

Las dos reacciones competitivas son:



El calor de esta reacción se aprovecha para producir vapor para emplearse en otras zonas del proceso. El control de temperatura del reactor es un factor muy importante dado que afecta a la selectividad de las reacciones. Debido a su mayor calor de reacción y a tener una energía de activación mayor, la reacción de combustión total es favorecida con un aumento de temperatura, es decir, disminuye la selectividad del catalizador hacia la primera reacción de oxidación parcial.

La siguiente tabla muestra los factores pre-exponenciales (en unidades SI) y las energías de activación de ambas reacciones:

	Energía de activación	Factor pre-exponencial
	kJ/kmol	Unidades SI
Combustión parcial	15200	340000000
Combustión total	16800	1,2e+13

Las reacciones, que siguen la expresión de Arrhenius, son de orden 0,5 y orden 3 respectivamente respecto a la concentración de oxígeno.

El reactor opera a una presión de 230psi y tiene una temperatura a la entrada del mismo de aproximadamente 450F y a la salida de unos 490F. La pérdida de carga a través del reactor es de 20psi. El reactor es de carcasa y tubos para facilitar el intercambio de calor con el fluido auxiliar. El reactor de la planta tiene 2178 tubos con una longitud de 42 pies y un diámetro de 1,54pulgadas. El reactor opera con una conversión por paso a óxido de etileno baja (entre un 20-25 %) para poder obtener una alta selectividad¹ (entre el 75 y 85 %)

A la salida del reactor la corriente se enfría a 40°C antes de pasar a la torre de absorción. Con ésta comienza la recuperación del óxido de etileno. La columna de absorción opera en contracorriente con agua. El óxido de etileno es disuelto en el agua junto con algo del resto de los componentes, dióxido, nitrógeno y etileno no convertido. La columna existente tiene 10 etapas teóricas y opera a 300psi. La cantidad de agua necesaria es de unas 1300 veces la masa existente de óxido de etileno.

La corriente acuosa es enviada a un desorbedor mientras que la corriente gaseosa es separada en dos fracciones. Una de ellas (el 90 %) es reciclada al reactor mientras que el resto es enviada al reactor de purga del sistema. El reactor de purga opera en unas condiciones similares al reactor principal pero consta únicamente de 200tubos. Este reactor necesita que se introduzca más aire para la combustión.

Tras el reactor de purga la salida pasa al absorbedor de purga, que es igual que el absorbedor principal y del cual se obtiene una corriente acuosa que se une a la obtenida anteriormente para ser alimentada al desorbedor y una corriente gaseosa que se purga del sistema. El desorbedor que opera a una presión de 60psi separa el agua (prácticamente pura) del resto de los componentes. Este agua se reciclará para las torres de absorción. La corriente gaseosa pasa a la unidad de stripper tras comprimirse a 150psi y enfriarse a 70F. En el stripper se separa el óxido de etileno y el agua (junto con un poco de etileno y de dióxido de carbono) del resto de componentes. Esta unidad trabaja a

¹Moles de etileno convertidos en la reacción de combustión parcial respecto a los convertidos en la combustión total.

una presión de 105psi. Considérese que la unidad tiene un condensador parcial y un rehervidor.

La corriente acuosa pasa a la última unidad de purificación mientras que la corriente gaseosa se ventea. La última unidad de purificación separa el óxido de etileno del agua. El agua se recicla a las torres de absorción mientras que la corriente que sale por cabeza es la producción de óxido de etileno. Esta unidad trabaja a 18psi, y al igual que la anterior, tiene un condensador parcial y un rehervidor. El óxido de etileno sale con una pureza mayor del 99,5 %m. El rendimiento de la planta² está entre un 70 y un 80 %.

La alimentación fresca a la planta está formada por la corriente de etileno y las dos corrientes de aire. La corriente de etileno tiene un caudal de 4400lbmol/h y está disponible a presión atmosférica y 25°C . La corriente de aire principal tiene un caudal de 15000lbmol/h y entra también a la presión atmosférica y a 25°C . El caudal de la corriente de aire que es alimentada al reactor de purga es de unos 2000lbmol/h a las mismas condiciones que la corriente de aire principal.

NOTAS:

- Aunque el agua se recircula y no hay una alimentación fresca (excepto para compensar las pérdidas) en la simulación no hace falta que se cierre ese lazo.
- Si da problemas de convergencia el segundo reactor de purga se puede probar a duplicar las reacciones, es decir, volver a definir las en Aspen como R-3 y R-4 (antes deberían estar creadas la R-1 y R-2) y además cambiar la base de concentración. Empleese en el primer reactor fracción molar y en el segundo molaridad.
- Tómese como indicativo de la composición a la entrada del reactor lo siguiente:

lbmol/h	
Agua	225
CO2	8900
N2	118300
O2	3150
Etileno	12800
Óxido etileno	105

- Es importante realizar la simulación de forma progresiva, basándose en los resultados anteriores. No intentar cerrar los bucles desde el principio.
- Considerar la posibilidad de cambiar el método de integración (por ejemplo, emplear el algoritmo de Broyden en lugar del de Wegstein)

²Moles obtenidos de óxido de etileno por moles alimentados de etileno