y 500 μm ; sin embargo, sólo se presentan los resultados para $D_p = 200 \mu\text{m}$ debido a que para este diámetro se obtuvieron los mejores resultados. Se observa que los valores para los coeficientes de transferencia de calor simulados en ASPEN Plus y los obtenidos en el programa de

Delphi presentan diferencias entre sí que se encuentran entre un 5% y un 23%. Estos resultados son bastantes aceptables ya que se están comparando valores obtenidos entre un paquete de simulación y un programa de menor complejidad que no involucra subrutinas ni iteraciones.

Se puede decir, que el programa realizado en Delphi es una herramienta que puede ser útil para obtener valores preliminares o aproximados de los coeficientes de transferencia de calor de una forma rápida y sencilla, y además permite corroborar rápidamente si la simulación realizada en ASPEN genera buenos resultados.

A partir de los coeficientes de transferencia de calor obtenidos en el programa para un rango de D_p entre 200 μm y 500 μm , se llevó a cabo el cálculo del calor intercambiado para los distintos equipos asociados al proceso. Estos resultados se presentan en la Figura N° 18, como era de esperarse, se observa que el calor tiende a disminuir a medida que se incrementa el diámetro de partícula. Esto se debe a que a medida que el tamaño de partícula aumenta la partícula disipa menos el flujo de calor y en consecuencia al equipo se le hace más difícil remover la misma carga de contraflujo.

Tabla N° 25 Resultados de la simulación utilizando el programa realizado en Delphi, y para el Intercambiador E-104, caso diseño para con diámetro de partícula $D_p = 200 \mu\text{m}$

Parámetro	Simulación	Programa Delphi	% Desviación
Caso de diseño del Intercambiador E-104			
Coeficiente de Transferencia de Calor para el lado del agua (Kcal/m ² h°C)	6.358,2	5.526	13,1
Coeficiente de Transferencia de Calor para la suspensión concentrada (Kcal/m ² h°C)	1.660,2	1.490	10,3
Caso de diseño del Intercambiador E-123			
Coeficiente de Transferencia de Calor para el lado del agua (Kcal/m ² h°C)	6.102	4.694	23,1
Coeficiente de Transferencia de Calor para la suspensión concentrada (Kcal/m ² h°C)	1.126	1.075	4,5
Caso de la carga 12 t/h del Intercambiador E-104			
Coeficiente de Transferencia de Calor para el lado del agua (Kcal/m ² h°C)	6.244	5.235	16,2
Coeficiente de Transferencia de Calor para la suspensión concentrada (Kcal/m ² h°C)	3.985	3.456	13,3
Caso de la carga 12 t/h del Intercambiador E-123			
Coeficiente de Transferencia de Calor para el lado del agua (Kcal/m ² h°C)	3280,5	2895	11,8
Coeficiente de Transferencia de Calor para la suspensión concentrada (Kcal/m ² h°C)	2949,7	2267	23,1
Caso de la carga 14,5 t/h del Intercambiador E-104			
Coeficiente de Transferencia de Calor para el lado del agua (Kcal/m ² h°C)	6.382	5.585	12,5
Coeficiente de Transferencia de Calor para la suspensión concentrada (Kcal/m ² h°C)	2.989	2.658	11,1
Caso de la carga 14,5 t/h del Intercambiador E-123			
Coeficiente de Transferencia de Calor para el lado del agua (Kcal/m ² h°C)	3.031	2.653	12,5
Coeficiente de Transferencia de Calor para la suspensión concentrada (Kcal/m ² h°C)	3.170	2.856	9,9

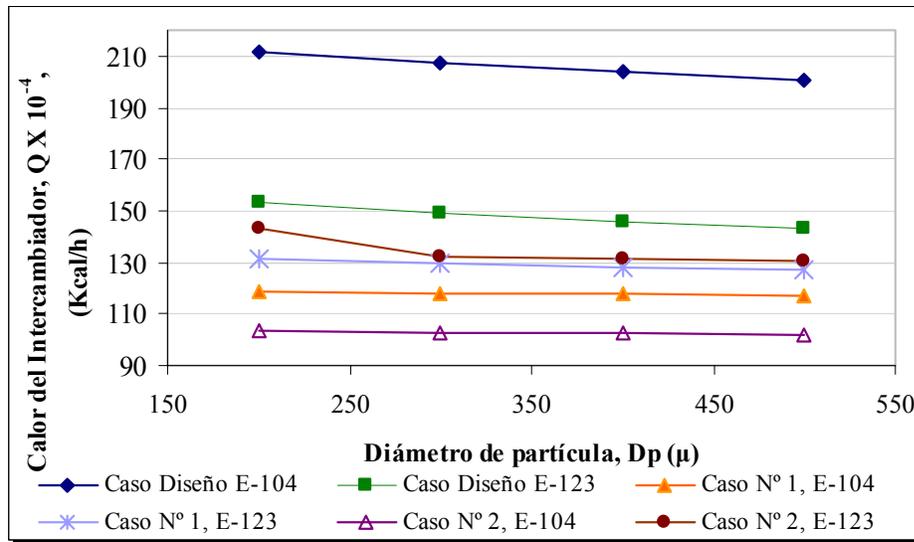


Figura N° 18 Variación del flujo de calor con respecto a la variación del diámetro de partícula.

5.4. Estudio del esquema de flujo del proceso

A continuación se presenta el esquema de la sección de polimerización de la planta de producción de polietileno de alta densidad, para el grado de polietileno 6200B, en este esquema no se puede mostrar las condiciones de operación e los equipos ya que son confidenciales, como se aprecia en las figura 19 (parte I, parte II, parte III).

