

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid Tel.: 91 336 3060 info.industriales@upm.es

www.industriales.upm.es

TRABAJO FIN DE GRADO

COLUMNAS DE DESTILACIÓN CON TABIQUE SEPARADOR INTERNO.

ANÁLISIS COMPARATIVO EN PROCESOS DE SEPARACIÓN CONVENCIONALES.

-aura Falceto Viñolas

TRABAJO FIN DE GRADO

INDUSTRIALES

TRABAJO FIN DE GRADO PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE **GRADUADO EN INGENIERÍA** QUÍMICA.





JUNIO 2018

Laura Falceto Viñolas

DIRECTOR DEL TRABAJO FIN DE GRADO: Víctor Manuel Perdices Eirin







Universidad Politécnica de Madrid.

Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (ETSII)

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

"Columnas de destilación con tabique separador interno. Análisis comparativo en procesos de separación convencionales"

Laura Falceto Viñolas

Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (UPM)

Agradecimientos

En primer lugar, un profundo agradecimiento al Profesor Santos Galán Casado, por su inestimable ayuda en el desarrollo de las simulaciones, sus excelentes consejos en la realización de este proyecto y por todo el tiempo que ha dedicado a atenderme y enseñarme el manejo del simulador.

Igualmente, agradezco a mi Tutor, Víctor Perdices Eirin, el haberme ofrecido la oportunidad de realizar un Trabajo de Fin de Grado tan ligado a la Industria Petroquímica, tema que me genera un profundo interés, y por haberme dado nociones de este campo desde el punto de vista económico, tan fundamentales en el día a día del mundo ingenieril.

A mi madre y a mi padre, ambos Ingenieros Industriales, que han entendido las dificultades por las que he pasado a lo largo de la carrera y por haberme animado a seguir el camino de la Ingeniería Química.

A Aurelio, mi novio, por el gran apoyo que me ha ofrecido, por su paciencia y por todos los días que ha permanecido a mi lado durante la realización de este trabajo, no dejando que perdiera la perspectiva del proyecto.

Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (UPM)

Resumen:

La problemática más importante enfrentada por la industria de la producción durante los siglos XX y XXI en temas de sostenibilidad es el mantenimiento del nivel productivo implementando el ahorro de energía. El Trabajo de Fin de Grado que se presenta aquí refleja una de las soluciones a esta cuestión. El interés por la reducción del consumo energético nació 3 décadas atrás, con la Gran Crisis Energética, generando como resultado la aparición de columnas acopladas térmicamente, conocidas como columnas Petlyuk. El desarrollo y la mejora de este sistema ha dado lugar a las columnas de tabique divisorio, y su uso se extiende desde los procesos de separación por transferencia de materia hasta los procesos de separación reactiva, cuyos estudios están comenzando a tomar una fuerte relevancia dentro del terreno de la Ingeniería Química.

De la mano del Laboratorio de Tecnologías Químicas de la Universidad Politécnica de Madrid, la alumna encargada de este proyecto ha realizado un estudio de aplicación práctica sobre las columnas de tabique divisorio, o sencillamente DWC – Dividing Wall Columns –. El entorno sobre el que se ha realizado este estudio ha sido una unidad de Splitter de Nafta, en el que, dependiendo de los requerimientos de separación y las capacidades, puede ser necesaria la utilización de columnas de dimensiones importantes y en serie, como es el caso del presente trabajo. El objeto de este proyecto ha sido comparar las alternativas de diseño del proceso de separación por destilación de una nafta de condensados de Gas Natural, con dos columnas en serie convencionales. Por otro lado, se ha diseñado mediante simulación el bloque DWC bajo las mismas premisas y finalmente se han comparado los costes energéticos y económicos de ambos casos, demostrando así cuál de ellos resultaba más eficiente.

Este proyecto, dentro de la cátedra de Tecnología Química del Departamento de Química Industrial, presenta un objetivo claro, pero no por ello sencillo: demostrar los resultados favorables que van ligados la columna DWC, tanto económicos como energéticos y medioambientales. Para ello, ha sido necesario el empleo del simulador comercial *Aspen Plus*, que cuenta con una plantilla relativamente nueva y todavía en desarrollo por parte de la empresa *Aspen Tech*. El motivo por el que se emplea este programa no es otro que el hecho de que es el programa comercial de mayor aplicación a nivel mundial, tras su unión con el simulador *HYSYS*, y que presenta simular las columnas objeto de estudio del presente trabajo.

La autora del presente trabajo ha requerido de un proceso analítico y de comprensión del funcionamiento de las columnas DWC, a nivel teórico, asimilando la función de cada una de las zonas en las que se divide la columna; ha necesitado del estudio y mejora de sus conocimientos del simulador en aras de conseguir los parámetros precisos para la simulación de la DWC, habiendo realizado previamente un grupo de simulaciones con construcciones de

columnas de destilación que emulaban lo que ocurría dentro de la columna de tabique divisorio. Para el estudio de los costes se ha requerido la adquisición de ciertos conocimientos del ámbito económico – empresarial, como los valores de CAPEX y OPEX, así como el uso de la herramienta que ofrece el propio programa de simulación, *Aspen Economic*.

En definitiva, este proyecto presenta, por un lado, un aspecto técnico importante a la hora de simular ambas estrategias de separación; y, por otro lado, un estudio propio del campo de las ingenierías de proyectos en el que se ha analizado el ahorro energético – así como su impacto ambiental – y el económico.

El informe aquí redactado guarda una estructura fuertemente relacionada con el proceso que ha seguido la autora para su desarrollo. En primer lugar, se presenta el marco histórico y teórico del proyecto, donde se encuadra la cabida que tiene el estudio de estas columnas y el porqué de su nacimiento. También se comentan las herramientas y métodos empleados para la construcción del trabajo.

Seguidamente, se presentan los resultados obtenidos de cada estrategia, columnas convencionales en serie y DWC, tanto en cuestiones de producción – caudales de composición y optimización del sistema – como a nivel de empresa – consumo energético y costes asociados –.

Por último, se realiza una comparación de resultados, donde se observan las ventajas y desventajas de cada una de las configuraciones y se establece cuál de ellas resulta más eficiente, desde un puesto energético y económico y, por último, pero no menos importante, sostenible medioambientalmente. Este último tema se considera de especial relevancia a raíz de los resultados de consumos obtenidos.

El campo de estudio de las columnas DWC no es, en absoluto, una línea de estudio finalizada. Nada más lejos de la realidad, puesto que se están realizando avances muy importantes que dan lugar a un sinfín de nuevas aplicaciones. Lo que aquí se pretende poner de relevancia es la demostración de que esta alternativa, de relativa particular implantación en el panorama técnico internacional, resulta ser tremendamente prometedora de cara a la reducción del impacto ambiental que generan aquellos procesos de producción, actualmente, de primera necesidad. En años próximos, se espera que esta tecnología tenga cada vez más relevancia en todos aquellos procesos en que, técnicamente, es muy ventajosa y sea explotada en aras de construir un futuro más comprometido con el medio ambiente.

Códigos UNESCO:

- 330303 Procesos Químicos
- 330304 Separación Química
- 331003 Procesos Industriales
- 332111 Productos derivados del Petróleo
- 331603 Equipo de destilación
- 332807 Destilación y Condensación

Palabras Clave:

Destilación, splitter, nafta, Dividing Wall Columns, DWC, eficiencia energética, ahorro económico.

Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (UPM)

Índice

1.	Introducción.	1
2.	La destilación. Columnas de destilación	5
	2.1 Balances de materia y energía. Conceptos de la medida de la separación	7
	2.2 Desarrollo de la destilación. Destilación avanzada. Disposición de columnas e	n
	serie	16
	2.3 Columnas con tabique separador interno (DWC)	20
3.	Herramientas y tecnologías. Modelización del caso	25
	3.1 Herramienta para la simulación. Aspen Plus V10	25
	3.2 Modelo de diseño. Ecuaciones de estado	25
	Formulación de la ecuación	26
	Comparación de los resultados	28
	Conclusiones	29
	3.3 Herramientas para el análisis económico	29
4.	Aplicación: estudio comparativo del proceso de columnas en serie frente	al
proceso con DWC para una separación de naftas.		
	4.1 Datos de partida. Composición de la alimentación y especificaciones a la	
	salida	33
	4.2 Simulación con la conformación en serie de dos columnas de destilación.	
	Explicación del desarrollo de la simulación. Resultados de la simulación	38
	4.2.1 Resultados. Caudales y consumo energético.	54
	4.3 Simulación en columna con tabique separador (DWC). Explicación del	
	desarrollo de la simulación. Resultados de la simulación	33
	4.3.1 Resultados. Caudales y consumo energético	74
5.	Comparación de resultados y conclusiones. Impacto medioambiental 8	31

	Comparación de los resultados de la simulación81	
	Comparación del análisis de robustez83	
	Comparación de costes	
6.	Aportaciones del proyecto y líneas futuras	
7.	Planificación temporal y presupuesto	
8.	Bibliografía	
Anexos		
	Anexo I. Tipos de re-hervidor. Diferencias entre Kettle y Termosifón	
	Anexo II. Explicación de la regla de la palanca. Cálculo de la fracción /aporizada y fracción líquida de una mezcla9	
	Anexo III. Proceso de obtención de input para RADFRAC	
	Anexo IV. Resultados del análisis de sensibilidad en serie	
	Anexo V. Resultados del análisis de sensibilidad en DWC	
Anexo VI. Resultados del análisis de sensibilidad para el estudio de la		
I	obustez	
	Datos del análisis de la influencia de la temperatura de alimentación a la composición de los caudales de salida	

1. Introducción.

El tratamiento del petróleo, o crudo, es uno de los procesos fundamentales dentro de la industria química. Tanto si se trabaja con los productos derivados de primera generación (Metano, Etano, Propano, Benceno, Tolueno, etc.) como si el objetivo es tratar productos derivados de segunda generación (polímeros, amoníaco, metanol, etc.), el origen de todas estas sustancias, al menos en gran parte, se encuentra en el petróleo.

Lo que generalmente se entiende como crudo, sin embargo, no es una única sustancia, sino que es la mezcla de muchas moléculas carbonadas, de distintas longitudes, disposiciones y características. El crudo ofrece la posibilidad de separarse en fracciones. Cada fracción es el porcentaje de hidrocarburos que presentan una temperatura de ebullición similar y que es posible separar del resto del crudo cuando se lleva a esa temperatura. De la misma manera es posible separar la nafta, que es la mezcla de componentes ligeros del petróleo. Sin embargo, puesto que esta mezcla es característica y dependiente de su procedencia, cada refinería posee su propia caracterización de los cortes obtenidos tras la destilación. En otras palabras, cada refinería trabaja con unos intervalos de temperaturas distintos, en función de la alimentación de crudo que emplean como materia prima.

La nafta es uno de los productos extraídos por la parte superior de la columna, que se conoce como "cabeza", junto con hidrocarburos ligeros. Estos hidrocarburos ligeros son cadenas de carbonadas de uno, dos carbonos o hasta cuatro - en adelante C1, C2, C4 -, formando parte del 70% del producto total que se puede obtener a partir del crudo. La nafta, en particular, suele contener cadenas de hidrocarburos desde C5 hasta C15.

Dentro de la mezcla que conforma la nafta, es posible subdividir los componentes de esta, a priori, en dos grandes grupos: la nafta ligera y la nafta pesada.

Se denomina "nafta ligera" al conjunto de cadenas carbonadas que presentan entre 5 y 6 carbonos, mientras que la "nafta pesada" se compone de cadenas desde los 7 hasta los 15 carbonos. La variedad de productos obtenidos es bastante extensa, dependiendo del tipo de nafta al que pertenezcan: desde disolventes y productos para la industria química fina (nafta ligera) hasta combustible para tractores (nafta pesada).

De manera resumida, el proceso de separación de naftas es el siguiente:

• En primer lugar, los productos de cabeza, tanto hidrocarburos ligeros como la nafta, se llevan a una primera destilación, donde se separan por cabeza los primeros. Estos salen en estado gaseoso, mientras que el resto de la nafta sale en estado líquido por el fondo de la columna. Esta primera unidad se conoce como unidad de ligeros - también como estabilizadora de nafta-.

Los gases ligeros se llevan a una extracción del azufre, en unidades de desulfuración y posteriormente se separan de nuevo en la desetanizadora. Las cadenas de uno o dos carbonos, si no tienen interés comercial, se llevan a combustión en antorcha. Las cadenas de tres y cuatro carbonos suelen tener propósitos comerciales e industriales - productos de la familia del propano y butano-.

• Por otro lado, la nafta separada en la primera destilación se lleva a las unidades de Splitter. Estas unidades suelen estar formadas por un grupo de torres de destilación dispuestas en serie, en las que se van separando, torre a torre, todos los productos que conforman la nafta. El número de columnas necesarias dependerá de las especificaciones de pureza que se requieran en los productos y de la viabilidad que presente construir una única columna. En otras palabras, cuanto más estrictos sean los requisitos del producto de salida, de mayor tamaño – diámetro y altura – será la columna requerida. Por lo tanto, es posible que, por cuestiones de logística, construcción o transporte, resulte más viable realizar la separación en dos columnas.

En la Figura 1.1 y la Figura 1.2 se puede observar con claridad el bloque de Splitter para la nafta.



Figura 1.1. Esquema de tratamiento de la fracción ligera. Representación del Splitter de nafta.

En este trabajo se ha simulado el Splitter de nafta como dos columnas en serie, cuya disposición se detallará y justificará más adelante. Generalmente, la disposición en serie es la que se emplea de manera tradicional, añadiendo la segunda columna en serie con la primera dependiendo de los cortes y el fraccionamiento que convenga.

El estudio de nuevas formas de separación presenta como principal objetivo el ahorro en costes fijos y en costes energéticos, han adquirido cada vez una mayor importancia en el mundo de la industria química. Fue a partir de los años 70, con la llegada de la primera Gran Crisis Energética, cuando los esfuerzos por ahorrar energía se intensificaron. Durante más de 30 años, las columnas de pared divisoria han sido implementadas en procesos de la industria química. Desde entonces, el objetivo marcado ha sido - y es - mejorar continuamente su tecnología en aras de reducir el coste energético. Principalmente, se ven aplicadas a la separación de fluidos, donde los procesos convencionales presentan un altísimo rendimiento, pero, al mismo tiempo, consumen enormes cantidades de energía. Por esta razón, las columnas DWC – Dividing Wall Column o Columnas de Tabique Separador (o Pared Divisoria) – han resultado ser una interesante posibilidad para responder a los desafíos energéticos y tecnológicos que presentan este tipo de separaciones. Su planteamiento, como se explicará más adelante, está basado en el acoplamiento de las corrientes térmicas. En otras palabras, se pretende aprovechar los consumos caloríficos que, generalmente, producirían pérdidas energéticas, para abastecer a la columna contigua, ahorrando así un equipo de condensación y otro de ebullición.

Es este, por tanto, el motivo de la realización del presente trabajo de fin de grado; cuyo objetivo principal es estudiar y comparar el rendimiento del Splitter de nafta convencional – mediante la separación de la mezcla con dos columnas en serie -, con el mismo estudio para una columna DWC. Habiendo conseguido cumplir correctamente con las especificaciones dadas para las corrientes de salida, se compararán sus respectivos consumos energéticos y el coste que ambas suponen.

Con este estudio, se pretende demostrar el ahorro económico y energético que ofrecen las columnas DWC y se demostrará que la instalación de estas columnas en los procesos de separación de la nafta puede traducirse en un impacto positivo tanto a nivel industrial como a nivel medioambiental.