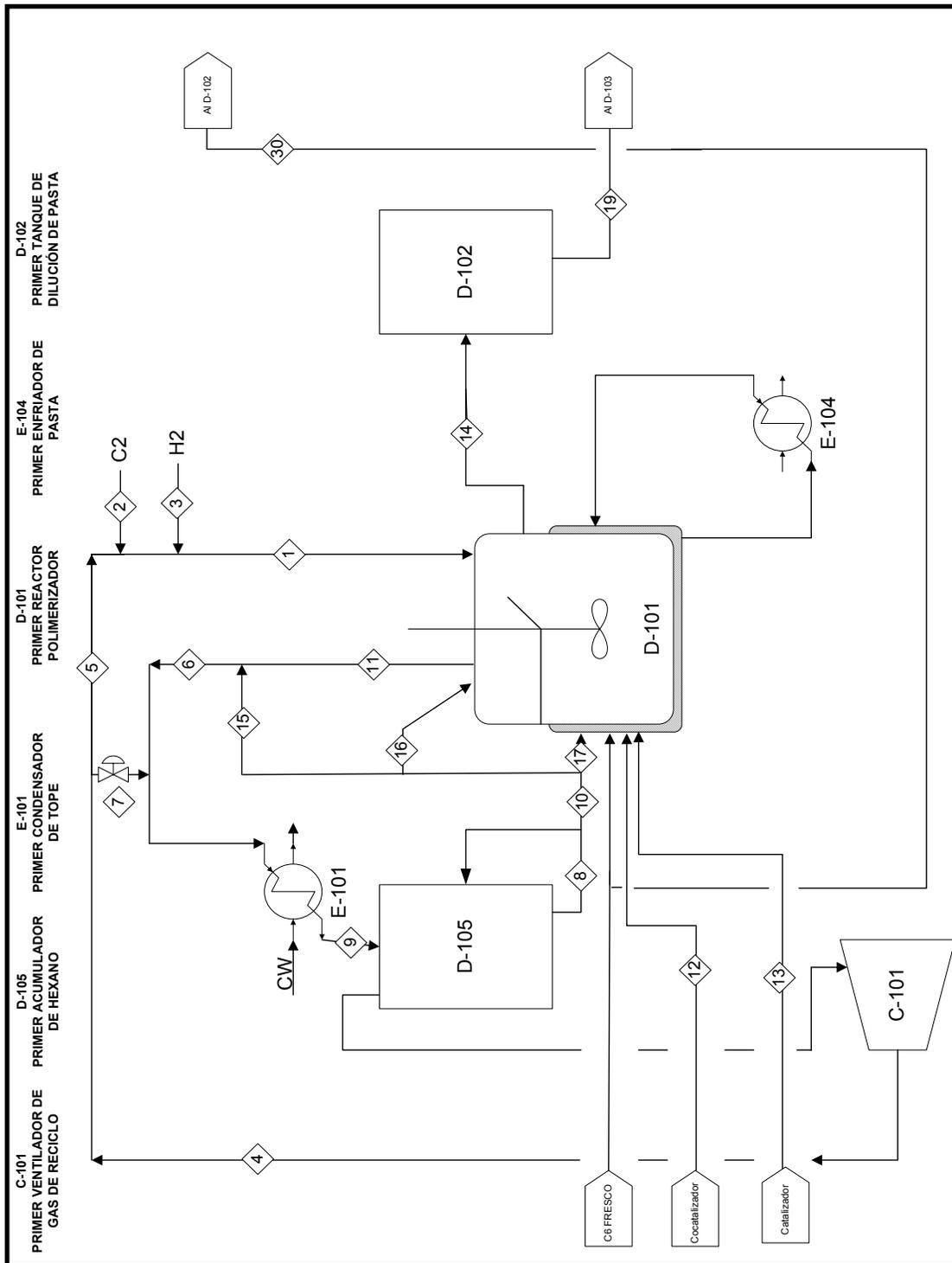


Figura N° 19. Proceso en suspensión para la obtención de polietileno, parte I

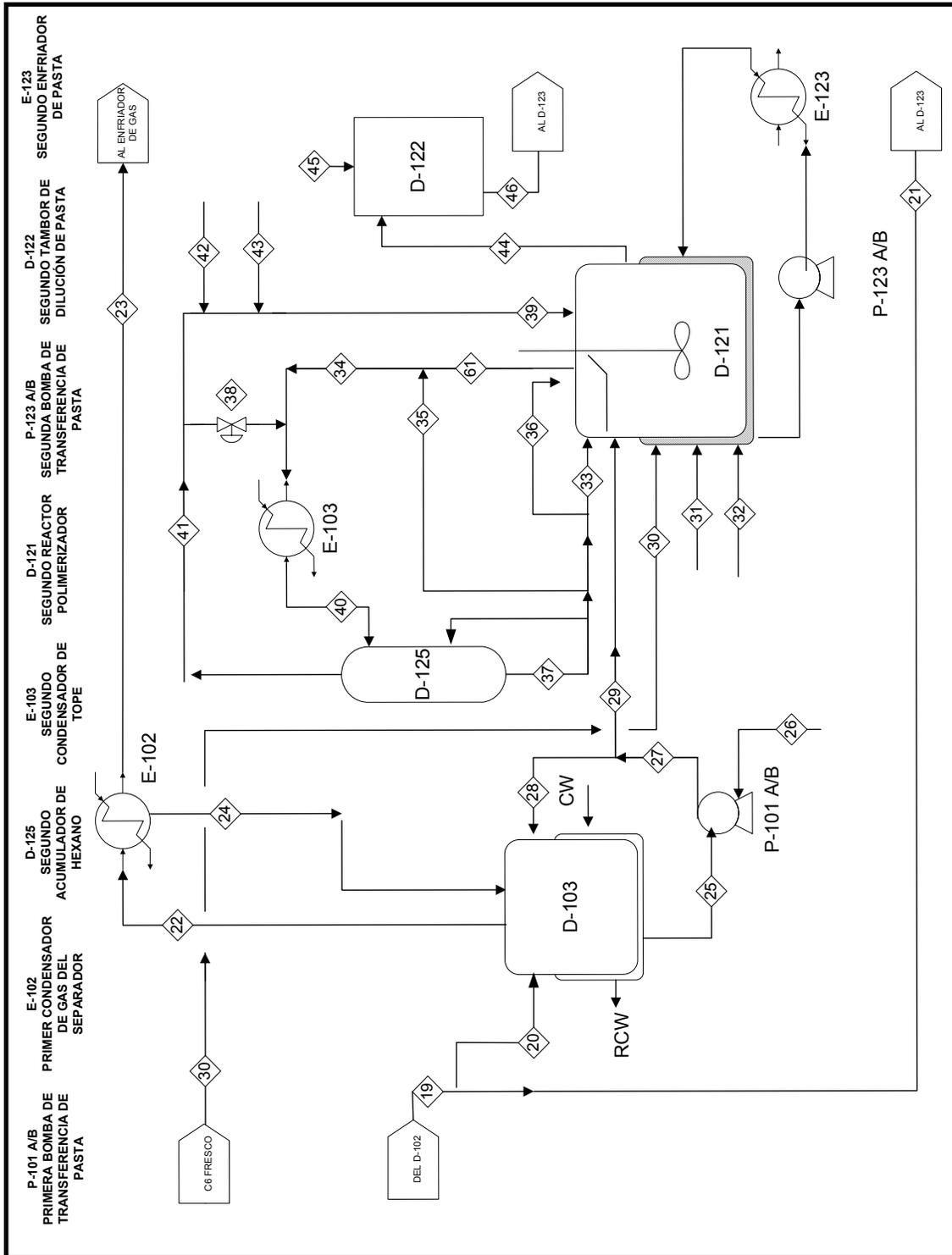


Figura N° 19. Proceso en suspensión para la obtención de polietileno, parte II

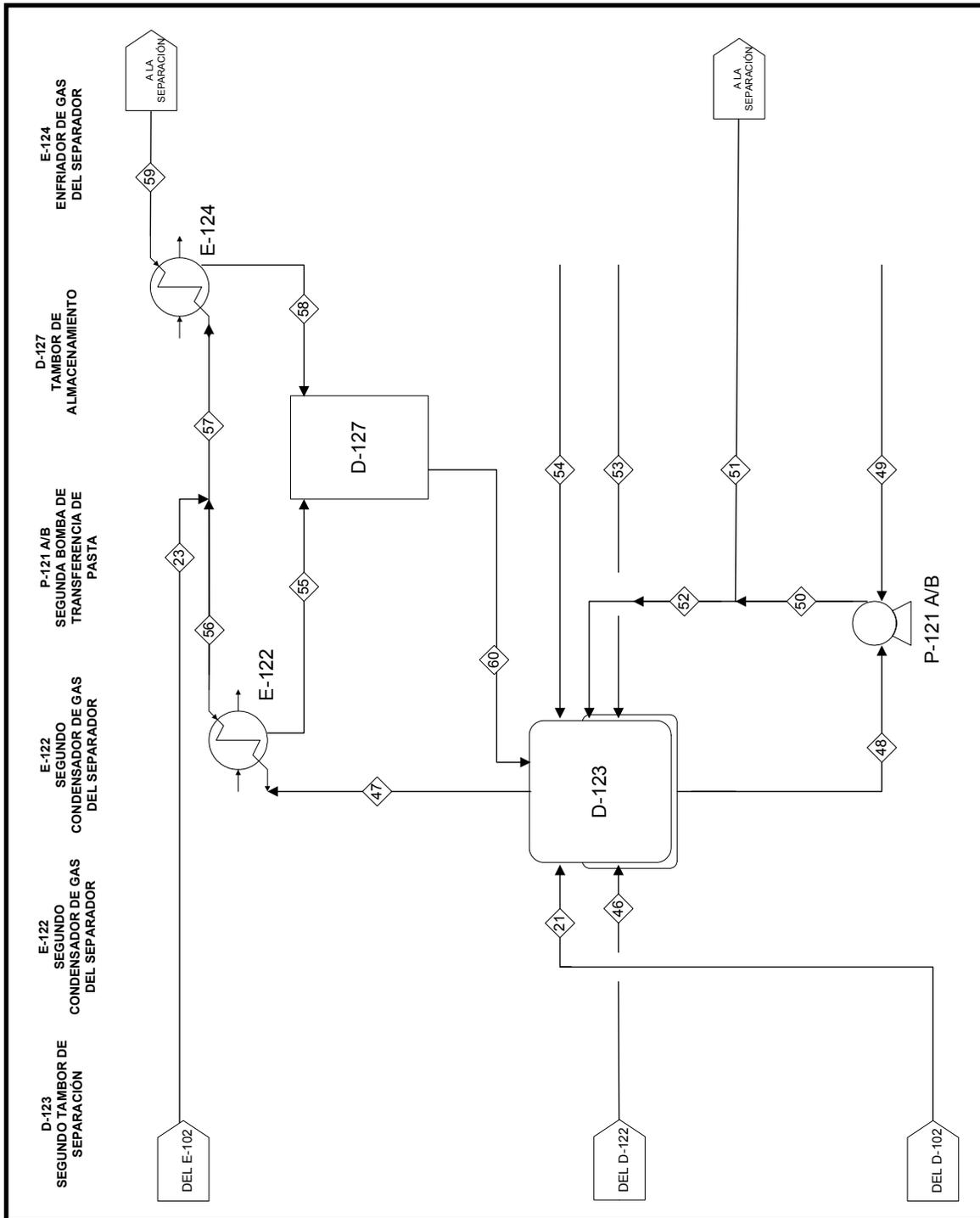


Figura N° 19. Proceso en suspensión para la obtención de polietileno, parte III.

5.5. Validación y simulación del circuito de polimerización para los dos reactores

Para la validación de los reactores de producción de polietileno de alta densidad se realizó el acoplamiento de los equipos asociados al proceso. A partir de las simulaciones y estudios de sensibilidad de dichos equipos se obtuvieron los siguientes resultados:

La Tabla N° 26 muestra los valores correspondientes al circuito del primer reactor (D-101) en el sistema de la planta. En dicha tabla se puede observar que el porcentaje de desviación se mantiene por debajo del 6%, a excepción de la corriente N° 11. Estos resultados indican que el circuito de reacción simulado se acopla o representa en buena forma el proceso estudiado.

El porcentaje de desviación más alto proviene de la salida del flujo condensado del tanque D-105, (ver Tabla N° 26 y Figura N° 18). Este resultado es una consecuencia de la ausencia de datos termodinámicos para establecer el equilibrio líquido-vapor en los reactores. Por lo tanto, como ya se mencionó anteriormente, se utilizó el modelo termodinámico NRTL que calcula el coeficiente de actividad por el método UNIFAC, que no necesariamente corresponden a las del sistema binario.

Tabla N° 26. Balance de masa para el circuito del primer reactor.

Corriente N°	Flujo de Diseño (Kg/h)	Flujo Simulado (Kg/h)	% Desviación
Entradas			
10	13.412	13.412	0
13+12	176,2	176,2	0
1	34.784	29.9172	13,99
11	30.118	38.315	27,22
Total Entrada	78.490	82.593	5,23
Salidas			
6-15	57.936	59.874	3,34
14	21.685	21.944,5	1,20
Total Salidas	79.621	81.819	2,76

En la Tabla N° 27 se puede apreciar el balance de masa para el sistema del segundo reactor de polimerización (D-121). En general, se observa que todas las corrientes presentan un buen porcentaje de desviación (entre 0 y 4%), con excepción de la corriente que contiene el licor madre del primer reactor (ver en la Figura N° 19 corriente N° 29); al igual que en el caso anterior, esto es consecuencia de la falta de datos termodinámicos de equilibrio en el separador D-105 y D-125.

Tabla N° 27. Balance de masa para el circuito del segundo reactor

Corriente N°	Flujo de Diseño (Kg/h)	Flujo Simulado (Kg/h)	% Desviación
Entradas			
30	2.000	2.000	0
31	12.171	12.171	0
39	34.536	34.356	0,5
61	23.477	23.480	0,0
29	22.043	24.403	10,7
Total Entrada	94.223	96.410	2,3
Salidas			
34-35	50.391	52.170	3,5
44	43.523	44.24	1,7
Total Salidas	93.914	96.411	2,7

En la Tabla N° 28 se presentan los resultados de la simulación del primer reactor para la polimerización de PEAD a presión de $7,8 \text{ Kg/cm}^2$ y temperatura de $82 \text{ }^\circ\text{C}$. Se observa que existe un porcentaje de desviación de 4% entre el peso molecular de operación y de simulación, este porcentaje de desviación representa cuan alejado se encuentra el producto de la calidad de polímero deseado. Se puede decir que este porcentaje es aceptable, dada la magnitud del peso molecular. Para este reactor el índice de polidispersidad (PDI) tiene un valor de 2, lo que ratifica que el polímero es mono disperso (www.uned.es). La cantidad de producto de polietileno obtenido presenta un porcentaje de desviación de 1,5% ratificando de esta manera que el primer circuito de polimerización se acopla a la simulación. En la Tabla N° 27 también se puede observar que el calor neto del reactor presenta un valor negativo, lo cual afirma que la reacción de polimerización es exotérmica.

Tabla N° 28. Resultados de la simulación del primer reactor para la polimerización de PEAD a presión de 7,8 Kg/cm² y temperatura de 82 °C.

Variable	Simulación	Operación	Porcentaje de desviación
Calor de la Chaqueta (Kcal/h)	750.800	-	-
Calor del Intercambiador E-104 (Kcal/h)	1.412.978	-	-
Calor del Condensador E-101 (Kcal/h)	4.502.139	-	-
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	33.627	35.145	4,3
Flujo de HDPE (Kg/h)	8.088	7.968,8	1,5
PDI (adimensional)	2,04	-	-
Calor neto del Reactor (Kcal/h)	-5.989.910	-	-

En la Tabla N° 29 se presentan estos mismos resultados para el segundo reactor de polimerización a una presión de 3,5 Kg/cm² y 80 °C. Se observa que el porcentaje de desviación entre el peso molecular simulado y de operación es de un 6%, con un índice de polidispersidad de 4. Estos valores indican que el polímero ya se encuentra más polidisperso, sin embargo, es recomendable alcanzar un PDI de 8, ya que esos son los valores que se manejan en planta.

La producción de polietileno presenta un porcentaje de desviación del 5% este porcentaje de desviación no es tan bajo como el porcentaje de la producción del primer reactor, y es una consecuencia de los métodos termodinámicos utilizados, ya que para encontrar el equilibrio líquido-vapor en los reactores se empleó el artificio de un separador flash a la salida de los reactores, que no generó el resultado apropiado ya que no se disponía de las correlaciones binarias específicas del método UNIFAC. Este valor también se le puede atribuir al proceso de separación que ocurre en los separadores D-105 y D-125 ya que no generan buenas correlaciones y este error se arrastra hasta el segundo reactor (D-121); también se puede observar que el calor neto del reactor presenta un valor negativo, lo cual afirma que la reacción de polimerización es exotérmica.

Para alcanzar estos índices de polidispersidad y calidad de producto se manipularon las constantes de iniciación, propagación y la de transferencia de hidrógeno; esto fue necesario ya que no se disponía de estos datos a nivel de operación.

Tabla N° 29. Resultados de la simulación para el segundo reactor para la polimerización de PEAD a Presión de 3,5 Kg/cm² y Temperatura de 80 °C.

Variable	Simulación	Operación	Porcentaje de desviación
Calor de la Chaqueta (Kcal/h)	680.000	-	-
Calor del Intercambiador E-123 (Kcal/h)	3.056.954	-	-
Calor del Condensador E-103 (Kcal/h)	2.645.074	-	-
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	100.542	106.652	5,7
Flujo de HDPE (Kg/h)	13.927	14.673	5,08
PDI (adimensional)	4,52	-	-
Calor neto del Reactor (Kcal/h)	-7.071.762	-	-

En la Tabla N° 30 se presentan las diferentes conversiones de etileno obtenidas en los reactores de polimerización. Como es de esperarse, en ambos reactores, la conversión por pasos, que es la conversión de transformación cinética del reactor, es menor en casi la mitad que la conversión global, que es la que se refiere a la producción del reactor. Esto se debe a la relación de recirculación que existe entre los reactores (Porcentaje de recirculación para el primer reactor: 0,94 y porcentaje de recirculación para el segundo reactor: 0,89). Como las recirculaciones son grandes, la diferencia entre ambas conversiones es grande también, esto hace que el reactor sea menos eficiente en la transferencia de masa que ocurre gracias al gran retromezclado.

Tabla N°30. Conversión de etileno en los reactores de polimerización.

Conversión	D-101	D-121
Xg	96,7	84,2
Xp	41,8	54,2

Sin embargo, la pérdida de conversión por pasos se compensa con el aumento de la cantidad de calor retirada en el reactor. También se puede observar que el valor de la conversión por pasos es menor que el valor de la conversión global, ya que al realizar el balance de masa sin tomar en cuenta el reciclo se tienen en la salida más moles de reactivo, (en este caso etileno), que si se tomara en el sistema la recirculación, por esto la conversión global no toma en cuenta los moles recirculados.

La conversión global aumenta al cambiar el flujo de etileno y después permanece constante, esto se debe al licor madre que viene del primer reactor, se mantiene constante porque el valor de la conversión es casi 100 y por más cambios que se realicen este valor no va a variar, se le inyecta licor madre para que la reacción (reacciones autocatalíticas) el polímero que viene del reactor mejora la cinética de la reacción. (el producto actúa como reactivo).

5.6. Estudio de la sensibilidad para producir polietileno de alta densidad.

Para llevar a cabo el estudio de la sensibilidad del proceso, que permite el aumento de la producción y de la calidad del producto, se realizaron variaciones de los flujos del reactivo, (en este caso etileno) y otros flujos de importancia para el proceso de polimerización (flujo de hidrógeno, y flujo de recirculación para los dos reactores).

Los resultados obtenidos a partir de este estudio se pueden apreciar en el Apéndice C en las Tablas N° 40 hasta la Tabla N° 45. En función de los mismos, se generaron los siguientes gráficos comparativos:

El efecto de la variación de los diferentes flujos del proceso sometidos a estudio sobre el flujo de producción de polietileno para el primer circuito de polimerización se presenta en la Figura N° 20.

Se puede observar que de los flujos manipulados, el aumento en el flujo de etileno genera la mejor tendencia, con un aumento creciente en línea recta de la producción de polietileno. Esto se debe a que la conversión del etileno es casi completa, y por ende, al aumentar este flujo, aumenta la producción de polietileno de alta densidad. Por otra parte las variaciones en el reciclo y el flujo de hidrógeno parecieran no generar mayores cambios, aunque en este caso, con respecto al flujo de reciclo, se observa que comienza con un aumento de la producción que alcanza una temperatura óptima (cuando aumenta 15 % el reciclo, ver Apéndice Tabla N° 31).

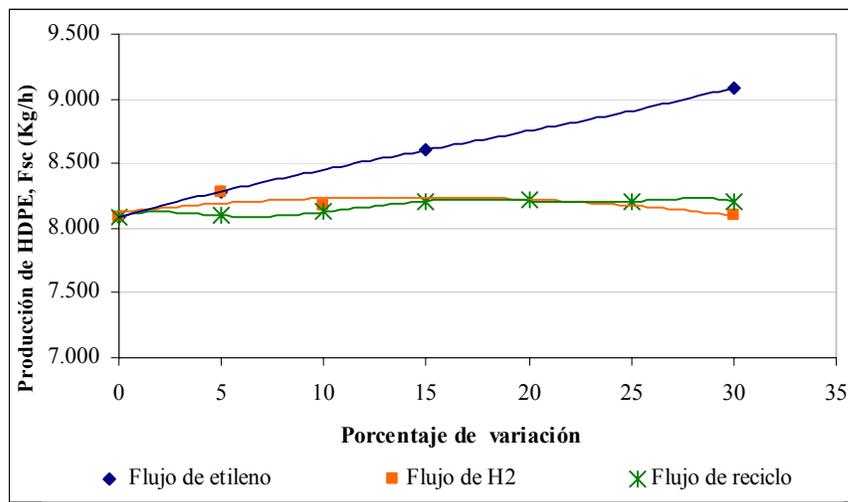


Figura N° 20. Variación del flujo de polietileno para el primer circuito de polimerización.

El efecto de la variación de los diferentes flujos del proceso sometidos a estudio sobre el flujo de producción de polietileno para el segundo circuito de polimerización se presenta en la Figura N° 21.

En esta figura se puede observar que la producción de polietileno aumenta con respecto a la variación del flujo de etileno, al igual que en el caso anterior, la conversión en el segundo reactor es casi completa, por lo tanto, al aumentar el flujo de materia prima, se incrementa la producción. En este caso cuando se realiza la variación en el flujo del reciclo, el flujo de polietileno comienza con un aumento

progresivo hasta alcanzar una temperatura ideal (cuando se aumenta el reciclaje en 15 %, ver apéndice, Tabla N° 32) para luego comenzar a disminuir, ya que estos valores de temperatura dejan de ser óptimos para el reactor de polimerización, disminuyendo la producción del mismo. En el caso de la variación del flujo de hidrógeno la se puede decir que los cambios en la producción de polietileno no son significativos.(ver apéndice, Tabla N° 30).

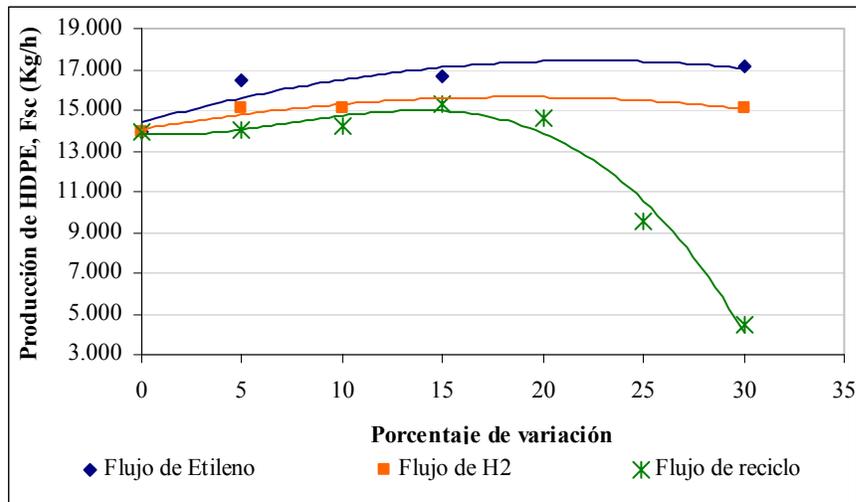


Figura N° 21. Variación del flujo de polietileno para el segundo circuito de polimerización.

En la Figura N° 22 se observa la variación del peso molecular promedio en peso con respecto a los diferentes flujos manipulados para el primer circuito de polimerización. En este caso la mejor tendencia la genera el aumento del flujo de etileno. Sin embargo, a pesar de que este cambio incrementa el peso molecular promedio, se debe conocer previamente cual es el valor que se requiere para el grado de polietileno que se esté produciendo. La variación del flujo de reciclaje al igual que en los casos anteriores se mantiene subiendo hasta que alcanza su punto máximo (al aumentar 15% el flujo) para luego disminuir su valor. Cuando aumenta el flujo de hidrógeno, este genera una disminución del peso molecular ya que al ir aumentando su valor la cadena polimérica va disminuyendo, lo que concuerda con lo reportado por Hong K. Choi. (Hong K., 1997)

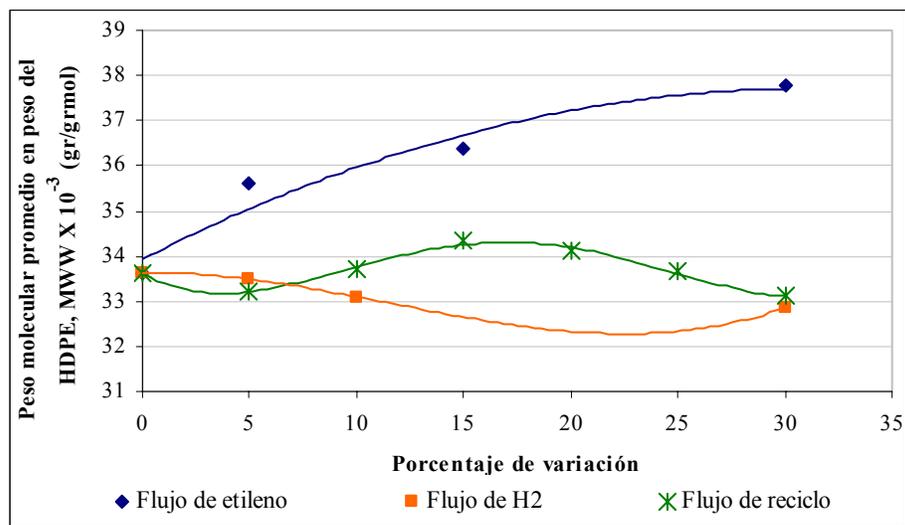


Figura N° 22. Variación del peso molecular para el primer circuito de polimerización.

El efecto de la variación de los diferentes flujos del proceso sometidos a estudio sobre el valor del peso molecular promedio en peso, para el segundo circuito de polimerización se presenta en la Figura N° 23. Se puede observar como en el caso anterior, el aumento del flujo de etileno promueve el aumento del peso molecular. El aumento del flujo de reciclado presenta una tendencia a incrementar el peso molecular hasta alcanzar su valor máximo (aumento del 15% de su flujo) y después disminuir posteriormente su valor. El flujo de hidrógeno actúa como un fuerte agente de transferencia de cadena y también desactiva los centros activos, por lo que a medida que la concentración de hidrógeno aumenta, el peso molecular disminuye.