2. La destilación. Columnas de destilación.

De manera aproximada, una planta química puede considerarse como una instalación en la que se convierten un conjunto de materias primas determinadas en unos productos que presentan características con cierto interés industrial y, por tanto, social. Esto ocurre a través de una o un grupo de reacciones químicas. Sin embargo, todos los procesos que ocurren tanto antes como después del paso del reactor son procesos de mezcla, separación y/o cambio de temperaturas, con el fin de acondicionar las corrientes.

Dentro de las operaciones destinadas a la separación [3], podemos distinguir las separaciones *mecánicas*, cuyo funcionamiento se basa en la existencia de heterogeneidades dentro de la mezcla para poder eliminarlas por decantación o filtración, entre otras. Por otro lado, cuando la mezcla a separar presenta un carácter homogéneo, la separación debe plantearse desde el punto de vista del tratamiento de las moléculas que la conforman. Este tipo de separaciones se conocen como *separaciones por transferencia de materia*. En lo relativo a estas últimas, se suelen distinguir dos grupos:

- Los fundamentados en la diferencia de concentraciones en el equilibrio de dos fases.
- Los basados en la diferencia de velocidades de transferencia de la materia.

En el caso de equilibrio de dos fases, se suele diferenciar en dos tipos, según cómo se haya generado la segunda fase. En el caso del tipo de destilación que aquí se va a tratar, para generar la segunda fase se aporta energía para conseguir la separación. A aquel elemento añadido para obtener la mezcla bifásica se le conoce como *agente separador*, pudiendo ser este tanto energético como másico. En el caso de este tipo de destilaciones, el agente separador es energético, como se ha comentado en líneas previas.

Así pues, el equilibrio bifásico que se pretende generar en la destilación tiene como requisito esencial el aporte de un vector energético que impulse a esa separación. Se trata, por tanto, de un proceso de equilibrio con aporte de energía. En la destilación, este equilibrio en el que aparecen una fase líquida y una vapor - en adelante equilibrio líquido - vapor o equilibrio L/V - no se realiza en una etapa única. Al contrario, se precisarán de varias etapas en las que aparezca este equilibrio para conseguir una separación de componentes, basada en la tendencia de una sustancia a pasar de fase líquida a fase vapor. En otras palabras, cada etapa de equilibrio L/V debe tener en cuenta la diferencia de volatilidades de los componentes de la mezcla.

Con el fin de esclarecer el esquema elemental de funcionamiento del proceso de la destilación, se adjunta la Figura 2.1.



Figura 2.1. Representación esquemática de las etapas en equilibrio L/V en una columna de destilación.

Como se puede apreciar en esta figura, la columna de destilación consta de N etapas teóricas, un rehervidor o calderín y un condensador. Tanto en el re-hervidor como en el condensador, estamos considerando que existe una etapa de equilibrio. Sin embargo, podemos encontrarnos con dos situaciones:

- Si se obtiene un producto por cabeza parcialmente condensado, es decir, que exista tanto la fase líquida como la fase vapor, sí se tomará como una etapa más.

- Si el producto, por el contrario, se ha condensado totalmente, solo habría una fase líquida y por tanto no se considerará este como una etapa de equilibrio. Lo mismo ocurre en aquellas columnas en las que no hay condensador y, por lo tanto, destilado y reflujo se encuentran en estado vapor.

Del mismo modo, es posible analizar el caso de los re-hervidores, ya que dependiendo del tipo de equipo que se emplee, se considerará una etapa más de equilibrio o no. De nuevo, se elige siguiendo el mismo criterio empleado para los condensadores:

- Si el producto de fondo es enteramente vapor, como lo que se devuelve a la columna, solo hay una fase y no se considera etapa de equilibrio. Para estos casos, se instala un rehervidor o calderín de termosifón de circulación natural.

- Si, al contrario, se pueden diferenciar dos fases en distinto estado de agregación saliendo del calderín entonces se considerará como una etapa de equilibrio. Este caso suele darse cuando el equipo instalado en esta sección de la columna es tipo Kettle o termosifón de circulación directa. En el Anexo I se explica con más detalle las diferencias existentes entre ambos re-hervidores.

Como se verá en apartados posteriores, el caso que aquí se trata constará de un condensador total, donde la única fase que se obtiene en la corriente de destilado es líquida. En el caso del calderín, se simulará el proceso empleando uno tipo Kettle.

Otro tipo de destilaciones requieren de la adición de materia además de la energía para conseguir la formación de un equilibrio bifásico. Añadir materia se traduce, por lo general, en la adición de la fase distinta para formar el equilibrio y, en definitiva, no deja de ser una adición de energía.

Estas destilaciones son la *extractiva* y la *azeotrópica*. La destilación extractiva requiere del líquido adicional para poder separar, mediante la formación de etapas de equilibrio, mezclas que por el método habitual no sería posible separar. Por otro lado, las destilaciones azeotrópicas necesitan ese aporte de materia, no necesariamente en estado líquido, para facilitar la separación.

2.1 Balances de materia y energía. Conceptos de la medida de la separación.

Para poder medir en qué medida y calificar si una separación es, o va a ser, buena, es necesario considerar los siguientes conceptos y entender sus respectivas igualdades:

2.1.1 Ecuaciones de balance de materia:

Los caudales de entrada y de salida de los procesos deben seguir las leyes de conservación de masa. Estas leyes se pueden resumir en la siguiente afirmación: "la suma de todos los caudales de entrada tiene que ser igual a la suma de todos los caudales de salida".

Sea F el caudal de alimentación, D el caudal de salida de la zona de rectificación (por cabeza) y B el caudal de salida por el calderín, la ecuación del balance de materia para la totalidad de los componentes de cada corriente es:

$$F = D + B$$
 Ecuación 2.1

Si se quisiera expresar esta ecuación con respecto a un componente i determinado, perteneciente a la corriente, es necesario emplear las fracciones molares de ese componente en cada corriente. Se va a considerar que las corrientes salientes, tanto de fondo (B) como de destilado (D) se encuentran en fase líquida. Por lo tanto, en ambos casos, la fracción molar del líquido vendrá expresada por la letra *x*. En definitiva, la fracción molar del componente i para la corriente de destilado y la de fondo, respectivamente, se expresará como: $x_{D i}$ y $x_{B i}$.

En el caso de la alimentación, puesto que el componente i puede entrar como una mezcla de componente líquido y vapor, simplemente se notará como z_i .

Así pues, la Ecuación 2.1, añadiendo los términos anteriormente mencionados, pasará a ser tal y como viene expresada la Ecuación 2.2:

$$F \cdot z_i = D \cdot x_{Di} + B \cdot x_{Bi}$$
 Ecuación 2.2

Para cada etapa se cumple este mismo balance de materia. Los caudales de entrada a la etapa N serán L_{N-1} (líquido que procede de la etapa anterior N-1) y V_{N+1} (vapor que procede de la etapa siguiente N+1). Por el contrario, los caudales de salida de la etapa N serán L_N y V_N . Para presentar con mayor claridad el esquema indicado, se presenta un croquis de este en la Figura 2.2.



Figura 2.2 Etapas en balance de materia.

Por tanto, la ecuación del balance de materia que resulta para la etapa N, para todos los componentes, es el siguiente:

$$L_{N-1} + V_{N+1} = L_N + V_N \qquad \qquad \text{Ecuación 2.3}$$

En esta etapa N, si se quisiera hacer un balance de materia para el componente i, únicamente haría falta añadir las fracciones molares, en fase líquida y vapor respectivamente. Para notar la fracción molar en la fase líquida del componente i, se empleará el símbolo x_i . En el caso de la fracción molar en fase vapor, se notará con y_i . A continuación, en la Ecuación 2.4, se expresa el balance de materia para el componente i en la etapa N:

$$L_{N-1} \cdot x_{i N-1} + V_{N+1} \cdot y_{i N+1} = L_N \cdot x_{i N} + V_N \cdot y_{i N}$$

Ecuación 2.4

Obsérvese que el sumatorio de las fracciones molares para cada componente de la mezcla, tanto de la fase líquida como de la fase vapor, deben ser igual a la unidad.

$$\sum x_i = 1 \qquad \qquad \sum y_i = 1$$

Ecuación 2.4.1.

Para una mezcla multicomponente que se introduce para separar en una torre de destilación de N etapas, las ecuaciones del balance de materia tendrían la misma forma que la Ecuación 2.4 para cada componente en cada una de las etapas. Así pues, para expresar el conjunto de ecuaciones de balance de materia de manera clara, se presenta a continuación una matriz de dimensiones N x m, donde N es el número de etapas que presenta la destilación y m el número de componentes que intervienen en la mezcla. Para mostrar la matriz de manera simplificada, se ha escrito en la Ecuación 2.5 de tal manera que todas las incógnitas aparezcan en el lado izquierdo de la igualdad.

$$[i] = \begin{bmatrix} L_{C_i} & V_{2_i} & -L_{1_i} & -V_{1_i} \\ L_{1_i} & V_{3_i} & -L_{2_i} & -V_{2_i} \\ L_{2_i} & V_{4_i} & -L_{3_i} & -V_{3_i} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ L_{N-1_i} & V_{N+1_i} & -L_{N_i} & -V_{N_i} \end{bmatrix}$$

Ecuación 2.5

Donde en los miembros L_{ab} y V_{ab} , el término *a* se corresponde con la etapa a la que pertenece la corriente en cuestión, líquida en el caso de L y vapor en el caso de V, y *b* atañe al compuesto sobre el cual se realiza el balance de materia.

Finalmente, la matriz (N x m) de la Ecuación 2.6 está formada a partir de *m* submatrices que contienen las *N* ecuaciones de balance de materia para el componente señalado. En cada submatriz, aparecen las incógnitas correspondientes a cada etapa, conformando las ecuaciones del balance de materia para cada componente en particular.

$$(N \ x \ m) = ([i] \ [j] \ [k] \ \dots \ [m])$$

Ecuación 2.6

2.1.2 Ecuaciones de balance de energía:

El concepto en el que se basan las ecuaciones de balance de energía es similar al concepto de las ecuaciones de balance de materia, comentado en el apartado anterior. Para realizar el balance de energía completo de una torre de destilación, hay que considerar cada uno de los equipos que la componen: condensador, calderín y cuerpo de la columna de destilación. En la Figura 2.3 se presenta un esquema de los equipos de la columna con las principales variables que afectan al balance de energía. Aunque la figura se refiere a una destilación binaria, de componentes A y B, las ecuaciones del balance de energía aplicadas en el desarrollo del trabajo no sufren ningún cambio, puesto que no se planteará un balance de energía por componente.



Figura 2.3 Esquema de elementos contribuyentes al balance de energía de una columna de destilación.

Previamente a la explicación de la Figura 2.3, se estudiará el balance de energía para una etapa de la columna. De acuerdo con el Primer Principio de la Termodinámica aplicado a sistemas abiertos, la variación de energía en una etapa de la columna es igual a la diferencia de entalpías entre las corrientes de salida y de entrada más el calor aportado del exterior.

$$FH_F + Q = LH_L + VH_V$$

Ecuación 2.7. Primer Principio de la Termodinámica en sistemas abiertos.

Donde:

- F es el caudal de entrada a la etapa y H_F su entalpía específica.
- Q es el calor (potencia) aportado a la etapa.

- L y V son los caudales de salida de la etapa y H_L y H_V sus respectivas entalpías específicas.

Considerando que la cada etapa es un equilibrio flash, entonces naturalmente L y V son los caudales de líquido y vapor que salen de dicho equilibrio flash.

En una columna de destilación, que es un sistema multietapa, los caudales de entrada y salida de las distintas etapas están interconectados. Para una etapa j de la columna, las corrientes de entrada y salida pueden verse en la Figura 2.4. Esta figura considera un caso general en el que pudiera haber aportación de calor y alimentaciones o extracciones laterales.



Figura 2.4 Modelo para una etapa de equilibrio.

En consecuencia, el balance de energía quedaría:

$$L_{j-1}H_{j-1,L} + V_{j+1}H_{j+1,V} + F_jH_{j,F} + Q_j - (L_j + S_{j,L})H_{j,L} - (V_j + S_{j,V})H_{j,V} = 0$$

Ecuación 2.8. Balance de energía para una etapa de una columna.

Para obtener el balance de energía global de la columna, tan solo habría que sumar los balances de energía de cada etapa. Este balance global, puede simplificarse sabiendo que normalmente solo existe una alimentación a la columna, así como dos aportaciones de calor, en la primera etapa debida al condensador y en la última debida al re-hervidor. El balance global sería, por tanto:

 $FH_F + Q_r = Q_c + DH_D + BH_B$ Ecuación 2.9. Balance de energía global de una columna.

2.1.3 Diagramas Txy y Pxy

Los diagramas Txy y Pxy [3] son herramientas de análisis binario que se emplean para el estudio de la capacidad de separación de dos componentes que pertenecen a una misma mezcla. En estos diagramas se representa, en el eje de abscisas, la fracción molar de uno de los componentes en fase líquida y vapor y, en el eje de ordenadas, se representa bien a temperatura en el caso de los Txy, o bien la presión para los diagramas Pxy.

Como consecuencia del doble carácter que presenta el eje de abscisas, aparecen dos curvas en la gráfica, que nacen en el punto de composición 0 para ambas fracciones y mueren en el punto de composición 1. Según el diagrama, las curvas que aparecen presentan un significado u otro. Ambos se explican a continuación:

- Diagramas Txy:

La curva inferior representa la composición del líquido saturado para la mezcla de los dos componentes, con respecto a uno de ellos. Los puntos que conforman esta curva se conocen como puntos de burbuja, los cuales reflejan el límite a partir del cual comienza a formarse la fase vapor dentro de la mezcla líquida.

Cuando el punto de mezcla sobre el que se trabaja se encuentra en esta línea, quiere decirse que, a la temperatura correspondiente del eje de ordenadas, la mezcla es prácticamente líquida y que presenta una composición de x_i para el componente i y de $x_j = (1 - x_i)$ para el componente j. El área de la gráfica que se sitúa por encima de esta curva es la zona de líquido subenfriado, donde la mezcla es enteramente líquida, sin indicios de aparición de la fase vapor.

La curva superior, representa la línea de vapor saturado, para la mezcla de ambos componentes, con respecto al mismo de la curva anterior. Los puntos que conforman esta curva se conocen como puntos de rocío, los cuales reflejan el límite a partir del cual comienza a formarse la fase líquida dentro de la mezcla en estado vapor. En este caso, si el punto de mezcla del caso que se trata se encuentra sobre dicha línea, quiere decir que toda la mezcla, en su mayoría, se encuentra en fase vapor y que presenta una composición de y_i para el componente i y de y_j = $(1 - y_i)$ para el componente j.

Si el punto de mezcla se encontrara en el área de la gráfica que se contiene entre ambas curvas, se entenderá que la mezcla binaria de estos componentes se encuentra a su vez en fase líquida y vapor. El área que se encuentra por debajo de esta línea se conoce como la zona de vapor sobrecalentado. En esta zona, la mezcla se presenta únicamente en fase vapor, con una fracción líquida nula.

La fracción de vapor (o de líquido) presente en dicha mezcla se podrá calcular aplicando la regla de la palanca. La explicación de esta regla se explica en el Anexo II.

Estos diagramas se trazan a una presión constante, por lo que, para diferentes presiones, se deberán trazar distintos diagramas Txy.

- Diagramas Pxy:

Por el contrario, las curvas explicadas para el caso anterior se invierten en los diagramas Pxy. Por tanto, la curva superior representa la línea de líquido saturado mientras que la inferior se trata de la curva de vapor saturado. El resto de los comentarios descritos en el caso de los diagramas Txy se aplica de la misma forma para los diagramas Pxy.

De nuevo, análogamente al caso anterior, para trazar estos diagramas, se debe fijar una temperatura constante, por lo que, para diferentes temperaturas, se deberán trazar distintos diagramas Pxy.