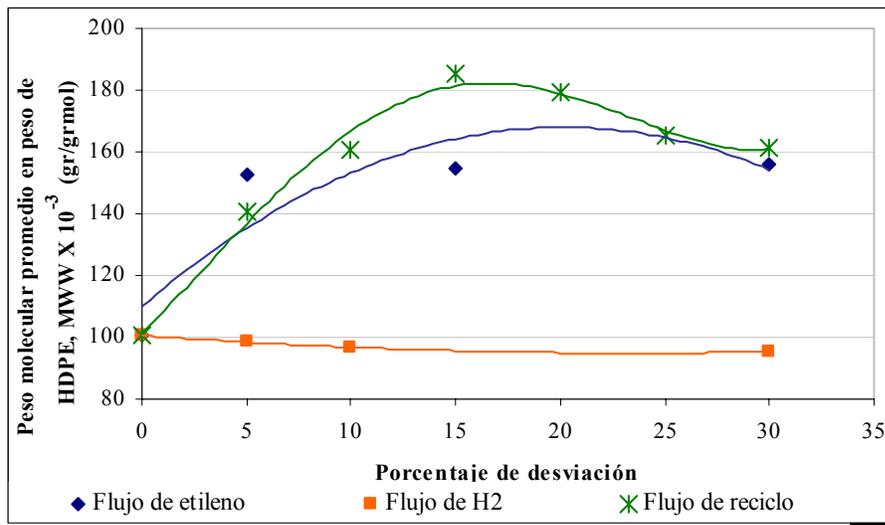


Figura N° 23. Variación del peso molecular promedio en peso, para el segundo circuito de polimerización.

En la Figura N° 24 se aprecia el efecto de la variación de los flujos en estudio sobre el índice de polidispersidad para el 1er circuito de reacción. Se observa que aumentos en el flujo de alimentación de etileno generan un leve incremento en el índice de polidispersidad, haciendo que el producto generado sea más heterogéneo (bibliografía concepto en inglés).

Por otra parte, incrementos en los flujo de hidrógeno y de reciclado no generan cambios significativos sobre este valor. En base a estos resultados se puede decir que el índice de polidispersidad es muy poco sensible frente a cambios en los distintos flujos manipulados del proceso.

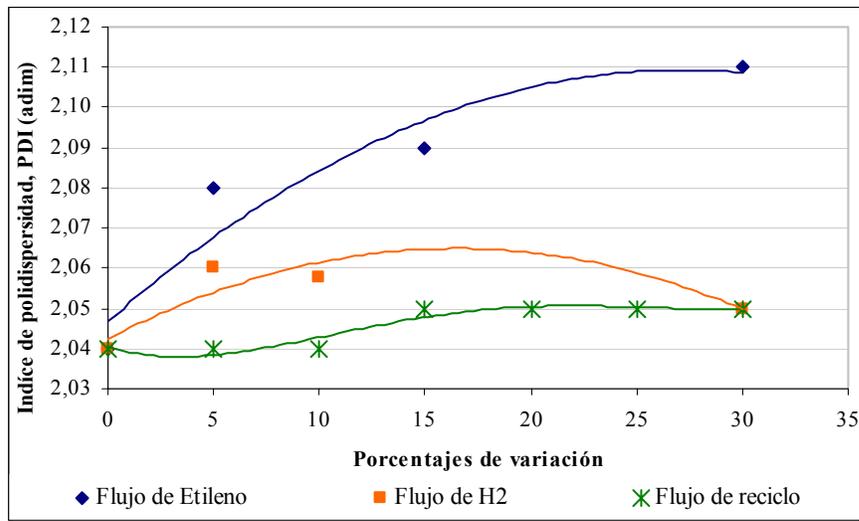


Figura N° 24. Variación del índice de polidispersidad, para el primer circuito de polimerización.

El resultado de la variación de los diferentes flujos del proceso sometidos a estudio sobre el valor del índice de polidispersidad, para el segundo circuito de polimerización se puede apreciar en la Figura N° 25. En este caso, El aumento del flujo de reciclo presenta una tendencia a incrementar el índice de polidispersidad, hasta alcanzar su valor máximo (aumento del 15% de su flujo, ver apéndice Tabla N° 32) y después disminuir posteriormente su valor. El índice de polidispersidad va disminuyendo su valor a medida que el flujo de hidrógeno aumenta. Cuando se realiza el cambio en el flujo de etileno, este genera un leve aumento del índice de polidispersidad, y después del 5% de aumento en el flujo del mismo, el índice de polidispersidad disminuye su valor.

El efecto del aumento en el índice de polidispersidad frente a cambios en el reciclo es consecuencia del aumento del peso molecular del polietileno, comportamiento que se corrobora con lo presentado en la Figura N° 25.

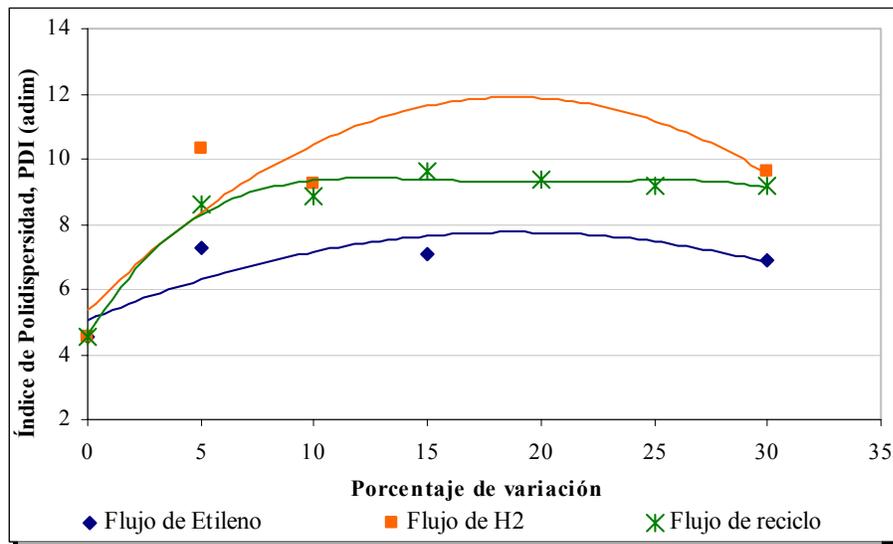


Figura N° 25. Variación del índice de polidispersidad, para el segundo circuito de polimerización.

En la Figura N° 26 se presenta la variación de la conversión global frente a variaciones en flujos de proceso para el primer reactor de polimerización. Se observa que, al aumentar el flujo de etileno la conversión global disminuye. Esto se explica debido a que los valores de etileno que reaccionan en el volumen del reactor son prácticamente los mismos. Esto se cumple debido a que la constante cinética de propagación varía muy poco con respecto a la concentración de etileno en el reactor.

La conversión global es poco sensible a cambios en el flujo de hidrógeno. Esto se explica debido a que la constante cinética de propagación no varía con el cambio de la concentración de hidrógeno dentro del volumen del reactor. La conversión global es poco sensible a cambios en el flujo de reciclo; esto se debe a que la cantidad de flujo reciclada es de una magnitud tal, que los cambios solo afectan la segunda cifra significativa.

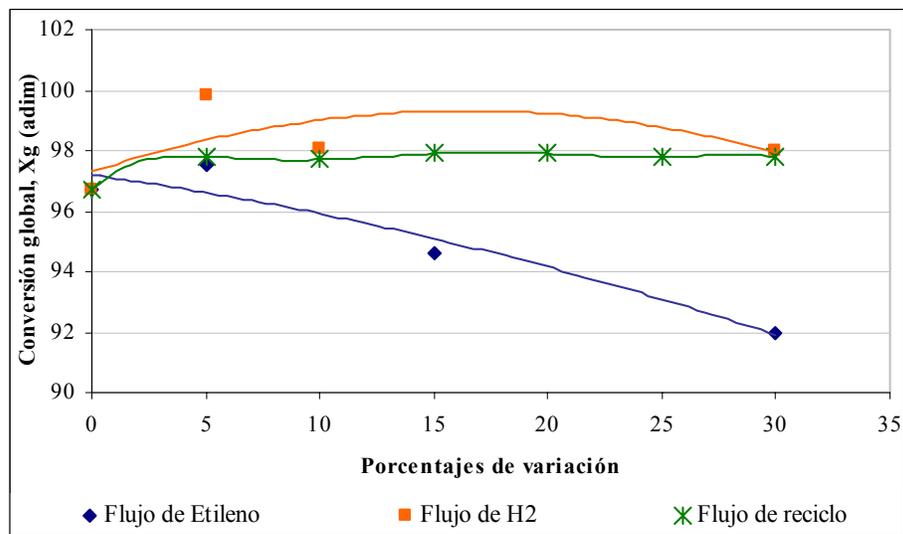


Figura N° 26. Variación de la conversión global, para el primer circuito de polimerización.

En la Figura N° 27 se presenta la variación de la conversión global frente a variaciones en flujos de proceso para el segundo reactor de polimerización. Se observa que la conversión global aumenta al cambiar el flujo de etileno para luego permanecer constante, la conversión se mantiene constante ya que el valor alcanzado para bajos incrementos (15%) en el flujo de etileno generan aumentos en la conversión global que permiten alcanzar casi un 100% de conversión (99,7%); por lo que incrementos en el flujo de etileno por encima de este valor no promueven mayores cambios en la misma. Este resultado es altamente positivo ya que indica que con tan sólo incrementar en un 5% el flujo de alimentación de etileno en el segundo reactor, es posible incrementar la conversión en casi 16%.

La curva de conversión global con respecto a la variación del flujo de hidrógeno varía de acuerdo al orden de la cinética de transferencia de hidrógeno; esto se debe a que el orden de la velocidad de reacción de transferencia de hidrógeno es de $\frac{1}{2}$. Para el flujo de reciclo, se tiene que para cambios pequeños se mantiene constante la conversión y después aumenta con un cambio significativo que se mantiene casi constante a partir del 15%. Esto ocurre ya que al realizar grandes cambios en el reciclo, el flujo retirado aumenta y la temperatura de entrada al reactor es menor,

como se puede observar en algunos casos favorece la reacción y en otros no. Cuando se aumenta el retromezclado la conversión debería disminuir, pero el efecto calórico es más contundente que estos y por tanto la conversión aumenta.