A continuación, en las Figuras 2.5 y 2.6 se presentan dos ejemplos de diagramas Txy y Pxy, respectivamente. En ellas, se señalan las zonas comentadas anteriormente, así como el significado de cada una de las curvas.



Figura 2.5. Diagrama Txy.



Figura 2.6. Diagrama Pxy.

Es importante destacar que la cercanía o lejanía que presenten estas curvas entre sí, resulta ser un indicador altamente fiable a la hora de deducir la sencillez o dificultad que presenta la separación. Cuanto más cercanas sean las curvas de líquido saturado y vapor saturado, mayor número de etapas de coserá necesario trazar para separar ambos componentes – método de McCabe -Thiele (1936) – y, por lo tanto, más compleja será la separación.

2.1.4 Rendimiento de la separación:

Se entiende como la relación entre la cantidad obtenida de un componente en un producto frente a la cantidad del mismo componente presente en la alimentación.

$$\rho_i(\%) = \frac{F_{I,i}}{F_{A,i}} \cdot 100$$
 Ecuación 2.10

2.1.5 Eficiencia del plato:

La mayoría de los simuladores comerciales, como el que se ha empleado en este trabajo, emplean el modelo del plato de equilibrio [4]. Aunque se trata de un modelo bastante reducido, en la literatura es considerado como "riguroso". Sus ventajas son la posibilidad de predicción para mezclas de cualquier tipo y la estabilidad en el cálculo. Las suposiciones que realiza este modelo son:

- En el contacto líquido – vapor se alcanza el equilibrio.

- El líquido del plato está completamente mezclado y no es compresible, por lo que no existen gradientes de concentración radiales en la columna.

- El vapor no arrastra líquido hacia el plato superior. Esto debe cumplirse siempre y cuando la columna trabaja en el margen de operación que no contempla un arrastre excesivo.

- Todas las fases se encuentran en equilibrio mecánico, por lo que no hay diferencias radiales de presión en un plato.

- El vapor tiene una concentración uniforme al entrar líquido del plato superior o lo que es lo mismo, no hay gradientes de concentración radiales en el vapor, considerado incompresible.

Este modelo permite calcular de manera teórica las columnas mediante balances de materia y cálculo de equilibrio.

El enriquecimiento del vapor en un plato real, sin embargo, siempre va a ser menor que el mismo en uno teórico, puesto que se necesitaría una superficie de intercambio infinita o bien un tiempo de contacto entre líquido y vapor infinito. Para aproximar este modelo a los casos reales, se hace uso del concepto de eficiencia, definida de la siguiente manera.

$$E_{O} = \frac{N^{\circ} \ etapas \ teóricas}{N^{\circ} \ platos \ reales} \ x \ 100$$

Ecuación 2.11. Definición matemática de eficiencia del plato.

La eficiencia es una función compleja, relacionada con la geometría del plato., las propiedades de los fluidos y el flujo de estos. A veces, algunos efectos que pueden influir sobre la separación son la turbulencia en la interfase por la aparición de zonas inestables o el cambio de estabilidad que aparece cuando las láminas de líquido aumentan su espesor.

El procedimiento experimental consiste en tomar muestras de las zonas de rectificación y agotamiento, y comparar las etapas teóricas calculadas a partir de estas muestras con el número de platos de la columna. Si las muestras se toman de la zona central de la columna, lo que se calculan son las eficacias locales o de *Murphree*. Normalmente, esta determinación se debe realizar a reflujo total, para evitar desvíos y variaciones en la operación. En consecuencia, la eficacia calculada puede tener un valor muy distinto de la de las condiciones de trabajo reales puesto que en ellas puede trabajarse con otro reflujo.

El método más sencillo y utilizado para estimar el comportamiento real de la separación en un plato es el del uso de eficiencias de plato calculadas en base a correlaciones. Estas correlaciones se utilizan, generalmente, en columnas de separación de hidrocarburos. Una correlación bastante conocida, que es la que se va a emplear en este trabajo, es la de Drickamer y Bradford (1943), que relaciona la eficiencia con la viscosidad promedia del líquido de la alimentación, según:

$$E_{O} = 0,17 - 0,616 \log_{10} \sum_{i=1}^{M} \left[x_{i,f} \left(\frac{\mu_{L_{i}}}{\mu_{W_{273}}} \right) \right]$$

Ecuación 2.12 Correlación de Drickamer y Bradford para el cálculo de la eficiencia del plato. Con las variables:

 $x_{i,f}$ como la fracción molar del componente en la alimentación.

 $\mu_{i,l}$ como la viscosidad dinámica del componente, en cP.

 μ_W como la viscosidad dinámica del agua a 293 K.

Esta correlación solo contempla el estado líquido en el punto de entrada a la columna y ofrece resultados muy aproximados.

El valor de la eficiencia calculado para la alimentación empleada en este trabajo es de 64,61%

2.2 Desarrollo de la destilación. Destilación avanzada. Disposición de columnas en serie.

Hasta donde recoge la memoria científica, el proceso de destilación fue desarrollado por los alquimistas egipcios, los cuales emplearon gran cantidad de aparatos diseñados para vaporizar sustancias volátiles y tratar con ellas los metales. Sin embargo, un procedimiento similar a la destilación en líquidos se realizaba ocasionalmente. El más común era el calentamiento del agua del mar en calderos cubiertos, donde se sacudían las gotas condensadas en las tapas con el fin de obtener agua apta para el consumo humano. El aparato que empleaban para realizar estas destilaciones primitivas – evaporaciones – se conoce hoy como alambique – denominado por los egipcios como "*ambix*" y, más tarde, por los árabes como "*al anbiq*" - [5].

No fue, sin embargo, hasta el desarrollo científico de la civilización árabe cuando se comenzó a emplear la destilación para obtener componentes volátiles como el alcohol. Mientras que esta civilización empleaba principalmente el alcohol destilado para generar perfumes y esencias olorosas, en la Europa medieval causó un gran impacto en su faceta más ociosa. Fue en el siglo XIV cuando se introdujo la práctica de añadir un serpentín condensador, predecesor del circuito refrigerante moderno. Con esta mejora, el alcohol comenzó a ser una sustancia bien conocida en forma de vino. Sin embargo, la medicina medieval también sufrió cambios con la llegada de la destilación, puesto que fue posible desarrollar nuevos medicamentos gracias a las mezclas con base alcohólica. Con la llegada de la Primera Revolución Industrial, se amplió el abanico de aplicaciones de la destilación. Se descubrió que el carbón desprendía un gas inflamable al ser calentado y no tardó en aprovecharse como gas de alumbrado. A partir de entonces, los subproductos de la industria del gas adquirieron gran importancia, para lo cual se hubo de impulsar el desarrollo y mejora de la destilación. En 1800, los investigadores franceses ya habían diseñado y ensayado con columnas de destilación. Sufrieron un notable impulso con el desarrollo de la columna de rectificación en 1813, por Cellter Blumenthal. En 1822, Perrier inventó las campanas de burbujeo y desarrolló el alambique continuo, con zona de precalentamiento en la alimentación y empleo de una corriente de reflujo interno. Por otro lado, Adam y Bérad diseñaron columnas de rectificación del alcohol extraído del vino. Blumenthal combinó ambos descubrimientos para fabricar una columna que proporcionaba una corriente de alcohol rectificado a partir de una alimentación continua de vino; desarrollando así el primer proceso de destilación en régimen permanente.

En 1850, las columnas de rectificación ya tenían cabida en la industria del petróleo y del alquitrán de hulla. Entre los años 1860 y 1880, se descubrieron productos químicos potencialmente valiosos como el tolueno o el xileno, derivados del Benceno; mediante la destilación del alquitrán.

A mediados del siglo XX, se descubrió la capacidad de fabricar vidrio transparente capaz de soportar el calentamiento y enfriamiento continuos. Ello significó una enorme ventaja sobre los equipos de metal y cerámica que se venían empleando, debido a que el vidrio presenta gran resistencia química. En el campo de la destilación, se sustituyeron los alambiques y aparecieron los actuales matraces, columnas y condensadores, semejantes a los que se emplean hoy en día. Desde entonces, la destilación ha sido una de las técnicas de separación más empleadas en los laboratorios.

Por otra parte, los equipos empleados en la industria que estaban construidos de acero u otros tipos de metal, recibieron el nombre de columnas de destilación o de rectificación. Estos equipos constaban de un calderín o re-hervidor (donde se generaba vapor), una columna de platos con empaques (en la cual se llevaba a cabo la rectificación al ponerse en contacto vapores en contracorriente con el líquido) y un condensador, donde se devuelve a la columna parte del líquido condensado como reflujo y, el resto de los vapores condensados se extraen como producto destilado.

La alimentación se introduce, por lo general, en el centro de la columna. La parte superior se conoce como la sección de rectificación o enriquecimiento y la pare inferior se conoce como sección de agotamiento.

La industria del refino del petróleo sufrió profundas modificaciones bajo el impacto de la investigación científica. En 1859, el coronel Drake demostró la posibilidad de extraer crudo del subsuelo mediante procesos de perforación, sin necesidad de depender de las fuentes naturales. Hasta 1900, la industria del petróleo se había restringido a la producción del queroseno. Sin embargo, con la puesta en marcha de los métodos más científicos de la destilación, se extendió un catálogo más amplio distinto del queroseno: lubricantes, parafinas, asfalto, aceite combustible y gasolina.

Otros avances convirtieron el refino, originalmente un proceso por lotes, en una producción automática hasta convertirla en una operación continua en recipientes cerrados, evitando escapes peligrosos de las fracciones ligeras.

A nivel de diseño de la hidráulica, el equipo predecesor de las campanas de burbujeo o "cachuchas" fue desarrollado en 1822 por Perrier, a nivel de laboratorio. En 1830, Coffee desarrolló una columna continua que empleaba tanto platos perforados como precalentamiento de la alimentación y reflujo interno.

En cuanto al desarrollo de la modelización matemática de la destilación, fue de la mano de Hausbrand (1893) y de Sorel (1899), quienes presentaron los primeros estudios matemáticos sobre las columnas de fraccionamiento. En el Método de Sorel se desarrollaron y se aplicaron relaciones matemáticas para la separación fraccionada de mezclas binarias e introdujo en sus cálculos los conceptos de entalpía molar, pérdida de calor, composición, reflujo y gastos.

En 1925, E.W. Thiele y W.L. Mc Cabe presentaron una investigación ante la American Chemical Society, en la que mostraban un método nuevo sencillo, ilustrativo y gráfico para el cálculo del número de platos teóricos necesarios en la separación de los componentes de una mezcla binaria en una columna de rectificación. El Método McCabe – Thiele demostró ser un gran progreso cuando pasaron a primer plano los sistemas de craqueo, en 1936. Más tarde, Ponchon y Savartl diseñaron un método para el cálculo de columnas de destilación para mezclas binarias, que no requería las simplificaciones necesarias para Mc Cabe y que podía aplicarse en mezclas no ideales.

Entre los años 1930 y 1960, como se explicará en las columnas DWC, se realizaron estudios para predecir la eficiencia de las columnas de destilación. Más adelante, una vez paliado este problema, la industria se enfocó hacia el desarrollo de columnas de destilación para separar mezclas multicomponente. El diseño de estas resultó ser un impulso muy importante gracias al empleo de programas de simulación y cálculo iterativo a través de medios informatizados – como el empleado para la simulación que se desarrolla en este trabajo – con los que se pudieron implementar ecuaciones de estado para el cálculo del equilibrio líquido – vapor.

A pesar de que la operación unitaria de destilación es la que cuenta con una de las bibliografías más extensas, hoy en día se efectúan numerosos estudios sobre la optimización del recurso energético y la mejora en el rendimiento de la separación.

Como ejemplo de mejora del rendimiento de la separación, el método comúnmente empleado por la industria química para el proceso de Splitter de nafta es la disposición en serie de un número N de columnas de destilación. Con este formato, se pretende purificar las corrientes de salida de cada equipo, colocando según convenga una columna en serie con la anterior.

Dadas unas especificaciones determinadas, se instalan las columnas en serie a la salida del producto por cabeza, del producto de fondo o de ambos, tal y como puede observarse en la Figura 2.7. Cualquiera de estas instalaciones tiene el objetivo de cumplir con la mayor precisión posible con las especificaciones de los cortes deseados.



Figura 2.7. Esquemas de disposición en serie.

En las líneas siguientes, se procede a la explicación de cada caso mostrado en el ejemplo presentado en la Figura 2.7. Sea un sistema ternario, con tres componentes A, B y C:

En la primera disposición de columnas, tras separar el componente más volátil – más ligero por cabeza, puro, se separan los otros dos en la siguiente columna. La alimentación de la segunda columna es el producto de fondo de la primera.

En el segundo ejemplo, se separa en primer lugar el componente más pesado (C), por el fondo, y el producto de cabeza se convierte en la alimentación de la segunda columna, donde se separan el resto de las componentes, más ligeros que el primero.

Finalmente, la tercera combinación de columnas se puede emplear para separar una mezcla sin el componente con mayor volatilidad por fondo y sin el más pesado por cabeza. De la mezcla ternaria inicial, se obtienen dos mezclas binarias, que salen por cabeza (A + B) y por fondo (B + C). A continuación, se introducen en otras dos columnas, respectivamente, y se separan las mezclas dando los tres componentes.

Esta última opción puede resultar la más interesante, desde el punto de vista energético, cuando la proporción del componente de volatilidad intermedia es la más alta. El hecho de que se encuentre en mayor proporción provoca que su separación de los otros componentes presente mayor dificultad y aparezca en el producto de cabeza y de fondo. Este efecto genera una disminución en el rendimiento de la separación.

Siguiendo este razonamiento, es comprensible que la primera disposición se emplee cuando el componente de mayor concentración sea el más volátil y la segunda cuando es el menos volátil – más pesado – el que se tiene en mayor proporción. De esta manera, para el primer caso, será posible extraer el componente A, más volátil y en mayor concentración, evitando que la pureza de otras dos corrientes finales vea afectada su pureza. Igualmente, se explica la segunda disposición.

Tal y como se ha explicado anteriormente, estos procesos pueden resultar convenientes a nivel de rendimiento energético, pero también en cuanto al rendimiento de la separación, puesto que se consigue separar con bastante eficiencia cada uno de los componentes. Incluso tratándose de una mezcla que contiene N componentes, disponiendo las columnas en serie de manera estratégica, se puede conseguir una separación de alto rendimiento.

Sin embargo, es un hecho innegable que la adición de equipos a un proceso supone un aumento del coste, tanto a nivel del coste fijo de instalación como del coste variable del consumo energético. Es, por tanto, que, en la búsqueda de la mejora de la eficiencia de los procesos industriales, varios estudios en el sector han propuesto múltiples alternativas a la adición de columnas. Entre todas ellas, en este documento se ha escogido el modelo de columna con tabique intermedio (DWC). Su funcionamiento, estructura y modelización se explicará en los apartados siguientes.

2.3 Columnas con tabique separador interno (DWC).

La destilación se caracteriza por consumir grandes cantidades de energía para lograr la separación. Sin embargo, antes de los años 70, cuando surgió la primera *Gran Crisis Energética*, pocos estudios sobre la mejora de la eficiencia energética de las columnas de destilación vieron la luz. Uno de los estudios que en su momento se consideró vanguardista fue el realizado por *Petlyuk & Co.* En 1965. De esta investigación, se obtuvieron los resultados

del estudio termodinámico de una columna con acoplamiento térmico total, en otras palabras, columnas cuya principal diferencia era la existencia de un circuito cerrado del caudal calorífico, sin pérdidas [10].