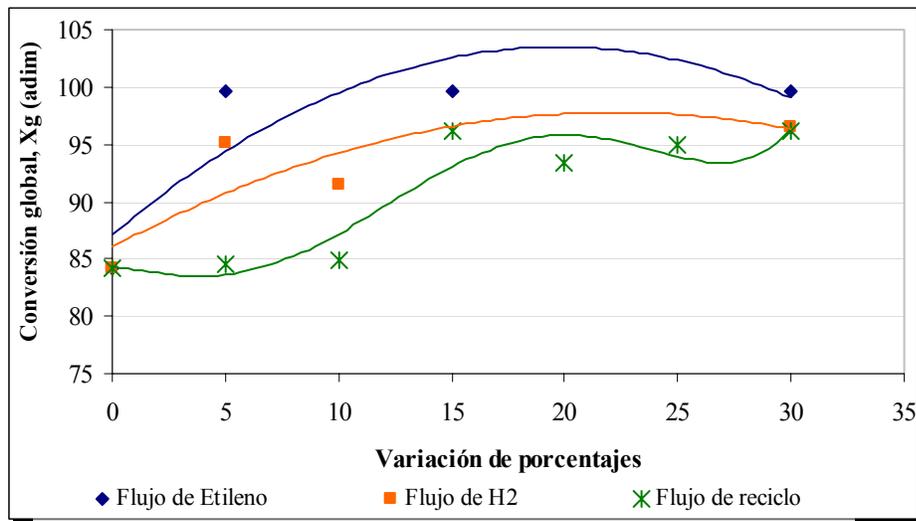


Figura N° 27. Variación de la conversión global, para el segundo circuito de polimerización.

En general al comparar entre si los cambios realizados (ver Tabla N° 31), se puede observar que al realizar cambios en el flujo de etileno mejora la producción y la calidad del polietileno de alta densidad; ya que produce aumento en el flujo del producto, peso molecular e índice de polidispersidad en ambos reactores, incrementando además la conversión global del segundo reactor de polimerización.

El flujo de hidrógeno es una variable que en magnitud es muy inferior a las otras cargas del proceso que son manipuladas, por lo que su efecto es muy reducido sobre las distintas variables sometidas a estudio. Sin embargo. Incrementos en el flujo de hidrógeno originan aumentos en la producción, índice de polidispersidad y conversión global del segundo reactor de polimerización; aunque genera que el valor del peso molecular promedio en peso disminuya en ambos reactores.

En cuanto al flujo del reciclo de la suspensión concentrada, se puede apreciar que esta variable genera cambios positivos en los niveles de producción y peso molecular del producto para incrementos menores o iguales al 15%. Por encima de esta cantidad, los niveles de producción de polietileno de alta densidad comienzan a disminuir.

Tabla N° 31. Influencia de los cambios realizados al proceso, en los resultados de las simulaciones.

Variables manipuladas	Flujo de polietileno en el primer reactor	Flujo de polietileno en el segundo reactor	Peso molecular en el 1er Reactor	Peso molecular en el 2do Reactor	Índice de polidispersidad en el 1er Reactor
Flujo de Etileno (Kg/h)	↑	↑	↑	↑	↑
Flujo de Hidrógeno (Kg/h)	==	↑	↓	↓	==
Flujo de reciclo de suspensión concentrada (Kg/h)	15%	15%	15%	15%	==
	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	
Variables manipuladas	Índice de polidispersidad en el 2do Reactor	Conversión Global en el 1er Reactor	Conversión Global en el 2do Reactor		
Flujo de Etileno (Kg/h)	↑	↓	↑		
Flujo de Hidrógeno (Kg/h)	↑	==	↑		
Flujo de reciclo de suspensión concentrada (Kg/h)	↑	==	↑		

6. CONCLUSIONES

A partir de los resultados obtenidos en las simulaciones de los intercambiadores y de los reactores del proceso de producción de polietileno de alta densidad; y en los estudios de sensibilidad realizados, se puede concluir los siguientes aspectos:

En cuanto a los intercambiadores de calor según lo simulado se tiene:

- Dadas las características del polímero, es probable que existan restos del mismo a través del área efectiva de los intercambiadores de calor, y en consecuencia los mismos presentan factores de ensuciamiento distintos de cero.

Caso N° 1 12 ton/h de alimentación de etileno:

- Para este caso, el factor de ensuciamiento del intercambiador E-104 es de 0,00074 y para el intercambiador E-123 es 0,00025.
- Las simulaciones de las temperaturas de salida de la suspensión concentrada del intercambiador E-104, generan una tendencia que sigue el mismo comportamiento que el presentado por los valores de operación.
- El intercambiador del reactor D-101, el E-104, presenta un factor de ensuciamiento mayor al intercambiador del segundo reactor (D-121), el E-123, debido a la naturaleza y propiedades del polímero en cada reactor.
- La simulación de las temperaturas de la suspensión concentrada, del intercambiador E-123, sigue el mismo comportamiento que el presentado por los valores de operación, con un porcentaje de desviación que no supera al 1,17%.

Caso N° 2 14,5 ton/h de alimentación de etileno:

- Para esta carga el factor de ensuciamiento del intercambiador E-104 es de 0,00122 y para el E-123 tiene un valor 0.000221.

- La simulación de las temperaturas de la suspensión concentrada, del intercambiador E-104, sigue el mismo comportamiento que el presentado por los valores de operación.
- La simulación de las temperaturas de salida la suspensión concentrada, del intercambiador E-123, generó una tendencia que sigue el mismo comportamiento que el presentado por los valores de operación, con un porcentaje de desviación que no supera el 1%.
- Se generó un ajuste óptimo de intercambio calórico para la producción de polietileno de alta densidad, que se encuentra acorde con las directivas operacionales de la Planta el Tablazo.
- El intercambiador E-104 presenta un factor de ensuciamiento mayor que para el caso de 12 t/h de carga, debido a que se incrementan las posibilidades de contacto entre el polímero y las paredes del intercambiador.
- Para ambos casos, por el lado carcasa (flujo de agua de enfriamiento), el método termodinámico utilizado por el simulador (tablas de vapor), es más completo que para el lado de la suspensión concentrada (Método POLYNRTL).
- El programa realizado en Delphi es una herramienta útil para obtener valores aproximados de los coeficientes de transferencia de calor de una forma rápida y sencilla, y que además permite corroborar si la simulación realizada genera buenos resultados.

En cuanto a la validación y simulación del circuito de polimerización para los reactores del proceso de obtención de polietileno de alta densidad se tiene:

- Los procesos de simulación para los circuitos de reacción primario (reactor D-101), y secundario (reactor D-121), se acoplan y

representan en buena forma el proceso simulado, con porcentajes de desviación que no sobrepasan el 6% y el 4% respectivamente.

- En el primer reactor de polimerización se obtiene un producto con índice de polidispersidad de 2, es decir, monodisperso; y en el reactor se genera una cantidad de calor negativa, lo cual ratifica que la reacción es exotérmica; y peso molecular y flujo de polietileno de alta densidad aceptables, con porcentajes de desviación de 4% y 2% respectivamente.
- En el segundo reactor se obtiene un producto con un índice de polidispersidad de 4, es decir, polidisperso; presentando resultados aceptables en cuanto al peso molecular y flujo de polietileno de alta densidad, con porcentajes de desviación de 6% y 5%, respectivamente.
- En ambos reactores la conversión por pasos es menor en casi la mitad que la conversión global; debido a que ambos presentan relaciones de recirculación con valores altos que hacen la diferencia entre ambas sea tan diferentes.
- La transferencia de masa en los reactores es poco eficiente debido al gran retromezclado, sin embargo, esto se compensa con el aumento de la cantidad de calor retirado en los mismos.

En cuanto al estudio de sensibilidad para el aumento de la calidad y producción de polietileno de alta densidad, se tiene que:

- El flujo de etileno es la variable que maximiza de mejor manera la producción y calidad del polietileno de alta densidad, ya que produce aumentos en la producción, peso molecular e índice de polidispersidad en ambos reactores de polimerización; incrementando además la conversión global en el segundo reactor.

-

7. RECOMENDACIONES

A partir del estudio realizado al estudio de sensibilidad y de los resultados de las simulaciones, y con la finalidad de optimizar proyectos similares posteriores, se sugieren las siguientes recomendaciones:

- Es necesario investigar los datos termodinámicos del polietileno de alta densidad para poder utilizar los método termodinámicos Sanchez-Lacombe y Chao-Seader ^(Neeraj, P., 2002), ya que según estudios realizados este es uno de los métodos más completos para la simulación de estos procesos.
- En el modelo del intercambiador de calor, se debería realizar un estudio incluyendo aletas para optimizar el proceso transferencia de calor.
- Sería recomendable obtener los valores de las bases de diseño de los condensadores de tope de cada reactor, para mejorar los resultados de la simulación del proceso de polimerización.
- Para mejorar la validación de los reactores de polimerización sería conveniente tener datos reales de operación para los dos reactores de polimerización.
- Es importante tomar en consideración un estudio para mejorar el comportamiento fluidodinámico del reactor, para estimar la separación líquido-vapor, distribución y mezclado de los reactivos y dispersión.

- Deben llevarse a cabo pruebas experimentales que permitan comprobar las cinéticas de las diferentes reacciones, ya que no se disponía de estos datos a nivel de operación.
- Es necesario encontrar los datos de los coeficientes de actividad para mejorar la separación líquido-vapor que sale del reactor.

8. BIBLIOGRAFÍA

1. *Aguirre S. Luis D. Desarrollo y adaptación a nivel de laboratorio del proceso de Polimerización de Etileno tipo suspensión que se lleva a cabo en el complejo Petroquímico el Tablazo.* Sartenejas, Marzo 2002.
2. **Aspen B-JAC 11.1 User Guide.** By Apen Technology, Inc. Cambridge, MA, USA. Copyright © Septiembre 2001
3. **Aspen Plus 11.1 Unit Operation Models.** By Apen Technology, Inc. Cambridge, MA, USA. Copyright © Septiembre 2001.
4. **Aspen Plus 11.1 User Guide.** By Apen Technology, Inc. Cambridge, MA, USA. Copyright © Septiembre 2001.
5. *Bauman Robert J. World Plastics Outlook.* Modern Plastics. Pp. A-14 - A-23. Noviembre 1996.
6. *Brown Nigel P., Heywood Nigel I., Slurry Handling Design of Solid-Liquid Systems.* 1ra. Edición. ELSERVIER APPLAIED SCIENCE. England. 1991.
7. **Encyclopedia of Polymer Science and Engimeering.** Vol 6. Editorial John Wiley & Sons. Tercera Edición. U.S.A. 1986.
8. *González M. José A.; Alvarez U. Jon I.; González María; González Marco. Ingeniería Química.* Octubre 1989.137-142.
9. *Hong K. Choi; Jae H. Kim; Young S. Ko y Seong I. Woo. Industrial Engineering Chemical Research.* 1997, 36, 1337-1342.

10. *Kern Donald Q.* **Procesos de Transferencia de Calor.** Compañía Editorial Continental. Trigésima segunda reimpresión. México. 2001.
11. **Manual de diseño de proceso PDVSA. Transferencia de calor: Intercambiadores de calor. Principios básicos.** MDP-05-E-01. Julio 1995.
12. **Manual de diseño de procesos PDVSA. Flujo de Fluidos: Flujo bifásico líquido-sólido.** MDP-02-FF-06. Septiembre 1997.
13. *Mcketta, John J.* **Chemical Processing Handbook.** Editorial Marcel Dekker, Inc. Nueva York 1993.
14. *Mcketta J.J.* **Encyclopedia of Chemical Processing and Design.** Vol. 40. Editorial Marcel Dekker, Inc. New York. 1992.
15. *Neeraj P.Khare, Kevin C. Seavey y Y. A. Liu.* **Industrial Engineering Chemical Research.** 2002, 41, .
16. *Özbelge T. A. y T. G Somer.* **The Chemical Engineering Journal,** 1994, 55, 39-44
17. **Polymer Plus User Guide.** By Apen Technology, Inc. Cambridge, MA, USA. Copyright © Febrero 2000.
18. *Rubin Irvin.* **Materiales Plásticos, Propiedades y Aplicaciones.** Editorial Limusa,S.A. Primera Edición. México. 1998.