Llegada la Gran Crisis de los Energéticos, en los años 70, el número de estudios sobre la eficiencia se incrementaron. Apareció el trabajo de *Tedder y Rudd* en 1978, quienes presentaron un estudio sobre los consumos energéticos en las secuencias convencionales de destilación y, además, propusieron nuevos esquemas alternativos a los tradicionales de destilación. Uno de los resultados más interesantes de su estudio fue que el ahorro de energía logrado podía ser de hasta un 50% - para la separación de algunas mezclas ternarias – así como del 30% para procesos de separación más complejos.

El diseño de las columnas con acoplamiento térmico, que aparecieron como resultado de todos estos estudios, fueron las columnas Petlyuk. Estos equipos incluían columnas laterales a la principal, conocidas como "columna de acoplamiento térmico". En la Figura 2.8 se puede observar un esquema de las columnas Petlyuk.



Figura 2.8. Ejemplos de columnas con acoplamiento térmico o columnas Petlyuk.

Pese a que las columnas Petlyuk venían siendo sujeto de estudio desde la década de los 60, no fue hasta mediados de los años 80 cuando importantes industrias como *BASF* comenzaron a implementar estos equipos de manera práctica en sus procesos. Este desfase temporal, entre el desarrollo y diseño de las Petlyuk y su materialización en los procesos se debe a que el coste de la energía resultaba suficientemente bajo como para que las empresas se pudieran permitir un nivel de pérdidas determinado. Sin embargo, como se viene comentando, la crisis

energética actuó como agente catalizador para que las empresas se atrevieran a instalarlas [9].

La gran aportación que emergió a raíz de la implementación de la columna Petlyuk en *BASF* fue que únicamente hizo falta instalar una coraza y una pared divisoria entre las columnas. Así, nació lo que se conoce como las columnas DWC (Divided Wall Column), que resultan ser equivalentes a las llamadas Petlyuk. Además de los resultados energéticos favorables respecto de las disposiciones tradicionales de las columnas de destilación, resulta que su implementación ha destapado reducciones importantes en el material de construcción necesario para estas columnas.

Este tipo de columnas suelen emplearse en separaciones complejas donde se requieren fracciones fundamentalmente puras. Además, este sistema muestra una ventaja especial cuando los componentes de la mezcla que presentan interés son los que tienen una volatilidad media e, inevitablemente, salen por cabeza y por fondo empleando una columna de destilación convencional. En estos casos, suele ser necesario emplear más columnas dispuestas en serie – como se explica en la Figura 2.7 c) -. Usando una columna con tabique separador, esta tarea puede desempeñarse con un solo equipo.

La configuración especial que presentan las columnas de pared divisoria no es otra que el posicionamiento de una pared vertical en la parte central del cuerpo de la columna. Este tabique intermedio separa la sección de alimentación a la columna de la sección de vaciado. El tabique separador estanca, a un lado, el gas y al otro el líquido, permitiendo así la separación eficiente a nivel energético de los componentes de baja ebullición de los de alta ebullición. Los primeros se quedan atrapados en la primera parte de la columna, que funciona como pre-fraccionador. La sección de vaciado, a donde entran los componentes de alta ebullición, sirve para separar aquellas especies que presentan una volatilidad más intermedia [10].

En definitiva, podría decirse que los componentes ligeros quedan retenidos en la zona de alimentación o pre-fraccionador y los pesados pasan a la zona de vaciado o fraccionador, donde se separan a su vez los considerados como intermedios de los pesados. De esta manera, no es necesaria la implementación de una segunda columna a continuación de la DWC. Además, tampoco es necesario el empleo de dos equipos de condensación ni evaporación. Finalmente, es importante destacar que, a nivel de instalación, reducen drásticamente los esfuerzos de mantenimiento y control del equipo.

En términos generales, según fuentes de fabricantes [11], es posible reducir tanto la inversión inicial como los costes de explotación entre un 20 - 30 %. Esto se consigue gracias al

acoplamiento de flujos térmicos y los circuitos multi columna que se generan dentro de la propia DWC.

Es importante recalcar que actualmente se conocen columnas DWC que presentan hasta 6 metros de diámetro y hasta 100 metros de altura. Sin embargo, datos que tratan este tema en mayor profundidad se guardan de manera confidencial por parte de las grandes compañías fabricantes e instaladoras de estos equipos, como son BASF y Montz.

En la Figura 2.9 se muestra el esquema de una DWC, ofrecido por la casa Montz de fabricación de estos equipos.



Figura 2.9. Esquema de una Dividing Wall Column, cedido por Montz.

Una vez comentados y detallados los elementos que intervienen en la realización de este trabajo, en el capítulo siguiente, se explicará el soporte y modelo empleados para simular y obtener resultados con la mayor fidelidad posible; que más tarde se analizarán con el objetivo de comparar la eficiencia y rendimiento de ambos casos.
3. Herramientas y tecnologías. Modelización del caso.

3.1 Herramienta para la simulación. Aspen Plus V10.

Para la realización del estudio aquí presente, ha sido necesario el empleo de programa de simulación ampliamente extendido dentro de la industria química: Aspen Plus V10.

Aspen Plus fue diseñado, como prototipo, en los años 70 por el *Instituto Tecnológico de Massachussets, MIT*, bajo el nombre de ASPEN – siglas de "*Advanced System for Process Engineering*" – y fue comercializado en los años 80 por la compañía *Aspen Tech*. Es una herramienta de simulación de procesos químicos que, además de las simulaciones de diagramas de flujo puede realizar estimaciones de propiedades de compuestos, análisis de sensibilidad de variables de proceso, generación de especificaciones de diseño del procesos concreto y análisis y síntesis de procesos químicos, entre otras tareas del diseño de procesos y equipos.

3.2 Modelo de diseño. Ecuaciones de estado.

De entre los paquetes de propiedades que ofrece este programa, donde se recogen las ecuaciones de estado con las que se va a llevar a cabo la simulación, se ha escogido el modelo de Peng-Robinson. A continuación, se explicará el modelo mencionado, el motivo de la elección de este y las ecuaciones de estado que lo rigen.

El desarrollo de nuevas ecuaciones de estado basada en la variación de dos parámetros nació a partir de la modificación del término de la presión de atracción de la ecuación semi-empírica de van der Waals. La ecuación propuesta por Peng-Robinson en 1975 combina la simplicidad de otras ecuaciones de estado con dos parámetros, como Soave – Redlich – Kwong (mencionada como SRK en líneas futuras), con la exactitud similar a la que ofrecen las ecuación de estado multiparamétricas. En especial, los resultados obtenidos con la ecuación de estado del modelo SRK y la ecuación de Peng-Robinson, han demostrado que estos últimos presentan valores más acertados respecto de los empíricos en ciertos casos. A continuación, se comentará el desarrollo de ambas ecuaciones y, finalmente, se realizará una comparación entre los resultados que ofrecen ambas, con la idea de justificar el motivo por el cual se ha empleado Peng – Robinson por encima de SRK [12].

Desde la aparición de la ecuación de van der Waals en 1873, muchos han sido los autores que han propuesto variaciones de la ecuación semi-empírica. Una de las modificaciones más exitosas fue la realizada por Redlich – Soave (RK) en 1949. A partir de entonces, aparecieron numerosas modificaciones sobre esta última ecuación, como las realizadas por Redlich y Dunlop en 1963, las modificaciones de Cheub y Prausnitz en 1967 o las de Wilson en 1970,

entre otras. Algunas de estas modificaciones introdujeron derivadas de primer orden para ajustarlas a los componentes puros mientras que otras mejoraron la capacidad de predicción del equilibrio líquido - vapor.

Una de las últimas revisiones que se realizó sobre la ecuación de estado RK fue propuesta por Soave, en 1972. Esta corrección dio lugar a la ecuación Soave – Redlich – Kwong (SRK). Rápidamente ganó aceptación dentro del estudio de procesos de la industria del hidrocarburo, debido a la relativa simplicidad que presentaba su aplicación, comparada con ecuaciones más complicadas como la ecuación BWRS (presentada por Starling y Powers en 1970 y corregida por Lin en 1972). También mostraba un comportamiento óptimo en la generación de resultados razonables y precisos para el cálculo de intervalos en el equilibrio líquido – vapor.

Sin embargo, tanto la ecuación RK como la SRK presentaban en común algunas deficiencias. Los fallos más evidentes aparecían a la hora de generar valores satisfactorios en el cálculo de las densidades para líquidos; sin embargo, los valores para las densidades de la fase vapor eran aceptables. Puede observarse, en la literatura, que la ecuación SRK predice volúmenes específicos en líquidos obteniendo resultados mayores – y por tanto valores de densidad menores - que los valores obtenidos mediante experimentaciones empíricas. Esta desviación, se observa, aumenta un 7% a temperaturas reducidas y hasta un 27% cuando se acercan al punto crítico. Para moléculas pequeñas, como el nitrógeno gas o el metano, las desviaciones son menores.

Si bien es cierto que no se puede esperar que una ecuación de dos parámetros ofrezca predicciones fiables para todas las propiedades termodinámicas, la demanda de resultados más realistas en la estimación del comportamiento volumétrico de las fases coexistentes para el cálculo del equilibrio líquido – vapor, impulsó la investigación hacia la posibilidad de que una nueva ecuación, tan simplificada como la SRK, ofreciera resultados mejorados en el cálculo de densidades así como en el cálculo de presiones de vapor e intervalos de los equilibrios.

Formulación de la ecuación

Las ecuaciones de estado semi-empíricas [14] [15] generalmente expresan la presión P como la suma de dos términos, la presión de repulsión P_R y la presión de atracción P_A :

$$P = P_R + P_A$$

Ecuación 3.1. Expresión de la presión en ecuaciones semi-empíricas.

En las ecuaciones de van der Waals (1873), Redlich y Kwong (1949) y Soave (1972) la presión repulsiva viene expresada por la siguiente ecuación:

$$P_R = \frac{RT}{\nu - b}$$

Ecuación 3.2. Ecuación para la presión repulsiva.

La presión de atracción, en las ecuaciones mencionadas, aparece de la siguiente manera:

$$P_A = -\frac{a}{g(v)}$$

Donde:

g(v) es una función del volumen molar

b es una constante de van der Waals, independiente de la temperatura.

a está relacionada con la medida de las fuerzas intermoleculares, constante únicamente en la ecuación de Van der Waals.

Aplicando la Ecuación 3.1 sobre el punto crítico, la primera y la segunda derivada de la presión respecto del volumen quedan anuladas, obteniendo así los valores de b y de a para las propiedades críticas.

Un estudio semi-empírico de las ecuaciones con la misma forma que la Ecuación 3.4 indica que eligiendo una función determinada para g(v), el valor de la compresibilidad crítica puede calcularse de manera más realista. La aplicación de esta ecuación a presiones muy altas viene afectada por la magnitud $\frac{b}{v_c}$, donde v_c es el valor predicho del volumen crítico. Además, comparando la ecuación RK original y la ecuación SRK, era evidente que los resultados se acercaban con suficiencia a la realidad.

Sin embargo, en aras de mejora de estos resultados, Ding-Yu Peng y Donald B. Robinson, en 1975, propusieron la siguiente ecuación:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v(v+b) + b(v-b)}$$

Ecuación 3.4. Ecuación de estado de Peng - Robinson.

Donde:

$$b = \sum_{i} x_i b_i$$
 Ecuación 3.5

$$a = a_0 + a_1$$
 Ecuación 3.6

$$a_0 = \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$$
 Ecuación 3.7

El término mixto estándar, en el que k_{ij} es dependiente de la temperatura, como se puede ver en la Ecuación 3.8

$$k_{ij} = k_{ij}^{(1)} + k_{ij}^{(2)} \cdot T + \frac{k_{ij}^{(3)}}{T}$$

Ecuación 3.8

$$k_{ij} = k_{ji}$$

Ecuación 3.9

$$a_1 = \sum_{i=1}^n x_i \left(\sum_{j=1}^n x_j \left((a_i a_j)^{\frac{1}{2}} l_{ij} \right)^{\frac{1}{3}} \right)^3$$

Ecuación 3.10

Es un término adicional y asimétrico empleado para modelar ecuaciones altamente no lineales.

$$\begin{split} l_{ij} &= l_{ij}{}^{(1)} + l_{ij}{}^{(2)} \cdot T + \frac{l_{ij}{}^{(3)}}{T} & \text{Ecuación 3.11} \\ l_{ij} &\neq l_{ji} & \text{Ecuación 3.12} \\ a_i &= fcn(T, T_{ci}, p_{ci}, \omega_i) & \text{Ecuación 3.13} \\ b_i &= fcn(T_{ci}, p_{ci},) & \text{Ecuación 3.14} \end{split}$$

Las conclusiones obtenidas como consecuencia de las comparaciones entre los resultados ofrecidos por la ecuación de estado de SRK y la de Peng – Robinson se comentan en el siguiente epígrafe.

Comparación de los resultados

I) Sustancias puras

Para el cálculo de las presiones de vapor, tanto la ecuación de SRK y la de Peng – Robinson han sido diseñadas con vistas a reproducir de manera precisa las presiones de vapor de sustancias puras no polares. Sin embargo, Peng – Robinson ofrecía una mayor concordancia entre la presión de vapor calculada y los valores experimentales.

Con respecto a las densidades, las de los líquidos saturados calculadas mediante el método SRK son más bajas que las que se pueden observar en la literatura sobre el tema; salvo para moléculas pequeñas a muy bajas temperaturas, en las que se observa un ligero crecimiento. En la región cercana al punto crítico, se obtuvieron mejores resultados con la ecuación de Peng – Robinson. Esta mejora se observa con mayor evidencia en moléculas grandes, pese a que en las de corta longitud también se puede apreciar.

II) Mezclas

La principal ventaja se pudo observar en los cálculos para el equilibrio líquido – vapor. Si bien es cierto que el empleo de ecuaciones de estado con dos parámetros evita un proceso tedioso de iteración, obligatorio en las ecuaciones multiparamétricas – como la ecuación BWRS -, la ecuación SRK no ofrecía resultados realistas para el cálculo del coeficiente de interacción entre componentes. Sin embargo, la Ecuación 3.4 ofreció resultados más coordinados entre los datos calculados y los obtenidos experimentalmente a la presión del punto de burbuja.

Conclusiones

Mediante la modificación del término de la presión de atracción en la ecuación semi-empírica de van der Waals se generó una nueva ecuación de estado. La ecuación de Peng – Robinson se usa para predecir con mayor fiabilidad las presiones de vapor de sustancias puras e intervalos en los valores de equilibrio para las mezclas. Además, esta ecuación también consigue mejores valores para la densidad de los líquidos. En campos donde los cálculos ingenieriles suelen ser importantes, la Ecuación 3.4 genera mayor consenso entre las predicciones y los valores experimentales.

Pese a que las ecuaciones de dos parámetros presentan limitaciones inherentes a ellas, la obtenida a raíz del estudio de Peng y Robinson no es una excepción, aunque resulta ventajosa por el compromiso que presenta entre simplicidad y precisión.

En definitiva, en el desarrollo de este trabajo se ha hecho aplicación del modelo diseñado por Peng y Robinson, por ser el más adecuado cuando se tratan hidrocarburos, por su simplicidad, al ser un modelo de dos parámetros, pero también por la precisión en la predicción de las variables termodinámicas, especialmente en las densidades de los líquidos y en los intervalos de valores para el equilibrio líquido - vapor.

Es importante recalcar que el equilibrio líquido - vapor es uno de los pilares sobre los que se sostiene toda la teoría de la destilación, ya que aparece en cada etapa. Obtener resultados realistas y poco desviados con respecto de los valores empíricos resulta fundamental para el correcto estudio de las DWC y su comparación con la disposición tradicional en serie.

3.3 Herramientas para el análisis económico.

Otro de los aspectos importantes que cabe comentar, por su gran importancia dentro de este trabajo, es el análisis financiero. Este análisis se realizará a través de una herramienta que

ofrece el simulador Aspen Plus, la aplicación *Aspen Economics*. Se desarrolló en el simulador Aspen con el objetivo de estimar los costes de la operación diseñada, tanto desde el punto de vista operacional como de inversión inicial. En definitiva, emplea los conceptos de CAPEX y OPEX. [16]

En todo proyecto, uno de los objetivos principales es la maximización de los beneficios y la optimización de los recursos empleados – tanto materiales como energéticos – para poder diseñar procesos eficientes y rentables. Por tanto, puede decirse que es muy importante tener en cuenta los costes que influyen en el ciclo de vida del proyecto, tanto desde la perspectiva de las inversiones y adquisiciones, como desde la perspectiva de los gastos operativos, conocido habitualmente en industria como *utilities*. Para analizar estos costes, se introducen los dos términos mencionados en el párrafo anterior: CAPEX y OPEX. Existe un tercer término, consagrado por los expertos en análisis económico, que consiste en la suma de los dos anteriores: TOTEX. Sin embargo, para el análisis que aquí se realiza, solo se hablará de ambos términos por separado.

CAPEX es la abreviatura, en términos anglosajones, de "*Capital Expenditure* ", lo que se conoce en nuestra lengua como Inversiones de Capital. Este término se refiere a las inversiones realizadas en adquisiciones o mejoras de los activos físicos.

Por tanto, se puede entender que el CAPEX se define como el conjunto de inversiones que se realizan en los diferentes equipos e instalaciones con el fin de generar un beneficio de producción. Además, el CAPEX también incluye lo que se conoce como *soft cost*. Este término engloba todos los costes relacionados con la ingeniería que se encarga del proyecto, el diseño, la dirección de obra, el visado de los proyectos, su legalización... En apartados futuros se expondrá este valor como *Total Capital Cost*, y será el resultado de la suma del coste del equipamientos más instalación más el *soft cost*. Los dos primeros conceptos vendrán desglosados, mientras que el *soft cost* se ha añadido directamente en el total como una estimación, debido a su carácter variante.

A la hora de estudiar la realización de un proyecto – como podría ser el estudio de la implementación de una columna DWC – deben considerarse las inversiones en equipamiento para poder realizar un presupuesto de la inversión inicial correctamente. Estas inversiones deben distinguirse de las realizadas en aras del mantenimiento de estos equipos y de su provisión de consumibles. A este conjunto de gastos es a lo que se conoce como OPEX. OPEX es, de nuevo, una palabra acuñada por la terminología anglosajona, cuyas siglas vienen a significar "*Operational Expenditure*" o bien, en nuestro idioma, Gastos Operacionales. Como sea comentado anteriormente, se definen como los costes asociados al mantenimiento de los equipos, incluyendo tanto los gastos de consumibles y otros gastos para llevar a cabo

la actividad – *utilities* –. En el análisis económico que ha realizado el simulador este valor aparece como *Total Operating Cost*, y es la suma del valor de las *utilities* necesarias más la mano de obra (operarios, obreros, etc.). De nuevo, mientras que el valor de las *utilities* aparecerá desglosado, el de la mano de obra se aplica en el valor total del *Total Operating Cost* a modo de estimación.

En definitiva, el estudio económico se va a realizar, por un lado, desde la perspectiva de los costes de adquisición para ambos casos y, por otro, desde el punto de vista de lo que supone alimentar, en términos energéticos, una configuración u otra.

En este epígrafe se ha explicado el programa de simulación que se ha empleado para el desarrollo de este trabajo, la ecuación de estado en el que se ha basado dicho programa para el cálculo de propiedades y los parámetros económicos que se van a emplear para el análisis. A continuación, en el capítulo 4, se mostrará el caso al que se ha aplicado lo comentado en los apartados 2 y 3 y los resultados de la simulación.

En los apartados anteriores se ha comentado el origen y las bases sobre las que se apoya el desarrollo de este trabajo. Se ha explicado en profundidad la naturaleza del modelo que comprende las ecuaciones de estado que se van a seguir en la simulación. También se ha explicado la herramienta con la que se va a simular.

A continuación, se presenta la aplicación de todos estos conceptos comentados al caso que concierne a este trabajo. Se va a tratar la modelización de una unidad de Splitter de nafta desde dos estrategias distintas: la primera de manera tradicional, añadiendo columnas de destilación en serie con el objetivo de obtener las especificaciones mediante la adición de unidades que separen y purifiquen las corrientes salientes; la segunda simulación se realizará sustituyendo el método tradicional por una columna DWC.

Una vez obtenidos los resultados referentes al rendimiento de la separación y al consumo energético total y expuestos en este trabajo, se procederá a la comparación de ambos casos, analizando las mejoras o deficiencias que presenta cada uno de ellos. Además, a raíz de los resultados que proporcionen los análisis de sensibilidad, se estudiará cuál de los dos esquemas es el más robusto ante perturbaciones en la alimentación

Finalmente, se expondrán los resultados del análisis económico, teniendo en cuenta los índices que se han comentado anteriormente en el apartado 3.3 de "*Herramientas para el análisis económico*."

4.1 Datos de partida. Composición de la alimentación y especificaciones a la salida.

Para realizar la simulación, se ha empleado una corriente de alimentación cuya composición es característica de la nafta que se extrae de la zona de rectificación de las columnas de destilación atmosférica. Esta alimentación se encuentra a 1 bar de presión y a 25°C. La corriente de alimentación, en total, lleva un caudal molar de 3738,7 kmol/h. El equivalente a esta corriente en unidades de caudal másico es de 338.590,26 kg/h.

La composición de la corriente de alimentación se ha establecido como una composición típica de nafta, obtenida de los condensados de los pozos de gas natural de la zona del Golfo Pérsico. Esta alimentación se presenta tanto en base molar (kmol/h) como en base másica (kg/h) viene recogida en la Tabla 4.1.

Nombre del componente	Caudales molares	Caudales másicos
ISOBUTANE	3,03	176,11
N-BUTANE	81,93	4762,05
2,2-DIMETHYL-PROPANE	5,33	384,56
2-METHYL-BUTANE	480,88	34695,63
N-PENTANE	380,21	27432,26
CYCLOPENTANE	24,9	1746,35
2,2-DIMETHYL-BUTANE	21,08	1816,61
2,3-DIMETHYL-BUTANE	35,24	3036,88
2-METHYL-PENTANE	194,02	16720,09
3-METHYL-PENTANE	119,89	10331,78
N-HEXANE	275,02	23700,44
METHYLCYCLOPENTANE	106,58	8969,91
CYCLOHEXANE	95,39	8028,14
BENZENE	167,13	13055,13
2,2-DIMETHYLPENTANE	10,1	1012,06
2,4-DIMETHYLPENTANE	15,66	1569,20
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	3,48	348,71
3,3-DIMETHYLPENTANE	6,27	628,28
2,3-DIMETHYLPENTANE	26,82	2687,47
2-METHYLHEXANE	107,3	10751,89
3-METHYLHEXANE	111,45	11167,74
3-ETHYLPENTANE	7,67	768,56
N-HEPTANE	229,2	22966,77
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	14,94	1466,93
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	55,47	5446,50
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	44,08	4328,13
METHYLCYCLOHEXANE	211,85	20801,16
ETHYLCYCLOPENTANE	10,31	1012,32
TOLUENE	158,34	14589,53
3-METHYLHEPTANE	243,52	27817,51
N-OCTANE	7,32	836,17
ISOPROPYLCYCLOPENTANE	1,85	207,60
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	207,47	23281,25
N-PROPYLCYCLOPENTANE	28,01	3143,14
ETHYLCYCLOHEXANE	4,37	490,38
ETHYLBENZENE	15,45	1640,29
P-XYLENE	19,4	2059,65
M-XYLENE	64,76	6875,40
O-XYLENE	19,4	2059,65
2-METHYLOCTANE	78,93	10123,39
N-NONANE	6,52	836,24
ISOPROPYLCYCLOHEXANE	37,33	4712,61
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	0,8	105,76

Tabla 4.1. Composición de la alimentación, en caudales molares y másicos.

Una vez considerada la composición de la alimentación, es necesario conocer bajo qué requerimientos y parámetros se van a diseñar ambas conformaciones del Splitter de nafta. Estos requerimientos o especificaciones de salida, para el caso que aquí se presentan, quedan recogidos en las Tablas 4.2 y 4.3, en caudales molares (kmol/h) y caudales másicos (kg/h), respectivamente.

Básicamente, se pretende separar por cabeza los ligeros (LPG, propano, butanos que lleva la nafta), en una corriente intermedia el resto de los ligeros (los pentanos) con parte de los aromáticos de la nafta (benceno) y por el fondo el resto de la nafta para su posterior procesado en las unidades de acondicionamiento de la nafta (reformado e isomerización). En estas tablas, como se puede observar, aparecen marcados tres componentes. Estos componentes se han elegido como "cortes" a la hora de caracterizar las corrientes de salida. Las composiciones que aparecen, tanto en la Tabla 4.2 como en la Tabla 4.3 representan la cantidad máxima de ese componente que puede aparecer en cada una de las corrientes de salida donde el componente es minoritario.

Las corrientes de salida que se especifican son tres: la corriente de cabeza, denominada como *OVHD* – "*Overhead Distillate*" – con el objetivo de emplear la nomenclatura estándar; *SIDE*, que es la corriente lateral y *BOTTOM*, que es la corriente de salida por la zona de agotamiento, el fondo de la columna.

Es conveniente mencionar que la tolerancia admitida para el tratamiento de los datos ha sido de 10⁻⁴. En otras palabras, al tratarse de caudales molares y másicos, y dado el proceso considerado, el valor comentado se considera una precisión suficiente. Por tanto, todos aquellos caudales con un exponente menos a 10⁻⁴ se tomarán como 0.

Nombre del componente	Molar Flow OVHD	Molar Flow Side	Molar Flow Bottom
ISOBUTANE	3,03	9,14E-12	
N-BUTANE	81,93	6,62E-08	
2,2-DIMETHYL-PROPANE	5,33	1,54E-06	
2-METHYL-BUTANE	470,98	9,9	3,09E-12
N-PENTANE	24,79	355,43	4,69E-10
CYCLOPENTANE	9,45E-07	24,9	2,13E-07
2,2-DIMETHYL-BUTANE	3,77E-08	21,08	1,27E-06
2,3-DIMETHYL-BUTANE	1,54E-11	35,24	3,60E-06
2-METHYL-PENTANE	8,01E-12	194,02	1,84E-05
3-METHYL-PENTANE	3,9E-14	119,89	1,20E-04
N-HEXANE	1,72E-17	275,01	0,01
METHYLCYCLOPENTANE	8,7E-18	106,52	0,07
CYCLOHEXANE		84,41	10,98
BENZENE	2,66E-15	167,09	0,03
2,2-DIMETHYLPENTANE		9,24	0,87
2,4-DIMETHYLPENTANE		14,2	1,46
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE		2,58	0,91
3,3-DIMETHYLPENTANE		0,94	5,33
2,3-DIMETHYLPENTANE		0,42	26,41
2-METHYLHEXANE		2,67	104,63
3-METHYLHEXANE		0,73	110,72
3-ETHYLPENTANE		0,01	7,67
N-HEPTANE		4,95E-03	229,2
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE		0,37	14,57
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE		0,05	55,42
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE		0,06	44,02
METHYLCYCLOHEXANE		6,59E-05	211,85
ETHYLCYCLOPENTANE		5,09E-07	10,31
TOLUENE		6,91E-06	158,34
3-METHYLHEPTANE		2,27E-11	243,52
N-OCTANE		2,49E-15	7,32
ISOPROPYLCYCLOPENTANE		3,77E-17	1,85
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE		9,76E-13	207,47
N-PROPYLCYCLOPENTANE		2,35E-17	28,01
ETHYLCYCLOHEXANE		6,31E-18	4,37
ETHYLBENZENE		3,62E-16	15,45
P-XYLENE		2,2E-16	19,4
M-XYLENE		4,33E-16	64,76
O-XYLENE		2,38E-17	19,4
2-METHYLOCTANE		1,11E-20	78,93
N-NONANE			6,52
ISOPROPYLCYCLOHEXANE			37,33
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE			0,8

Tabla 4.2. Especificaciones en las corrientes de salida, en caudales molar.

Nombre del componente	Mass Flow OVHD	Mass Flow Side	Mass Flow Bottom
ISOBUTANE	176,11	5,31248E-10	0
N-BUTANE	4762,05	3,84777E-06	0
2,2-DIMETHYL-PROPANE	384,56	1,11E-04	0
2-METHYL-BUTANE	33981,34	714,29	2,22944E-10
N-PENTANE	1788,61	25644,37	3,38385E-08
CYCLOPENTANE	6,6277E-05	1746,35	1,49386E-05
2,2-DIMETHYL-BUTANE	3,24888E-06	1816,61	1,09E-04
2,3-DIMETHYL-BUTANE	1,32713E-09	3036,88	3,10E-04
2-METHYL-PENTANE	6,90279E-10	16720,09	1,59E-03
3-METHYL-PENTANE	3,36091E-12	10331,78	1,03E-02
	1,48225E-15	23699,58	8,62E-01
METHTLCTCLOFENTANE	7,32203E-16	8964,86	5,89
BENZENE	0.077005.40	7104,05	924,09
2 2-DIMETHVI PENTANE	2,07782E-13	13052,00811	2,34
		925,89	87,18
		1422,90	146,30
		258,53	91,19
		94,19	534,09
		42,09	2646,39
		267,54	10484,35
3-METHYLHEXANE		73,15	11094,59
3-ETHYLPENTANE		1,00	768,56
		4,96E-01	22966,77
		36,33	1430,60
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE		4,91	5441,59
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE		5,89	4322,24
METHYLCYCLOHEXANE		6,47E-03	20801,16
ETHYLCYCLOPENTANE		4,99778E-05	1012,32
TOLUENE		0,000636691	14589,53
3-METHYLHEPTANE		2,59304E-09	27817,51
N-OCTANE		2,84435E-13	836,17
ISOPROPYLCYCLOPENTANE		4,23051E-15	207,60
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE		1,09522E-10	23281,25
N-PROPYLCYCLOPENTANE		2,63705E-15	3143,14
ETHYLCYCLOHEXANE		7,08077E-16	490,38
ETHYLBENZENE		3,84326E-14	1640,29
P-XYLENE		2,33568E-14	2059,65
M-XYLENE		4,59705E-14	6875,40
O-XYLENE		2,52678E-15	2059,65
2-METHYLOCTANE		1,42366E-18	10123,39
N-NONANE		0	836.24
ISOPROPYLCYCLOHEXANE		0	4712.61
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE		0	105,76

Tabla 4.3. Especificaciones en las corrientes de salida, en caudales másicos.

A continuación, para completar se dan los caudales de las corrientes de salida mencionada que permiten obtener las especificaciones, en la Tabla 4.4 se exponen los caudales de las corrientes OVHD, SIDE y BOTTOM, en base molar y másica respectivamente.

	Base molar (kmol/h)	Base másica (kg/h)
OVHD	585,96	41.092,67
SIDE	1.424,77	115.963,80
ВОТТОМ	1.727,93	175.884,48

Tabla 4.4. Caudales totales de salida en cada corriente.

Una vez comentadas las características de la alimentación y las condiciones y especificaciones de las corrientes de salida que se han tenido en cuenta para realizar el estudio, en el siguiente epígrafe se explicará la simulación realizada para cada conformación y los resultados obtenidos.