19. *Torres Humberto. Adaptación y montaje de un sistema de polimerización tipo suspensión y evaluación del desempeño de nuevos catalizadores para la producción de polietileno con control de peso molecular*, Caracas, Junio 2003.

20. *Wiseman, P. Petrochemicals*. Ellis Horwood Limited. Primera Edición. U.S.A 1986.

21. <http://www.uned.es/quim5-macromoleculas/conceptos/definiciones.htm>

9. APENDICE

Apéndice A. Resultados de las iteraciones realizadas para realizar la validación de los intercambiadores de calor.

A.1 Caso N° 1.

Tabla N° 32. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-104.

Flujo de suspensión concentrada Fsc (tn/h)	Temp de salida de la Suspensión Concentrada (°C) *	% Desviación
347	78,32	4,77
400	79,20	3,71
450	79,83	2,93
500	80,34	2,32
550	80,75	1,81
600	81,10	1,39
650	81,39	1,04
700	81,64	0,73
750	81,86	0,47
800	82,05	0,24
830	82,15	0,11

* Temperatura de salida de la solución concentrada T= 82,24 °C

Tabla N° 33. Resultados del cálculo del calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-104.

Factor de ensuciamiento $R \times (10^{-3})$ (m^2 $^{\circ}C/W$)	Temp de salida de la Suspensión Concentrada ($^{\circ}C$)	Temp de salida del agua ($^{\circ}C$)	Calor intercambiado (Kcal/h) *	% Desviación
0,0	77,69	54,01	3.372.740	-146,5
1,8	80,34	47,94	2.035.274	-48,8
1,5	80,24	48,18	2.088.579	-52,7
2,0	80,39	47,78	2.001.353	-46,3
2,1	80,43	47,70	1.981.969	-44,9
2,2	80,46	47,63	1.967.431	-43,8
2,4	80,52	47,48	1.933.510	-41,3
2,6	80,57	47,35	1.904.435	-39,2
3,0	80,69	47,06	1.841.438	-34,6
3,5	80,81	46,75	1.773.596	-29,6
4,0	80,91	46,46	1.710.599	-25,0
4,5	81,03	46,18	1.647.603	-20,4
5,0	81,12	45,93	1.594.298	-16,5
5,5	81,22	45,67	1.536.147	-12,3
6,0	81,31	45,45	1.487.688	-8,7
6,5	81,38	45,25	1.444.075	-5,6
7,0	81,46	45,05	1.400.462	-2,4
7,1	81,47	45,01	1.390.771	-1,7
7,2	81,48	44,99	1.385.925	-1,3
7,3	81,50	44,94	1.376.233	-0,6
7,4	81,50	44,92	1.371.387	-0,2
7,4	81,51	44,92	1.371.387	-0,2
7,41	81,50	44,92	1.371.387	-0,2

* Calor teórico Q = 1.368.081 Kcal/hr

Tabla N° 34. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-123.

Flujo de suspensión concentrada Fsc (t/h)*	Temp de salida de la Suspensión concentrada (°C)	% Desviación
349	73,76	5,98
400	74,69	4,81
450	75,39	3,91
500	75,95	3,20
550	76,41	2,61
600	76,79	2,13
650	77,11	1,72
700	77,39	1,36
750	77,63	1,06
800	77,84	0,79
850	78,02	0,56
900	78,18	0,35
950	78,33	0,16
1000	78,43	0,04
1050	78,45	0,01

* Temperatura de salida de la solución concentrada T= 78,46 °C

Tabla N° 35. Resultados del cálculo del calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-123.

Factor de ensuciamiento R x (10 ⁻³) (m ² °C /W)	Temp de salida de la Suspensión concentrada (°C)	Temp de salida del agua (°C)	Calor intercambiado (Kcal/h)	% Desviación
0,0	77,31	65,98	1.799.664	-20,03
1,8	77,58	62,53	1.571.388	-4,81
1,5	77,54	63,05	1.605.895	-7,11
2,0	77,60	62,21	1.550.153	-3,39
2,1	77,61	62,05	1.539.536	-2,68
2,2	77,62	61,89	1.528.918	-1,98
2,4	77,65	61,57	1.507.683	-0,56
2,5	77,66	61,41	1.497.066	0,15
2,5	77,65	61,49	1.502.375	-0,21

* Calor teórico Q = 1.499.289 Kcal/h

A.2 Caso N° 2.

Tabla N° 36. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-104.

Flujo de suspensión concentrada Fsc (t/h)	Temp de salida de la Suspensión concentrada (°C)	% Desviación
347	79,48	2,75
400	80,22	1,84
450	80,76	1,18
500	81,19	0,66
550	81,54	0,23
560	81,61	0,15
570	81,67	0,07
580	81,72	0,00

Temperatura de salida de la solución concentrada T= 81,73 °C

Tabla N° 37. Resultados del cálculo del calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-104.

Factor de ensuciamiento R x (10⁻³) (m² °C /W)	Temp de salida de la suspensión concentrada (°C)	Temp de salida del agua (°C)	Calor intercambiado (Kcal/h) *	% Desviación
0,0	75,20	44,20	3.405.464	-193,3
1,8	78,83	40,13	2.150.417	-85,2
1,5	78,66	40,33	2.211.639	-90,5
2,0	78,92	40,00	2.119.806	-82,6
2,1	78,96	39,98	2.104.500	-81,2
2,2	79,01	39,93	2.089.195	-79,9
2,4	79,12	39,81	2.050.931	-76,6
2,6	79,21	39,71	2.020.320	-74,0
2,8	79,29	39,61	1.989.709	-71,3
3,0	79,38	39,51	1.959.098	-68,7
3,5	79,58	39,29	1.890.224	-62,8
4,0	79,78	39,06	1.821.349	-56,8
4,5	79,95	38,87	1.760.127	-51,6
5,0	80,11	38,69	1.706.558	-47,0
5,5	80,28	38,49	1.645.336	-41,7
6,0	80,42	38,34	1.599.420	-37,7
6,5	80,55	38,19	1.553.503	-33,8
7,0	80,68	38,05	1.507.587	-29,8
7,5	80,81	37,90	1.461.671	-25,9
8,0	80,90	37,80	1.431.060	-23,2
8,5	81,03	37,65	1.385.144	-19,3
9,0	81,12	37,55	1.354.533	-16,6
9,5	81,21	37,45	1.323.922	-14,0
10,0	81,29	37,35	1.293.311	-11,4
11,0	81,47	37,15	1.232.089	-6,1
12,0	81,64	36,95	1.170.867	-0,8
12,2	81,67	36,93	1.163.215	-0,2

* Calor teórico Q = 1.161.213 Kcal/hr

Tabla N° 38. Resultados del cálculo del flujo de operación de la suspensión concentrada para el E-123.

Flujo de suspensión concentrada Fsc (t/h)	Temp de salida de la Suspensión concentrada (°C)	% Desviación
349	73,15	6,66
400	74,16	5,37
450	74,92	4,39
500	75,53	3,61
550	76,03	2,98
600	76,45	2,45
650	76,80	2,00
700	77,10	1,61
750	77,36	1,28
800	77,59	0,99
850	77,79	0,73
900	77,97	0,50
950	78,13	0,30
1000	78,27	0,12
1025	78,36	0

Temperatura de salida de la solución concentrada T = 78,36 °C

Tabla N° 39. Resultados del cálculo del calor con respecto al factor de ensuciamiento en el E-123.

Factor de ensuciamiento R x (10 ⁻³) (m ² °C /W)	Temp de salida de la Suspensión concentrada (°C)	Temp de salida del agua de enfriamiento (°C)	Calor intercambiado (Kcal/h) *	% Desviación
0,0	77,34	65,06	1.903.999	-16,6
1,8	77,64	61,27	1.677.916	-2,7
1,5	77,60	61,84	1.711.965	-4,8
2,0	77,67	60,91	1.656.125	-1,4
1,9	77,65	61,18	1.672.468	-2,4
1,9	77,66	61,09	1.667.021	-2,05
2,0	77,66	61,00	1.661.573	-1,7
2,0	77,67	60,95	1.658.849	-1,5
2,0	77,67	60,91	1.656.125	-1,4
2,2	77,70	60,54	1.634.334	-0,05
2,3	77,72	60,36	1.623.438	0,6
2,2	77,70	60,52	1.632.973	0,03

* Calor teórico Q = 1.633.478 Kcal/h

Apéndice B. Resultados intermedios de simulación para el estudio de sensibilidad.

Tabla N° 40. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-101, al aumentar el Flujo de etileno.

Variable	5%	15%	30%
Calor del Intercambiador E-104 (Kcal/h)	1.337.533	1.329.256	1.304.748
Calor del Condensador E-101 (Kcal/h)	3.805.732	3.919.070	3.967.213
Producción de HDPE (Kg/h)	8.286	8.605	9.086
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	35.590	36.384	37.767
PDI (adiml)	2,08	2,09	2,11
Conversión global Xg (adim)	97,5	94,6	92

Carga de etileno para cada caso (Kg/h): 8.662,5; 9.487,5; 10.725.

Tabla N° 41. Resultados de la simulación para el segundo circuito de polimerización, Reactor D-121, al aumentar el flujo de etileno.

Variable	5%	15%	30%
Calor del Intercambiador E-123 (Kcal/h)	2.718.986	2.703.787	2.703.787
Calor del Condensador E-103 (Kcal/h)	2.193.075	2.393.105	2.193.075
Producción de HDPE (Kg/h)	16.434	16.639	17.152
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	152.669	154.568	156.219
PDI (adimensional)	7,26	7,10	6,92
Conversión global Xg (adim)	99,7	99,6	99,7

Carga de etileno para cada caso (Kg/h): 7.087,5; 7.762,5; 8.775.

Tabla N° 42. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-101, al aumentar el flujo de hidrógeno.

Variable	5%	10%	30%
Calor del Intercambiador E-104 (Kcal/h)	1.361.729	1.365.720	1.413.024
Calor del Condensador E-101 (Kcal/h)	3.750.210	3.798.115	3.804.048
Producción de HDPE (Kg/h)	8.282	8.176	8.101
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	33.490	33.100	32.850
PDI (adiml)	2,06	2,06	2,05
Conversión global Xg (adim)	99,8	98,1	98
Variable	40%	50%	
Calor del Intercambiador E-104 (Kcal/h)	1.413.027	1.413.029	
Calor del Condensador E-101 (Kcal/h)	3.808.622	3.813.550	
Producción de HDPE (Kg/h)	8.099	8.097	
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	31.956	31.788	
PDI (adiml)	2,05	2,04	
Conversión global Xg (adim)	98	98	

Carga de hidrógeno para cada caso (Kg/h): 3,885; 4,07; 4,81, 5,18; 5,55.