4.2 Simulación con la conformación en serie de dos columnas de destilación. Explicación del desarrollo de la simulación. Resultados de la simulación.

En este apartado, se ha realizado el estudio de la simulación disponiendo las columnas de destilación en serie, tal y como se ha comentado en el apartado 2.2. La distribución en serie que se ha empleado viene expuesta en la Figura 2.7, más concretamente, se trata de la figura B. Esta conformación se emplea comúnmente cuando los componentes de interés presentan una volatilidad relativa alta.

Según la alimentación que se va a tratar y las especificaciones facilitadas en el apartado anterior, los tres componentes de interés son el 2-metilbutano, el N-pentano y el Benceno, que conforman los tres cortes principales de la separación. A primera vista, haciendo uso de los diagramas Txy y Pxy, resulta evidente que la separación más sencilla, es la que se podría realizar entre el N-pentano y el Benceno. En las Figuras 4.1 y 4.2 se presentan ambos diagramas. La distancia que existe entre las curvas de líquido y vapor saturado refleja la sencillez de la separación, tal y como se comenta en el apartado 2.1.3. La facilidad para separar estos componentes también queda reflejada de manera indiscutible en las diferencias entre sus temperaturas de ebullición, siendo estas de 36,07°C y 80,09°C respectivamente.



Figura 4.1. Diagrama Txy del sistema binario N-pentano y Benceno, respecto del N-pentano en base molar (kmol/h) y en °C.



Figura 4.2. Diagrama Pxy del sistema binario N-pentano y Benceno, respecto del N-pentano en base molar (kmol/h) y en bar.

Por el contrario, mediante el análisis de los mismos datos para el 2-metilbutano y el N-pentano, se puede apreciar que la separación no resulta tan sencilla para estos componentes. Al igual que para el caso anterior, se presentan las Figuras 4.3 y 4.4, con los diagramas Txy y Pxy respectivamente. En ellos, es posible observar que las curvas de líquido y vapor saturado aparecen notablemente más cerca, lo que viene a demostrar la dificultad del proceso.

La información que proporcionan estas gráficas ayuda a entender y predecir que los problemas de la separación se encontrarán a la hora de cumplir las especificaciones para el 2-metilbutano y el N-pentano.



Figura 4.3. Diagrama Txy del sistema binario N-pentano y 2 - metilbutano, respecto del N-pentano en base (kmol/h) molar y en °C



Figura 4.4. Diagrama Pxy del sistema binario N-pentano y 2 - metilbutano, respecto del N-pentano en base molar (kmol/h) y en bar.

Teniendo en cuenta las especificaciones de salida, la estrategia de separación idónea para este caso resulta ser, como se ha comentado anteriormente, la disposición de dos columnas en serie que operen de la siguiente manera:

- En la primera columna se realiza una separación primaria de componentes, cuyo objetivo es obtener por cabeza una mezcla de ligeros entre los que figurarán el 2-metilbutano, el N-pentano y el Benceno. Por fondo, se obtendrá una corriente de salida que contenga el resto de los componentes de la mezcla, más pesados que el Benceno, realizando así la primera separación.

- En la segunda columna se repartirán los tres cortes entre la corriente de cabeza y la de fondo. Por cabeza, debe salir mayoritariamente el 2-metilbutano, con un bajo porcentaje de N-pentano (6,51%). Por fondo, debe salir el resto del N-pentano y todo el Benceno.

La separación que se pretende realizar en la segunda columna no resultará sencilla, debido a lo comentado y reflejado sobre los diagramas Txy y Pxy del 2-metilbutano y del N-pentano. En consecuencia, es probable que la segunda columna presente un mayor número de platos que la primera, así como una relación de reflujo mayor. Ambos factores contribuyen al encarecimiento del sistema: el primero en cuanto al coste de construcción y el segundo en cuanto al coste energético.

Para realizar la simulación de esta distribución de columnas, se ha considerado el siguiente diagrama de bloques:



Figura 4.5. Diagrama de bloques de la distribución en serie.

Partiendo de este planteamiento, se configuró el diagrama de flujo empleado para la simulación. Los bloques con los que se ha realizado esta simulación y proporcionados por el programa Aspen Plus, son los RADFRAC. Estos módulos permiten simular, de manera aproximada, una destilación binaria o multicomponente de manera teórica. Se puede aproximar el número de etapas teórico que estima este bloque multiplicando por un factor de eficacia, que se comentará más adelante.

El diagrama de flujo configurado para realizar esta simulación se presenta a continuación, en la Figura 4.6.



Figura 4.6. Diagrama de flujo de la configuración en serie.

	RD1 (Radfrac 1)	RD2 (Radfrac 2)
Número de etapas	95	120
Plato de alimentación	35	12
Tipo de condensador	Total	Total
Tipo de re-hervidor	Kettle	Kettle
D: F	0,531132	0,294711
RR	1,13878	6,52574843
Presión del condensador	1 bar	1 bar

Para el caso que aquí concierne, los datos introducidos para esta simulación se presentan en la Tabla 4.5.

Tabla 4.5. Caracterización de las columnas de destilación. Caso en serie.

Donde:

- El ratio D: F es el coeficiente que relaciona el caudal de destilado con respecto al caudal de entrada de la alimentación. En definitiva, se trata de una relación de diseño de la columna que determina el caudal de destilado que se pretende obtener en función del caudal de alimentación introducida.

- El ratio RR es la relación de reflujo de la columna, que es el coeficiente que determina el caudal, saliente del condensador, que se vuelve a recircular dentro de la columna con respecto a la cantidad de caudal destilado que se extrae de ella. Para obtener el valor de la corriente de reflujo, en unidades de caudal, se debe multiplicar este valor por el caudal de destilado obtenido.

El proceso de simulación comenzó con la ejecución y optimización del bloque RD1 y, seguidamente, se simuló el bloque RD2. A continuación, se explicará el proceso de diseño seguido para cada uno de los bloques.

- Diseño de RD1

Para comenzar con el diseño del bloque RD1, en primer lugar, se simuló un bloque DSTWU, con el objetivo de obtener un input inicial para poder ejecutar dicho bloque. El proceso de obtención de los datos de diseño se explica más extensamente en el Anexo III.

Con el objetivo de emplear un modelo optimizado, ha sido esencial considerar, en conjunto, el número de etapas óptimas necesarias, la selección del plato de alimentación más rentable

para la operación y el coeficiente de reflujo más conveniente. A su vez, debían obtenerse los resultados señalados en las especificaciones.

Una vez simulado el bloque RD1 con la primera aproximación, se realizaron varios análisis de sensibilidad, buscando optimizar la columna sin dejar de cumplir el diseño explicado previamente – obtener el 2-metil butano y el N-pentano totalmente por cabeza y el Benceno por fondo –. Nótese que el principal objetivo de estos análisis de sensibilidad, además de la optimización del sistema, era conseguir que las corrientes se ajustaran a las especificaciones dadas. Si bien es cierto que con los resultados de diseño de la primera aproximación conseguían cumplir sobradamente con estas especificaciones, para el 2-metilbutano y del Benceno, se observó que era posible buscar una mejora para todas las corrientes, evitando perder producto de interés por las corrientes que no debían estar enriquecidas del mismo.

En primer lugar, se analizó la influencia del número de etapas teóricas de la columna en la composición de las corrientes de salida finales - TOP2, BOT2 y BOT1 -. Se observó que era posible conseguir un caudal molar más ajustado para el 2-metilbutano y para el Benceno disminuyendo el número de etapas, aunque el N-pentano se veía perjudicado por este mismo efecto. Los diagramas Txy y Pxy presentados en las figuras 4.3 y 4.4, respectivamente, ofrecen una explicación de la sensibilidad del N-pentano a los cambios que sufre el 2-metilbutano. Teniendo en cuenta el hecho descrito, se disminuyó el número de etapas a 95, considerando que este cambio perjudicaba levemente al N-pentano. En la Figura 4.7 se recoge el resultado gráfico del análisis de sensibilidad sujeto a la variación del número de etapas.

Seguidamente, se realizó otro análisis de sensibilidad, variando la relación de reflujo de RD1, para tratar de ajustar a especificaciones los caudales de N-pentano y Benceno que salen por BOT 2. De nuevo, se consideró la influencia de este coeficiente de reflujo sobre las corrientes de salida, sin modificar el resto de los parámetros. Los resultados, que aparecen en la Figura 4.8, muestran que esta variación resulta ser solución para corregir el caudal de Benceno, pero no para mejorar los otros dos caudales, ya que apenas se aprecia influencia ninguna. En aras de la mejora de la cantidad de Benceno presente en la corriente BOT 2, se modificó dicho coeficiente ligeramente La nueva relación de reflujo empleada es 1,13878.

Por último, para corregir la desviación del N-pentano obtenido frente a la especificación, se realizó un último análisis de sensibilidad para estudiar el plato óptimo de entrada de la alimentación. La gráfica de la Figura 4.9, que representa este análisis, muestra que introduciendo la alimentación en el plato 35, era posible cumplir de manera más cercana la especificación.

Así pues, con todos estos cambios, se consiguió reducir la altura de la columna, la etapa de entrada de la alimentación, aunque se tuvo que aumentar ligeramente la relación de reflujo. El valor de la relación de destilado – alimentación (D: F) no se consideró en este grupo de análisis de sensibilidad, ya que distorsionaba llamativamente los caudales de los productos principales, sin generar mejora alguna en el diseño de la columna.

A continuación, se presentan las gráficas mencionadas en los párrafos anteriores, que contienen los resultados de los análisis de sensibilidad.



Figura 4.7. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación del número de etapas de la columna.



Figura 4.8. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación de la relación de reflujo.



Figura 4.9. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de alimentación.

Bajo estas líneas, se presenta una tabla comparativa entre los parámetros comentados anteriormente, antes y después de los análisis de sensibilidad realizados. En esta tabla, se puede apreciar el cambio en el diseño de la columna RD1.

	Número de etapas	Etapa de alimentación	Relación de reflujo
Diseño primario	98	55	1,03751
Diseño optimizado	95	35	1,13878

Tabla 4.6. Comparativa de los parámetros de diseño de la columna RD1.

- Diseño de RD2

Análogamente al bloque RD1, se ha diseñado el bloque RD2 partiendo de un DSTWU. Se observó que los parámetros obtenidos en el segundo DSTWU para el diseño del RD2 cumplían holgadamente con los requisitos de las especificaciones. Por tanto, sabiendo que existían ciertos márgenes en el diseño del RD2, se realizaron de nuevo una serie de análisis de sensibilidad, con el objetivo de seguir manteniendo el cumplimiento de las especificaciones, considerando la eficiencia como una meta más para tener en cuenta.

Se realizó una ronda inicial de análisis de sensibilidad. En ellos, de nuevo, se estudiaba el coeficiente de reflujo, el número de etapas de la columna y la etapa óptima de alimentación. Sin embargo, puesto que previamente ya se cumplían las especificaciones, el objetivo que tenían estos análisis de sensibilidad era reducir la eficacia de esta separación, para ajustar de manera eficiente el consumo. En otras palabras, se pretendía desmejorar el rendimiento de la separación, ofrecidos por los parámetros de diseño que se habían obtenido del DSTWU, para ajustar los resultados a las especificaciones, reduciendo así los costes fijo y variables del conjunto.

En las líneas siguientes, se presentan los análisis de sensibilidad realizados en la etapa de alimentación, la relación D: F y el coeficiente de reflujo.

Para la realización de este estudio, considerando que la separación principal era la que presentaba mayor dificultad – 2metilbutano del N-pentano – la primera variable cuya influencia se analizó fue el número de etapas de la columna. Sin embargo, considerando que el objetivo era tratar de reducirlas, se observó que la separación sufría un deterioro importante en cuanto a los rendimientos. Por tanto, se descartó esta opción.

Siguiendo con el procedimiento del caso anterior, se trató de reducir la etapa de alimentación, sin descuidar el objeto de estos análisis, que es mejorar los resultados de la separación. Los resultados de este análisis se presentan en la Figura 4.10. Puesto que se seguía obteniendo un sobrecumplimiento de la especificación del 2-metilbutano por la corriente TOP 2 y que se buscaba aumentar el caudal de N-pentano en la corriente BOT 2, se eligió la etapa 12 como etapa de alimentación, frente a la etapa 18 que venía preestablecida por el diseño del DSTWU. Con este cambio, se ajustó la cantidad de 2-metilbutano, reduciéndola desde un caudal de 480 kmol/h a uno de 470,64 kmol/h. Sin embargo, pese a que el Benceno no sufrió ningún efecto contraproducente, el N-pentano empeoró considerablemente.

Los siguientes análisis de sensibilidad se efectuaron con miras a mejorar el caudal de Npentano. Se realizó el análisis de sensibilidad sobre la variable D: F, cuya influencia en este caso era mayor, se consiguió, no solo ajustar el caudal de N-pentano sin variar demasiado el caudal de 2-metilbutano, sino que también se acercó el valor del caudal total de salida de la columna al que marcaba la especificación (586 kmol/h).

Finalmente, se realizó un último análisis para estudiar la influencia de la relación de reflujo de la columna, ya que es un coeficiente muy ligado al consumo energético de la misma. Se observa, en la Figura 4.12, que existe cierta mejora en la separación si se aumenta el valor inicial en aproximadamente 0,1 unidades: El valor escogido para la relación de reflujo final es de 6,14807.

En las Figuras 4.10, 4.11 y 4.12, se presentan los resultados de los análisis de sensibilidad referidos en los párrafos anteriores.



Figura 4.10. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación del plato óptimo de alimentación.



Figura 4.11. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación de D: F.



Figura 4.12. Gráfica del análisis de sensibilidad para el estudio de la relación de reflujo.

Análogamente al caso de optimización de RD1, se ha elaborado una tabla comparativa donde se exponen los cambios realizados en el diseño de las especificaciones para la columna RD2.

	D: F	Etapa de alimentación	Relación de reflujo
Diseño primario	0,300081	18	6,04377
Diseño optimizado	0,294711	12	6,52574843

Tabla 4.7. Comparativa de los parámetros de diseño de la columna RD2.

Es necesario reparar en que, al tratarse en este caso de una separación más compleja, el margen y la posibilidad de ajustar los parámetros es más reducido que para el caso del RD1.

A raíz de todo lo comentado anteriormente, en el siguiente apartado, se presentan los resultados totales de la simulación.

4.2.1 Resultados. Caudales y consumo energético.

En este apartado, se presentarán los resultados obtenidos tras la simulación y optimización de la conformación en serie.

En primer lugar, en las tablas 4.8 y 4.9, se recogen los caudales de producto destilado y de fondo, obtenidos de cada columna, en base molar (kmol/h). Análogamente, en las tablas 4.10 y 4.11 se exponen, estos mismos caudales de salida en base másica (kg/h).

Nombre del componente	Molar Flow TOP1- RD1	Molar Flow BOT1- RD1
ISOBUTANE	3,03	1,58E-62
N-BUTANE	81,93	3,67E-54
2,2-DIMETHYL-PROPANE	5,33	1,75E-49
2-METHYL-BUTANE	480,88	1,57E-35
N-PENTANE	380,21	1,50E-30
CYCLOPENTANE	24,90	3,54E-22
2,2-DIMETHYL-BUTANE	21,08	1,45E-21
2,3-DIMETHYL-BUTANE	35,24	1,44E-15
2-METHYL-PENTANE	194,02	1,07E-13
3-METHYL-PENTANE	119,89	1,70E-11
N-HEXANE	275,02	3,55E-07
METHYLCYCLOPENTANE	106,58	3,46E-05
CYCLOHEXANE	61,61	33,78
BENZENE	167,09	0,00358
2,2-DIMETHYLPENTANE	10,02	7,54E-02
2,4-DIMETHYLPENTANE	15,06	0,60
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	2,54	0,94
3,3-DIMETHYLPENTANE	0,54	5,73
2,3-DIMETHYLPENTANE	9,04E-02	26,73
2-METHYLHEXANE	4,90E-01	106,81
3-METHYLHEXANE	5,90E-02	111,39
3-ETHYLPENTANE	5,20E-04	7,67
N-HEPTANE	3,47E-05	229,20
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	0,11	14,83
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	1,09E-02	55,46
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	7,97E-03	44,07
METHYLCYCLOHEXANE	4,17E-07	211,85
ETHYLCYCLOPENTANE	1,32E-08	10,31
TOLUENE	1,87E-10	158,34
3-METHYLHEPTANE	5,91E-15	243,52
N-OCTANE	3,34E-20	7,32
ISOPROPYLCYCLOPENTANE	1,32E-20	1,85
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	1,02E-13	207,47
N-PROPYLCYCLOPENTANE	4,46E-22	28,01
ETHYLCYCLOHEXANE	2,18E-21	4,37
ETHYLBENZENE	5,73E-24	15,45
P-XYLENE	1,88E-25	19,4
M-XYLENE	2,80E-25	64,76
O-XYLENE	1,41E-27	19,4
2-METHYLOCTANE	5,95E-29	78,93
N-NONANE	1,41E-33	6,52
ISOPROPYLCYCLOHEXANE	1,65E-33	37,33
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	5,01E-60	0,8

Tabla 4.8. Caudales molares de los componentes de las corrientes de destilado y de fondo del RD1.

Nombre del componente	Molar Flow TOP2- RD2	Molar Flow BOT2- RD2
ISOBUTANE	3,03	4,83E-58
N-BUTANE	81,93	9,19E-44
2,2-DIMETHYL-PROPANE	5,33	1,28E-28
2-METHYL-BUTANE	470,49	10,39
N-PENTANE	24,39	355,82
CYCLOPENTANE	4,35E-02	24,86
2,2-DIMETHYL-BUTANE	6,16E-03	21,07
2,3-DIMETHYL-BUTANE	4,00E-04	35,24
2-METHYL-PENTANE	6,86E-04	194,02
3-METHYL-PENTANE	1,46E-04	119,89
N-HEXANE	3,03E-05	275,02
METHYLCYCLOPENTANE	1,34E-05	106,58
CYCLOHEXANE	3,87E-07	61,61
BENZENE	1,57E-05	167,09
2,2-DIMETHYLPENTANE	2,44E-08	10,02
2,4-DIMETHYLPENTANE	1,92E-08	15,07
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	4,46E-09	2,54
3,3-DIMETHYLPENTANE	9,59E-11	0,54
2,3-DIMETHYLPENTANE	2,50E-12	9,03E-02
2-METHYLHEXANE	9,17E-12	0,49
3-METHYLHEXANE	5,61E-13	5,89E-02
3-ETHYLPENTANE	2,81E-15	5,19E-04
N-HEPTANE	1,71E-17	3,46E-05
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	9,74E-12	1,10E-01
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	2,36E-13	1,09E-02
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	1,68E-13	7,96E-03
METHYLCYCLOHEXANE	1,48E-19	4,16E-07
ETHYLCYCLOPENTANE	3,37E-21	1,32E-08
TOLUENE	7,42E-24	1,87E-10
3-METHYLHEPTANE	0	0
N-OCTANE	0	0
ISOPROPYLCYCLOPENTANE	0	0
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	0	0
N-PROPYLCYCLOPENTANE	0	0
ETHYLCYCLOHEXANE	0	0
ETHYLBENZENE	0	0
P-XYLENE	0	0
M-XYLENE	0	0
O-XYLENE	0	0
2-METHYLOCTANE	0	0
N-NONANE	0	0
ISOPROPYLCYCLOHEXANE	0	0
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	0	0

Tabla 4.9. Caudales molares de los componentes de las corrientes de destilado y de fondo del RD2

Nombre del componente	Mass Flow TOP1- RD1	Mass Flow BOT1- RD1
ISOBUTANE	176,11	9,18E-61
N-BUTANE	4762,05	2,13E-52
2,2-DIMETHYL-PROPANE	384,56	1,26E-47
2-METHYL-BUTANE	34695,63	1,13E-33
N-PENTANE	27432,26	1,08E-28
CYCLOPENTANE	1746,35	2,48E-20
2,2-DIMETHYL-BUTANE	1816,61	1,25E-19
2,3-DIMETHYL-BUTANE	3036,88	1,24E-13
2-METHYL-PENTANE	16720,09	9,18E-12
3-METHYL-PENTANE	10331,78	1,47E-09
N-HEXANE	23700,44	3,06E-05
METHYLCYCLOPENTANE	8969,91	2,92E-03
CYCLOHEXANE	5185,12	2843,03
BENZENE	13052,34	2,79
2,2-DIMETHYLPENTANE	1004,50	7,56
2,4-DIMETHYLPENTANE	1509,40	59,79
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	254,03	94,68
3,3-DIMETHYLPENTANE	53,89	574,38
2,3-DIMETHYLPENTANE	9,06	2678,41
2-METHYLHEXANE	49,12	10702,77
3-METHYLHEXANE	5,91	11161,83
3-ETHYLPENTANE	5,21E-02	768,51
N-HEPTANE	3,47E-03	22966,76
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	10,79	1456,14
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	1,07	5445,43
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	0,78	4327,35
METHYLCYCLOHEXANE	4,09E-05	20801,16
ETHYLCYCLOPENTANE	1,30E-06	1012,32
TOLUENE	1,72E-08	14589,53
3-METHYLHEPTANE	6,76E-13	27817,51
N-OCTANE	3,81E-18	836,17
ISOPROPYLCYCLOPENTANE	1,48E-18	207,60
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	1,15E-11	23281,25
N-PROPYLCYCLOPENTANE	5,00E-20	3143,14
ETHYLCYCLOHEXANE	2,45E-19	490,38
ETHYLBENZENE	6,08E-22	1640,29
P-XYLENE	1,99E-23	2059,65
M-XYLENE	2,98E-23	6875,40
O-XYLENE	1,49E-25	2059,65
2-METHYLOCTANE	7,63E-27	10123,39
N-NONANE	1,81E-31	836,24
ISOPROPYLCYCLOHEXANE	2,08E-31	4712,61
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	6,63E-58	105,76

Tabla 4.10. Caudales másicos de los componentes de las corrientes de destilado y de fondo del RD1.

Nombre del componente	Mass Flow TOP2- RD2	Mass Flow BOT2- RD2
ISOBUTANE	176,11	2,81E-56
N-BUTANE	4762,05	5,34E-42
2,2-DIMETHYL-PROPANE	384,56	9,26E-27
2-METHYL-BUTANE	33946,21	749,42
N-PENTANE	1759,47	25672,79
CYCLOPENTANE	3,05	1743,30
2,2-DIMETHYL-BUTANE	0,53	1816,08
2,3-DIMETHYL-BUTANE	3,44E-02	3036,85
2-METHYL-PENTANE	5,91E-02	16720,03
3-METHYL-PENTANE	1,25E-02	10331,77
N-HEXANE	2,61E-03	23700,44
METHYLCYCLOPENTANE	1,13E-03	8969,91
CYCLOHEXANE	3,26E-05	5184,80
BENZENE	1,22E-03	13052,33
2,2-DIMETHYLPENTANE	2,44E-06	1004,53
2,4-DIMETHYLPENTANE	1,92E-06	1509,65
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	4,47E-07	254,20
3,3-DIMETHYLPENTANE	9,61E-09	53,88
2,3-DIMETHYLPENTANE	2,51E-10	9,04
2-METHYLHEXANE	9,19E-10	49,04
3-METHYLHEXANE	5,62E-11	5,90
3-ETHYLPENTANE	2,82E-13	0,05
N-HEPTANE	1,71E-15	0,00
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	9,57E-10	10,79
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	2,32E-11	1,07
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	1,65E-11	0,78
METHYLCYCLOHEXANE	1,45E-17	4,09E-05
ETHYLCYCLOPENTANE	3,31E-19	1,30E-06
TOLUENE	6,84E-22	1,72E-08
3-METHYLHEPTANE	0	0
N-OCTANE	0	0
ISOPROPYLCYCLOPENTANE	0	0
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	0	0
N-PROPYLCYCLOPENTANE	0	0
ETHYLCYCLOHEXANE	0	0
ETHYLBENZENE	0	0
P-XYLENE	0	0
M-XYLENE	0	0
O-XYLENE	0	0
2-METHYLOCTANE	0	0
N-NONANE	0	0
ISOPROPYLCYCLOHEXANE	0	0
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	0	0

Tabla 4.11. Caudales másicos de los componentes de las corrientes de destilado y de fondo del RD2.

Considerando los resultados anteriores, es conveniente comparar los caudales molares obtenidos de los componentes de interés respecto a las especificaciones dadas y expuestas en el apartado 4.1. Así, en las Tablas 4.12, 4.13 y 4.14, se pueden observar estos valores para cada una de las corrientes de salida. En la Tabla 4.12, se trata el caudal de producto que en las especificaciones se nombra como OVHD. Este caudal, en la conformación en serie, sería el equivalente a la corriente de producto TOP 2. En las Tablas 4.13 y 4.14, el caudal molar referido como SIDE en las especificaciones es el análogo a la corriente BOT 2 de la configuración en serie, todo en unidades de kmol/h.

	2 – metilbutano	N-pentano	Benceno
Especificaciones	470,98	24,79	2,66E-15
Config. Serie	470,49	24,38	1,57E-05

Tabla 4.12. Comparativa de los resultados obtenidos frente a las especificaciones OVHD.

	2 – metilbutano	N-pentano	Benceno
Especificaciones	9,9	355,43	167,10
Config. Serie	10,39	355,82	167,09

Tabla 4.13. Comparativa de los resultados obtenidos frente a las especificaciones SIDE.

	2 – metilbutano	N-pentano	Benceno
Especificaciones	3,09E-12	4,69E-10	0,03
Config. Serie	1,57E-35	1,49E-30	0,04

Tabla 4.14. Comparativa de los resultados obtenidos frente a las especificaciones BOTTOM.

A continuación, para concluir el análisis de las corrientes de los productos, en la Tabla 4.15 se presentan los rendimientos de la separación de cada componente, relacionando el caudal de estos componentes presentes en la alimentación (FEED) con el caudal resultante de la estrategia en serie, habiendo elegido la corriente comparativa según sea esta la que en los datos de las especificaciones debiera contener la cantidad mayoritaria del producto en cuestión.

	Rendimiento de la separación.
2-metilbutano (TOP2/FEED)	97,83%
N-Pentano (BOT2/ FEED)	93,59%
Benceno (BOT2/ FEED)	99,97%

Tabla 4.15. Rendimientos de la separación – estrategia en serie.

Nótese que, para la obtención de estos rendimientos, han sido necesarias dos columnas de destilación, de 100 y 120 etapas teóricas. En el apartado de análisis, se aplicará el coeficiente de eficiencia del plato, que es un coeficiente de corrección que considera la no idealidad de los platos. El aplicar el factor de la eficacia, naturalmente, el número de platos será mayor que el de las etapas.

Este resultado se presenta para demostrar que la separación se ha realizado correctamente, dentro de las especificaciones. En el apartado de conclusiones, se comparará el valor del consumo energético, así como del coste de construcción de las columnas en serie, con estos mismos valores obtenidos para la estrategia DWC; con el objetivo de concluir cuál de ambas estrategias resulta más eficiente y menos costosa.

Finalmente, otro de los resultados de la simulación que debemos considerar para la comparativa entre ambas estrategias de separación es el consumo total del proceso. Principalmente, este consumo aparece en el condensador y en el re-hervidor. Para la configuración en serie, los consumos son los que se presentan en la Tabla 4.16. En ella, aparecen los consumos de condensador y re-hervidor para cada columna y finalmente, un consumo total de la instalación.

	RD1	RD2
Condensador (KW)	34.218,30	30449,7
Re-hervidor (KW)	44.356,8	30898,47
TOTAL (KW)	139.923,4	

Tabla 4.16. Consumo de las columnas – estrategia en serie.

Según los precios de la electricidad para consumo no doméstico que se encuentran en la base de datos de Eurostat [17], se ha convenido que, para este estudio, el precio en Euros/kWh de la electricidad es de 0,0982 €/kWh. Aplicando este valor a los consumos energéticos que se recogen en la Tabla 4.16, se puede calcular una aproximación del coste energético de la conformación en serie.
Nótese que este valor no considera el coste de arranque del proceso, donde el consumo energético acostumbra a ser notoriamente alto. Por esta misma razón, el coste variable que se presenta en la Tabla 4.17 es una aproximación al coste variable total, donde solo se ha tenido en consideración el precio del proceso en estado estacionario.

	Distribución de columnas en serie	
Coste del proceso estacionario (€)	23.985,22 €	

Tabla 4.17. Coste energético de las columnas – estrategia en serie.

Para estudiar con más detalle el consumo energético y los costes de instalación y *utilities*, se ha empleado la herramienta *Aspen Economics* que ofrece el mismo programa de simulación. Además, también realiza una estimación de los parámetros de diseño internos de cada equipo, como diámetros, áreas de intercambio y dimensiones de tuberías, así como la temperatura de diseño del fluido que pasa por ellas.

En lo que concierne a este trabajo, tanto para el caso de la estrategia en serie como para la columna DWC, se estudiarán los valores del diámetro de las columnas de destilación necesarios para su diseño. A nivel económico, se considerará el coste de operación – los necesarios para mantener el proyecto -, el coste de las *utilities*, el coste de equipamiento y el coste total de la instalación.

En primer lugar, en la Tabla 4.18, se presenta un resumen de todos los costes mencionados previamente:

Resumen			
Coste Capital Total [€]	20.498.793,1		
Coste Total de Operación [€/Año]	23.614.569		
Coste Total de Utilities [€/Año]	19.499.137,9		
Coste de Equipamiento [€/Año]	8.722.413,79		
Coste total de la Instalación [€/Año]	12.113.362,1		

Tabla 4.18. Resumen de los resultados económicos para la estrategia en serie.

En la siguiente tabla, se desglosa el coste de las *utilities* en el consumo de electricidad requerido, el agua de refrigeración y el refrigerante, así como el vapor necesario para el rehervidor. Además, esta herramienta también es capaz de calcular el coste por hora que supone el empleo de estos servicios.

Servicios auxiliares - Utilities					
Nombre	Fluido	Flujo	Unidades	Coste por Hora	Unidades
Electricidad		257,47	KW	17,20	€/H
Agua de refrigeración	Agua	2660,29	m ³ /H	72,42	€/H
Refrigerante - Freon 12	Refrigerante	664.886,17	KG/H	107,41	€/H
Vapor @100PSI	Vapor	131.048,47	KG/H	2.027,37	€/H

Tabla 4.19. Consumo y coste de los servicios auxiliares.

Para terminar con el desglose de los costes, se presentan aquellos asociados al equipamiento y su instalación. En la misma tabla – Tabla 4.20 – aparecen los pesos respectivos de las maquinarias y los pesos que sería necesario instalar.

Equipamiento					
N/	Coste del	Coste de	Peso del	Peso de la	
Nombre	equipo [€]	instalación [€]	equipo [Kg]	instalación [Kg]	
RD2-cond	167.500,00	312.327,59	36.060,64	52.540,57	
RD2-cond acumulador	54.051,72	185.000,00	11.294,46	21.461,29	
RD2-reb	81.034,48	208.793,10	13.562,43	26.326,53	
RD2-reflux pump	24.051,72	91.896,55	997,90	7.462,51	
RD2-tower	3.970.258,62	4.968.448,28	844.726,08	955.152,82	
RD1-cond	397.844,83	593.620,69	83.143,58	106.807,07	
RD1-cond acumulador	54.310,34	185.344,83	11.430,54	21.597,37	
RD1-reb	203.275,86	382.586,21	35.380,25	56.104,45	
RD1-reflux pump	25.948,28	100.431,03	1.088,62	9.441,08	
RD1-tower	3.744.137,93	5.084.913,79	835.245,98	1.005.418,17	

Tabla 4.20. Costes y pesos del equipamiento e instalación.