Tabla N° 43. Resultados de la simulación para el segundo circuito de polimerización, Reactor D-121, al aumentar el flujo de hidrógeno.

Variable	5%	10%	30%
Calor del Intercambiador E-123 (Kcal/h)	2.529.104	2.529.104	2.544.294
Calor del Condensador E-103 (Kcal/h)	3.201.536	3.201.536	3.158.232
Producción de HDPE (Kg/h)	15.112	15.097	15.085
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	98.658	96.615	95.326
PDI (adimensional)	10,32	10,14	9,63
Conversión global Xg (adim)	95,1	91,5	96,5
Variable	40%	50%	
Calor del Intercambiador E-123 (Kcal/h)	2.544.294	2.544.294	
Calor del Condensador E-103 (Kcal/h)	3.158.232	3.158.232	
Producción de HDPE (Kg/h)	15.004	14.928	
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	94.538	92.879	
PDI (adimensional)	9,46	9,30	
Conversión global Xg (adim)	95,9	95,4	

Carga de hidrógeno para cada caso (Kg/h): 0,63; 0,66; 0,78; 0,84; 0,90; 1,2.

Tabla N° 44. Resultados de la simulación para el primer circuito de polimerización, Reactor D-101, al aumentar el flujo de reciclo de la suspensión concentrada.

Variable	5%	10%	15%
Calor del Intercambiador E-104 (Kcal/h)	1.441.106	1.461.070	1.489.015
Calor del Condensador E-101 (Kcal/h)	4.089.151	4.089.151	4.764.784
Producción de HDPE (Kg/h)	8.098	8.125	8210
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	33.226	33.720	34.274
PDI (adiml)	2,04	2,04	2,05
Conversión global Xg (adim)	97,8	97,7	97,9
Variable	20%	25%	30%
Calor del Intercambiador E-104 (Kcal/h)	1.508.975	1.528.935	1.552.887
Calor del Condensador E-101 (Kcal/h)	4.764.784	4.764.784	4.764.784
Producción de HDPE (Kg/h)	8.214	8.209	8.204
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	34.115	33.652	33.105
PDI (adim)	2,05	2,05	2,05
Conversión global Xg (adim)	97,9	97,8	97,8

Flujo de Suspensión concentrada para cada caso (Kg/h): 364.550, 381.700, 399.050, 416.400, 433.750, 451.100.

Tabla N° 45. Resultados de la simulación para el segundo circuito de polimerización, Reactor D-121, al aumentar el Flujo de reciclo de la Suspensión concentrada.

Variable	5%	10%	15%
Calor del Intercambiador E-123 (Kcal/h)	3.110.256	3.298.756	3.413.919
Calor del Condensador E-103 (Kcal/h)	2.845.589	3.258.741	3.691.377
Producción de HDPE (Kg/h)	13.496	14.247	15.298
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	140.646	160.587	185.236
PDI (adimensional)	8,60	8,85	9,65
Capacidad de polimerización (ton/h)	17,3	15,4	18,5
Conversión global Xg (adim)	83,5	84,8	96,2
Variable	20%	25%	30%
Calor del Intercambiador E-123 (Kcal/h)	3.489.868	3.510.652	3.658.235
Calor del Condensador E-103 (Kcal/h)	3.691.377	3.691.377	3.691.377
Producción de HDPE (Kg/h)	14.621	9.546	4.462
Peso Molecular Promedio del Polímero (gr/grmol)	179.354	165.478	161.587
PDI (adimensional)	9,36	9,20	9,15
Conversión global Xg (adim)	93,4	94,9	96,2

Flujo de Suspensión concentrada para cada caso (Kg/h): 364.550, 381.700, 399.050, 416.400, 433.750, 451.100.

Apéndice C. Procedimiento de cálculo típico para obtener el calor intercambiado en el programa Delphi 6.0.

El simulador ASPEN Polymer Plus utiliza la correlación de Bell-Delaware para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor, del lado de la carcaza y la correlación de Schulunder y Gnielinski para el lado de los tubos.

En el programa realizado en Borland Delphi 6.0, para el lado carcaza se utilizaron los cálculos tomados del libro Kern, y para la correlación del lado tubo primero se utilizó, la ecuación para el cálculo de la viscosidad de la lechada ^(manual de diseño de procesos, 1997) esta ecuación relaciona la fracción volumétrica de los sólidos, con la viscosidad relativa de la suspensión concentrada y la viscosidad del líquido, en este caso hexano.

Para el cálculo de las propiedades y del coeficiente de transferencia de calor de la suspensión concentrada, utilizando el diámetro de partícula se tomaron las correlaciones publicadas por Özbelge T:

El factor de ensuciamiento tanto para el lado del agua como para el lado de la suspensión concentrada se utilizó el Manual de diseño de proceso transferencia de calor. Intercambiadores de calor.

Tabla N° 46. Datos del flujo de suspensión concentrada utilizados para una de las corridas del programa

Flujo de alimentación del suspensión concentrada $F_{SC}(T/h)$	349
Temperatura de entrada del suspensión concentrada de (T_{eSC}) (°C)	78
Temperatura de salida del suspensión concentrada T_{sSC}(°C)	71,27
Flujo de alimentación del agua de enfriamiento (m^3/h)	200
Temperatura de entrada del agua de enfriamiento T_{eA} (°C)	40
Temperatura de salida del agua de enfriamiento T_{sA} (°C)	46,99

Tabla N° 47. Geometría del intercambiador E-123

Tipo	BEM
Orientación	Vertical
Diámetro de la carcaza (m)	0,59
Número de pasos de la carcaza	1
Pitch (m)	0,048
Número de tubos	96
Forma del arreglo de los tubos	Triangular
Diámetro externo de los tubos (m)	$3,81 \cdot 10^{-2}$
Espesor de los tubos (m)	$2 \cdot 10^{-3}$
Número de paso por tubo	3
Longitud de los tubos (m)	6
Conductividad térmica del tubo(W/m-K)	16,2
Factor de Ensuciamiento Interno ($m^2 \text{ } ^\circ\text{C/W}$)	$1,8 \cdot 10^{-4}$
Factor de Ensuciamiento Externo ($m^2 \text{ } ^\circ\text{C/W}$)	$3,3 \cdot 10^{-4}$

Tabla N° 48. Propiedades del Suspensión concentrada:

Densidad ρ_{SL} (kg/m³)	627,5
Viscosidad μ_{SL} (Pa-s)	0,008323
Capacidad Calorífica C_{pSL} (J/Kg-K)	2.477
Conductividad térmica K_{SL} (W/m-K)	0,121
Diámetro de la partícula (mm)	0,2

Tabla N° 49. Propiedades del Hexano:

Densidad ρ_{HEX} (kg/m³)	659
Viscosidad μ_{HEX} (Pa-s)	1,53*10 ⁻³
Capacidad Calorífica C_{pHEX} (J/Kg-K)	2.510
Conductividad térmica K_{HEX} (W/m-K)	0,1381

- Cálculo del Coeficiente de Película para el Suspensión concentrada que circula por el tubo:

1.- Temperatura promedio del Polietileno en suspensión

$$T_{prom} = \frac{T_{e_{sl}} + T_{s_{sl}}}{2} = \frac{78^{\circ}C + 71,27^{\circ}C}{2} = 74,6^{\circ}C \quad (I)$$

2.- Cálculo de las propiedades para la suspensión concentrada del polietileno en el Hexano. (Özbelge T, 1994)

2.1. Cálculo de la Conductividad de la mezcla:

$$k_S = k_{HEX} \cdot [2 \cdot k_{HEX} + k_{SL} - 2 \cdot C_S \cdot (k_{HEX} - k_{SL})] / [2 \cdot k_{HEX} + k_{SL} + C_S \cdot (k_{HEX} - k_{SL})] \quad (II)$$

$$k_s = 1,381E - 01 \cdot \frac{[(2 \cdot 1,381E - 01) + (1,21E - 01) - (2 \cdot 0,1032917) \cdot (1,381E - 01 - 1,21E - 01)]}{[(2 \cdot 1,381E - 01) + (1,21E - 01) + (0,1032917) \cdot (1,381E - 01 - 1,21E - 01)]}$$

$$k_s = 1,360E - 01 \frac{W}{m K}$$

2.3 Cálculo de la densidad promedio de la suspensión líquido-sólido:

$$\rho_s = \rho_{HEX} \cdot (1 - C_s) + \rho_{SL} \cdot C_s \quad (III)$$

$$\rho_s = 659 \cdot (1 - 0,032917) + 627,49 \cdot 0,103$$

$$\rho_s = 655,8 \frac{Kg}{m^3}$$

2.4 Cálculo de la Capacidad Calorífica de la suspensión líquido-sólido:

$$Cp_s = Cp_{SL} \cdot C_s + Cp_{HEX} (1 - C_s) \quad (IV)$$

$$Cp_s = (2,477E + 03) \cdot (0,103) + 2,510E + 03 \cdot (1 - 0,103)$$

$$Cp_s = 2.506E + 03 \frac{J}{Kg K}$$

3.- Área de la sección transversal del tubo:

$$A_{ST} = \pi \cdot \frac{(d_{int})^2}{4} \quad (V)$$

$$A_{ST} = \pi \cdot \frac{(0,0361)^2}{4}$$

$$A_{ST} = 0,00102 \text{ m}^2$$

4.- Velocidad másica del suspensión concentrada por los tubos:

$$G'_{SL} = \frac{m_{SL}}{A_{ST} \cdot Nt} \quad (VI)$$

$$G_{SL} = \frac{349 \frac{Tn}{h} \cdot \left(\frac{1000 \text{ Kg}}{1Tn} \right) \cdot \left(\frac{1h}{3600 \text{ seg}} \right)}{(0,00102 \text{ m}^2) \cdot 96}$$

$$G_{SL} = 2970 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2 \text{ seg}}$$

5.- Número de Reynolds

$$\text{Re}_{SL} = \frac{G'_{SL} \cdot d_{\text{int}}}{\mu_S} \quad (VII)$$

$$\text{Re}_{SL} = \frac{2970 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2 \text{ seg}} \cdot 0,0361 \text{ m}}{8,320E - 03 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2 \text{ seg}}}$$

$$\text{Re}_{SL} = 12834$$

6.- Número de Prandlt para el flujo del Suspensión concentrada:

$$\text{Pr}_{SL} = \frac{Cp_S \cdot \mu_S}{k_S} \quad (VIII)$$

$$\text{Pr}_{SL} = \frac{\left(2,596E + 03 \frac{J}{Kg K}\right) \cdot \left(8,32E - 3 \frac{Kg}{m h}\right)}{\left(0,13626 \frac{J}{m h K}\right)}$$

$$\text{Pr}_{SL} = 153,12$$

7.- Número de Nusselt del Suspensión concentrada:

$$Nu_{SL} = 0,202 \cdot (\text{Re}_{SL})^{0,6} \cdot (\text{Pr}_{SL})^{0,675} \cdot \left(\frac{d_{\text{int}}}{d_p}\right)^{0,092} \cdot \left(\frac{\mu_S}{\mu_{HEX}}\right)^{-1,95} \quad (\text{IX})$$

$$Nu_{SL} = 0,202 \cdot (12838)^{0,6} \cdot (153,12)^{0,675} \cdot \left(\frac{3,61E - 2}{0,002}\right)^{0,092} \cdot \left(\frac{8,32E - 3}{1,53E - 3}\right)^{-1,95}$$

$$Nu_{SL} = 84,44$$

8.- Coeficiente local de transferencia de Calor de película del Suspensión concentrada

$$h_{SL} = Nu_{SL} \cdot \left(\frac{k_{SL}}{d_{\text{int}}}\right) \quad (\text{X})$$

$$h_{SL} = 84,44 \cdot \left(\frac{1,36E - 1 \frac{W}{mK}}{3,61E - 1 m}\right)$$

$$h_{SL} = 318,73 \frac{W}{m^2 K}$$

9.- Coeficiente local de transferencia de Calor Corregido por diámetro para la película del Suspensión concentrada

$$hc_{SL} = h_{SL} \cdot \left(\frac{d_{int}}{d_{ext}} \right) \times \phi \quad (XI)$$

$$hc_{sl} = 318,73 \frac{W}{m^2 K} \cdot \left(\frac{0,0361 m}{0,0381 m} \right) \times 5,44$$

$$hc_{SL} = 1642,9 \frac{W}{m^2 K}$$

Tabla N° 50 Propiedades del Agua de enfriamiento utilizadas para este calculo:

Densidad ρ_{AF} (kg/m³)	990,14
Viscosidad μ_{AF} (Pa-s)	5,757*10 ⁻⁴
Capacidad Calorífica Cp_{AF} (J/Kg-K)	4181
Conductividad térmica K_{AF} (W/m-K)	0,635

-Cálculo del Coeficiente de Película para el Agua de Enfriamiento que circula por el tubo:

10.- Area de flujo:

$$A_s = \frac{D_{int} \cdot C \cdot B}{Pt} \quad (XII)$$

$$A_s = \frac{0,59 \cdot (0,048 - 0,0381) \cdot 0,443}{0,048}$$

$$A_s = 5,39E - 02 m^2$$

11.- Flujo másico:

$$Fm_{AF} = Fv_{AF} \cdot \rho_{AF} \quad (\text{XIII})$$

$$Fm_{AF} = 200 \frac{m^3}{h} \cdot 990,14 \frac{Kg}{m^3}$$

$$Fm_{AF} = 1,98E + 05 \frac{Kg}{h}$$

12.- Velocidad Másica

$$G_{AF} = \frac{Fm_{AF}}{A_S} \quad (\text{XIV})$$

$$G_{AF} = \frac{1,98E + 05 \frac{Kg}{h}}{5,39E - 2 m^2}$$

$$G_{AF} = 3,710E + 06 \frac{Kg}{m^2 h}$$

13.- Diámetro Equivalente

$$de = \frac{4 \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot Pt \times 0,86 \cdot Pt - \frac{1}{2} \cdot \pi \left(\frac{d_{int}^2}{4} \right) \right)}{\left(\frac{1}{2} \cdot \pi \cdot d_{int} \right)} \quad (\text{XV})$$

$$de = \frac{4 \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot 0,048 \times 0,86 \cdot 0,048 - \frac{1}{2} \cdot \pi \cdot \frac{(0,0361)^2}{4} \right)}{\left(\frac{1}{2} \cdot \pi \cdot 0,0361 \right)}$$

$$de = 0,0338 m$$

14.- Número de Reynolds del flujo de Agua de enfriamiento:

$$Re_{AF} = \frac{de \cdot G_{AF}}{\mu_{AF}} \quad (XVI)$$

$$Re_{AF} = \frac{3,38E-2 m \cdot 3710E+03 \frac{Kg}{m^2 h}}{5,71E-4 \frac{Kg}{m \text{ seg}} * 3600}$$

$$Re_{AF} = 60976,9$$

15. Número de Prandlt para el agua de enfriamiento

$$Pr_{AF} = \frac{Cp_{AF} \cdot \mu_{AF}}{k_s} \quad (XVII)$$

$$Pr_{SL} = \frac{\left(4181 \frac{J}{Kg K} \right) \cdot \left(5,71E-4 \frac{Kg}{m h} \right)}{\left(0,635 \frac{J}{m hK} \right)}$$

$$Pr_{SL} = 3,759$$

16. Factor de transferencia de calor

$$Jh = 0,4256 \cdot (\text{Re}_{AF})^{0,5385} \quad (\text{XVIII})$$

$$Jh = 0,4256 \cdot (60976,9)^{0,5385}$$

$$Jh = 160,63$$

17. Coeficiente local de transferencia de calor de película del agua.

$$h_{AF} = Jh * \left(\frac{K_{AF}}{De} \right) \cdot \left(\frac{Cp_{AF} \cdot v_{AF}}{Cp_{AF}} \right) \quad (\text{XIV})$$

$$h_{AF} = 160,63 * \left(\frac{0,635 \frac{W}{m \cdot K}}{0,0338m} \right) \cdot \left(\frac{4181 \frac{J}{Kg \cdot K} \cdot 0,000571Pa \cdot s}{0,635 \frac{W}{m \cdot K}} \right)$$

$$h_{AF} = 4694,4$$

18. Coeficiente local de transferencia de calor de película del agua. Corregido

$$h_{AFC} = 4694,37 \cdot \left(\frac{0,00832Pa \cdot s}{0,00571Pa \cdot s} \right)^{0,14} \quad (\text{XV})$$

$$h_{AFC} = 6831,1$$

19. Cálculo del porcentaje de desviación

$$\%D = \left(\frac{Fop - Fsim}{Fop} \right) \times 100 \quad (XVI)$$

10. ANEXOS

A continuación se muestran las principales ventanas necesarias para realizar la simulación en el simulador ASPEN Plus.

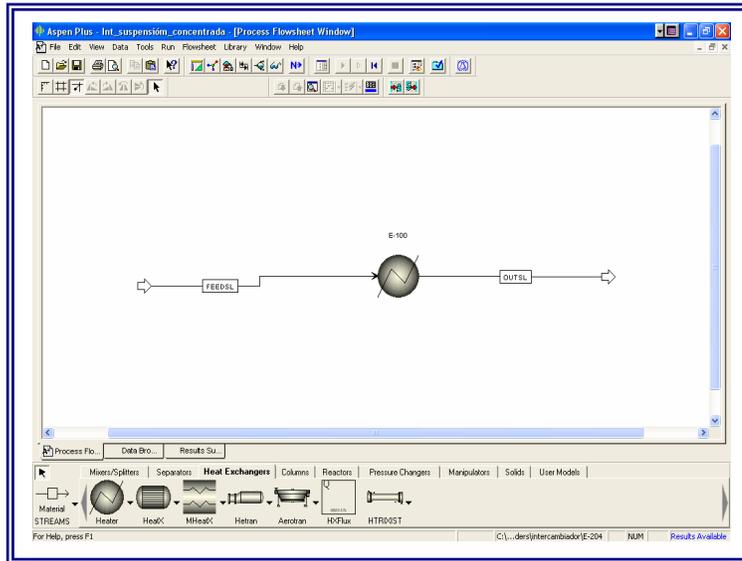


Figura N° 28. Ventana del simulador ASPEN Plus para un intercambiador sencillo.

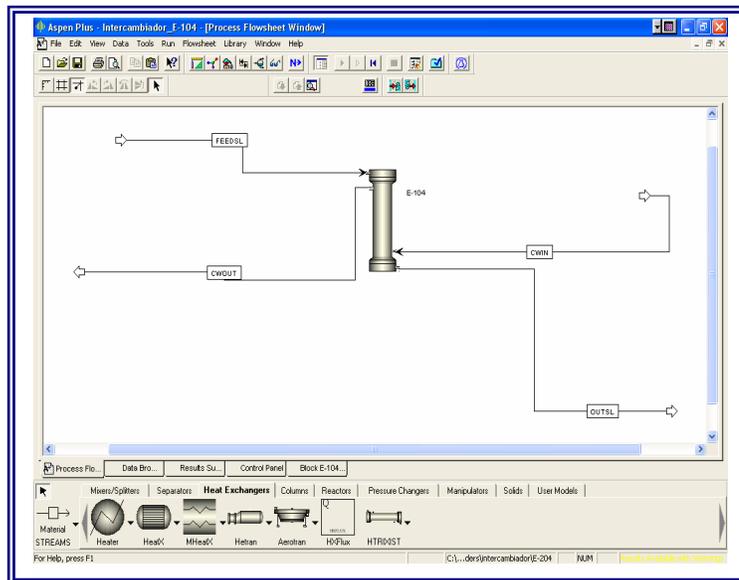


Figura N° 29. Ventana del simulador ASPEN Plus para un Intercambiador de tipo carcasa y tubo.

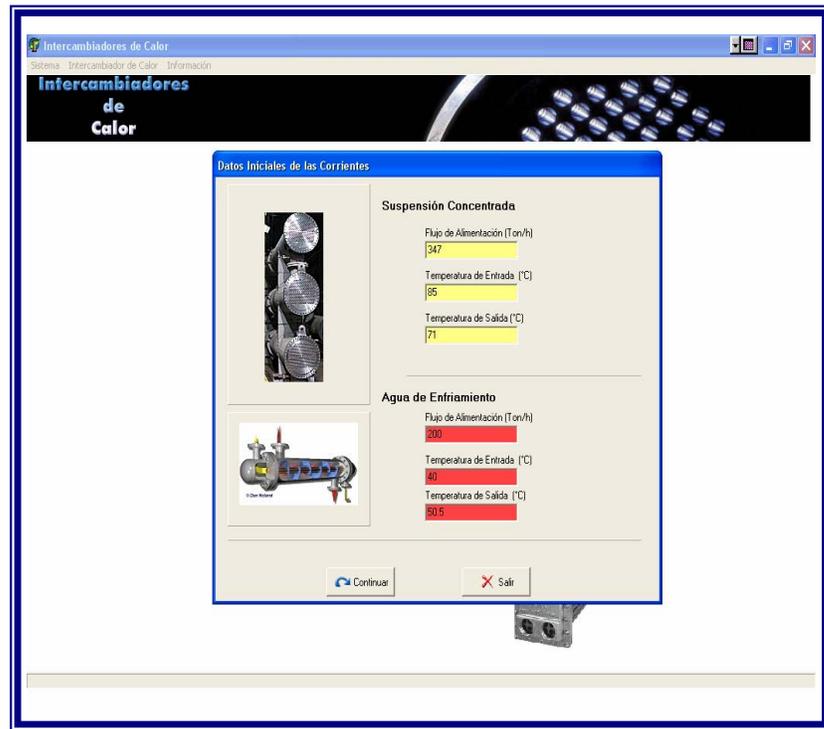


Figura N° 30 Ventana del programa realizado en Delphi 6.0.