En cuanto a los detalles de diseño, el valor de los diámetros obtenidos del se recogen en la Tabla 4.21.

	RD1	RD2
Diámetro de las columnas (m)	7,8	6,4

Tabla 4.21. Diámetros de las columnas RD1 y RD2 de la configuración en serie.

En el siguiente apartado se procede al estudio de la estrategia de separación empleando una columna DWC, donde se buscará reducir los consumos aquí presentados, así como los costes fijos de construcción de la columna.

4.3 Simulación en columna con tabique separador (DWC). Explicación del desarrollo de la simulación. Resultados de la simulación.

La realización del estudio y simulación de la columna DWC presenta pocas similitudes con respecto a la simulación de la estrategia en serie, que se viene comentando en las secciones anteriores.

En cuanto a la estrategia de la separación, deben considerarse las Figuras 4.1, 4.2, 4.3 y 4.4, como se ha comentado en el apartado 4.2, y las especificaciones de los caudales de salida. Dichas especificaciones determinan que la corriente de destilado debe contener todo el 2metlbutano que se introduce por la alimentación, además de un porcentaje bajo de N-pentano (6,88%). La corriente lateral, por el contrario, debe contener el resto del N-pentano y la mayor parte del Benceno introducido (99,98%).

Retomando lo comentado en el apartado 2.3, el diseño de las columnas DWC nació a partir de las columnas Petlyuk. La novedad que ofrecían las columnas DWC es, precisamente, el tabique divisor que cruza de manera transversal la columna en un tramo determinado, dividiéndola, a nivel interno, en una zona de pre-fraccionamiento y una zona de fraccionamiento.

Así pues, el diseño de estas columnas en simuladores se acerca más al concepto de la conformación Petlyuk, ya que se asemeja las DWC a dos columnas acopladas, tanto térmica como másicamente. La primera de las columnas mencionadas actúa como pre-fraccionador, mientras que la otra columna tendrá el papel de columna principal, que recoge tanto el pre-fraccionador como la zona de fraccionamiento.

El acoplamiento térmico entre ambas columnas consiste en la sustitución del condensador y del re-hervidor de la columna de pre-fraccionamiento por dos corrientes que se extraen lateralmente de la columna de fraccionamiento. Una de las corrientes se introduce como alimentación al pre-fraccionador por cabeza, en estado líquido, sustituyendo al condensador. La otra corriente debe introducirse por fondo en estado vapor, pudiendo prescindir así del re-hervidor de la columna de pre-fraccionamiento. Lógicamente, es de esperar que, como consecuencia de las recirculaciones que constituyen este acoplamiento térmico, exista un transporte de materia asociado. La reinserción de estos caudales de salida al sistema influye de manera importante sobre el diseño de ambas columnas, ya que modificará tanto el número de platos como los coeficientes de reflujo y el D: F.

El simulador Aspen Plus V10 cuenta con una plantilla y librería asociada que reproduce y permite la simulación de una columna DWC. El diagrama de flujo principal que propone Aspen es una columna con un tabique divisorio, tal y como se expone en la Figura 4.13.

No obstante, este diagrama principal redirige al usuario a un diagrama secundario, que indica la distribución de las columnas diseñadas según el sistema Petlyuk. Estas columnas, mostradas en la Figura 4.14, presentan una alimentación – FEED – que entra en la columna de pre-fraccionamiento – PREHEAT –, dos salidas de esta misma columna – TOP1 y BOT1 – que entran en la columna principal – MAIN – y dos recirculaciones que conforman el acoplamiento térmico, salientes de la columna anterior y que a la hora de la simulación se trataron como corrientes de inicio para la iteración o corrientes de rasgado – RECCOND y RECVAP –. Finalmente aparecen representados las corrientes de productos – OVHD, SIDE y BOT –, que se obtienen a la salida de MAIN.



Figura 4.13. Diagrama de flujo principal para DWC.



Figura 4.14. Diagrama de flujo secundario para DWC.

Lo que representa este diagrama es el desglose de la estructura de una columna DWC, extrayendo la zona de pre-fraccionamiento como una columna independiente. Las etapas de la columna del pre-fraccionador, a nivel práctico, señalan cuáles son las etapas que se ven divididas por el tabique dentro de la columna y que realizan la primera separación. Sin embargo, como se comentará más adelante, el número de platos de PREHEAT no define

exactamente la longitud total del tabique. Además, cabe destacar que las corrientes RECCOND, RECVAP, TOP 1 y BOT1, dentro de la columna DWC, no existen como tal. La columna DWC diseñada presentará el mismo número de platos que la columna MAIN, así como su diámetro. En definitiva, para comprender el esquema de la Figura 4.14, debe verse la columna PREHEAT como la zona de pre-fraccionamiento y no como una columna a parte de la principal, puesto que, en realidad, la columna PREHEAT es una zona acoplada dentro de la columna MAIN.

Algo que no resulta trivial a la hora del diseño es el cálculo de la longitud del tabique intermedio, al no ser un dato que se obtenga como resultado de la simulación. Tal y como se comentaba antes, la columna PREHEAT resulta ser la zona donde ocurre la primera separación. Dado que necesariamente la zona de pre-fraccionamiento debe estar comunicada con la de fraccionamiento, la primera, diseñada como PREHEAT, ocupa toda la parte del pre-fraccionamiento. Las corrientes TOP1 y BOT1, que aparecen en el diagrama de flujo – pero que realmente no existen instalaciones como tal de estas líneas – señalan el comienzo y el final del tabique, así como la posición que ocupa este en la columna total. En la presentación de resultados, se comentará este aspecto en mayor profundidad.

Para poder diseñar convenientemente este sistema, ha sido necesario partir de una configuración de columnas más simple, en serie, con el objetivo de obtener valores iniciales para las corrientes de rasgado mencionadas en el párrafo anterior. Este sistema es el mismo que aparece en la Figura 2.7, concretamente el que presenta tres columnas de destilación: una inicial, a la que se le introduce directamente la alimentación, y dos en serie a la primera, cada una situada a continuación de ambas corrientes de salida. Para una mejor visualización del sistema, se presenta a continuación la Figura 4.15.



Figura 4.15. Diagrama en serie con 3 columnas.

Una vez desarrollada correctamente la simulación de las tres columnas en serie, el siguiente paso fue la adición de las recirculaciones que sustituyeron al condensador y re-hervidor de la primera. En la Figura 4.16 se puede observar el diagrama de flujo resultante. En la imagen, la corriente que sustituye al condensador se ha nombrado como RECCOND y, la que sustituye al re-hervidor, como RECVAP



Figura 4.16. Esquema con recirculaciones sustitutivas del condensador y re-hervidor.

Finalmente, habiendo simulado con éxito este diagrama, se procedió a la unión de las columnas RD2 y RD3, mediante la sustitución del re-hervidor de la primera con una corriente saliente de RD3 y el reemplazo del condensador de RD3 por una corriente cuya fuente era RD2. De esta manera, se unieron ambas columnas, unificándolas, para que trabajaran como si solo se tratase de una única. La Figura 4.17 recoge el diagrama de flujo descrito en este párrafo.



Figura 4.17. Esquema con recirculaciones sustitutivas del condensador y re-hervidor.

El resultado del procedimiento descrito podría considerarse una pre-simulación del verdadero DWC. Se debe recordar que todas las simulaciones descritas anteriormente, han sido necesarias para poder obtener unos valores iniciales para comenzar el proceso iterativo en la DWC que realmente concierne al tema de este trabajo.

Adviértase que, inicialmente, se podría pensar que estas simulaciones previas se pueden reducir mediante el empleo de una única columna sustituyendo a los dos RADFRAC colocados en paralelo. Sin embargo, durante el proceso de simulación, resultó más interesante el sistema propuesto dado que las recirculaciones generaban menos problemas de convergencia y era posible controlar con mayor facilidad situaciones de secado de la columna.

Para trabajar con la columna DWC, el input especificado para su diseño ha sido distinto que en el caso de las dos columnas en serie. Se ha fijado el caudal de salida por la corriente de destilado (OVHD-LIQ) y el caudal de vapor devuelto a la columna procedente del re-hervidor. Se debe advertir que ambos parámetros pertenecen a la columna principal – MAIN -, puesto que el pre-fraccionador, al sustituir el condensador y el re-hervidor por corrientes cuyo caudal viene fijado por la columna MAIN, depende directamente de esta. Por lo tanto, no es posible definir ningún parámetro de diseño en la columna PREHEAT.

Además, sabiendo que el simulador trabaja con las DWC desglosándolas en dos columnas interconectadas, ha sido necesario esclarecer y fijar algún grado de libertad adicional. Los grados de libertad que se fijan por defecto están relacionados con las especificaciones de las

corrientes de salida y por el consumo y coste total de la columna. Sin embargo, se ha considerado para este trabajo que la distancia entre platos del bloque PREHEAT es igual que la distancia entre platos de MAIN. Esto se ha conseguido haciendo que el número de platos de la columna PREHEAT coincida con en número de platos intermediarios entre el plato donde se alimenta TOP 1 y BOT 1 a MAIN. Existen columnas en las que el número de platos de la sección de pre-fraccionamiento es mayor (o menor) que en la sección de fraccionamiento. Sin embargo, se fijó este grado de libertad sabiendo que era posible alcanzar el objetivo de la separación y del ahorro.

Los datos de diseño del bloque DWC, tanto para la columna PREHEAT como para la columna principal, MAIN, se presentan en las Tablas 4.22 y 4.23 a y b. Estos valores hacen referencia a la configuración que aparece en la Figura 4.14.

Número de etapas	47
Plato de alim. (Feed)	21
Plato de alim. (Reccond)	1
Plato de alim. (Recvap)	47
Tipo de condensador	No procede
Tipo de re-hervidor	No procede
Distillate Rate (kmol/h)	No procede
RR	No procede
Presión del condensador	1 bar

PREHEAT

Tabla 4.22. Caracterización de la columna PREHEAT. Caso DWC.

	Caudal (kmol/h)	Temperatura (°C)	Presión (bar)
RECCOND	3155,23	38,6808	1
RECVAP	3980	101,786	1

Tabla 4.23a. Caracterización de las corrientes de recirculación.

La composición de la corriente RECCOND coincide con la del caudal de reflujo de RD1, disponible en los perfiles de composición resultantes al simular el diagrama de flujo de la

Figura 4.15. Análogamente, la composición para la corriente RECVAP coincidiría con la de la corriente Boilup.

Se debe reparar en que los valores aquí presentes no son los resultantes del diseño PREDWC. Los valores extraídos de este diseño se han empleado para obtener un valor inicial sobre el que iterar. Sin embargo, cabía la posibilidad de que estos debieran cambiarse para ajustar el diseño a las especificaciones.

	MAIN
Número de etapas	120
Plato de alim. (TOP 1)	9
Plato de alim. (BOT1)	55
Tipo de condensador	Total
Tipo de re-hervidor	Kettle
Distillate Rate (kmol/h)	585,96
Reflux Ratio	11,68
Etapa extrac. RECCOND	15
RECCOND (kmol/h)	3.155,23
Etapa extrac RECVAP	70
RECVAP (kmol/h)	3.980
Etapa extrac SIDE	40
SIDE (kmol/h)	1.424,77
Presión del condensador	1 bar

Tabla 4.23b. Caracterización de la columna MAIN. Caso DWC

En la tabla 4.23b el Distillate Rate es una especificación que hace referencia al caudal de destilado – y por tanto de OVHD –. Fija el caudal que se desea obtener por la cabeza de la columna.

El motivo por el cual se ha fijado este parámetro, en vez de los empleados en el caso de la disposición en serie, es por el hecho de que existen recirculaciones y extracciones laterales. Si se fijara una relación D: F, cuyo significado ha sido comentado en el apartado 4.2, habría que aplicar dicho coeficiente a la corriente de destilado, pero, igualmente, a la corriente de extracción lateral. Esto puede provocar errores en el proceso de simulación, ya que

probablemente la columna se secaría. Para corregirlo, sería necesario anticipar el valor de este coeficiente más allá de lo que ofrece el bloque de diseño DSTWU para la simulación de tres columnas en serie. Por el contrario, introducir el caudal que se desea obtener por la corriente de destilado, el cual viene definido en las especificaciones, resulta más sencillo para el proceso de simulación.

El valor para el RR se ha obtenido tras simular, en un primer momento, empleando el Boilup Rate. Este parámetro hace referencia a la cantidad de vapor que sale del re-hervidor y que se redirige de nuevo a la columna. Su valor se ha conseguido gracias a la distribución de columnas que aparece en la Figura 4.17 y a los resultados obtenidos de las columnas RD2 y RD3. Tras realizar una primera simulación con él, se han obtenido los resultados del coeficiente de reflujo que correspondía a este caso y se ha continuado el proceso de ajuste con este parámetro. Una variación del caudal de Boilup se relaciona directamente con el consumo del re-hervidor; la ventaja de variar la relación de reflujo es que permite disminuir (o aumentar) a la vez los consumos de re-hervidor y condensador.

En las líneas siguientes se comentará el proceso de ajuste y optimización de la columna. Estas correcciones sobre los parámetros de diseño se han realizado con el simulador Aspen Plus. Sin embargo, muchos autores [22] recomiendan el empleo de programas de optimización externos para ajustar las columnas DWC. Esto se debe a que, puesto que la plantilla que ofrece Aspen es relativamente nueva, la columna DWC no se está tratando como una única sino como el acoplamiento térmico y másico de dos. La optimización de las variables internas de un módulo DWC pertenece a un tipo de problemas de programación que no puede resolverse mediante el empleo de simuladores de procesos comerciales. Una posibilidad es realizar pequeños cambios en la simulación para ir ajustando el diseño a las especificaciones, considerando a su vez el consumo y el coste. Pese a que esta maniobra resulta impensable a gran escala, para el proceso aquí tratado ha sido posible aplicarla, ya que es más sencillo que los procesos industriales convencionales. Cabe recalcar que, para ciertos parámetros, como la elección del plato óptimo de extracción de la columna y el dimensionamiento del tabique intermedio mediante la elección del plato óptimo de alimentación a MAIN, sí ha sido posible realizar los análisis de sensibilidad pertinentes.

Partiendo de las bases de diseño iniciales, extraídas de los resultados de la configuración de la Figura 4.17, se observó que no se cumplían las especificaciones, principalmente porque el 2-metilbutano y el N-pentano se repartía de manera indeseada entre las corrientes OVHD y SIDE. Por tanto, basándonos en el diagrama Txy de este sistema binario y siguiendo el razonamiento expuesto en el apartado 2.1, se decidió introducir platos en la columna hasta conseguir una separación adecuada. Esto provocó que, al mismo tiempo que se aumentaban

los platos de MAIN, también debían aumentarse los de PREHEAT y variar los platos de extracción lateral de la corriente RECVAP.

Habiendo conseguido un número de platos tal, que los caudales de los cortes se aproximaban a los de la especificación, se observó la gran influencia que presentaba la variación del plato de extracción lateral de la corriente SIDE. Para establecer el óptimo, se realizó un análisis de sensibilidad, cuyo resultado gráfico se recoge en la Figura 4.18. Se seleccionó la etapa 40 puesto que era la que mejores resultados ofrecía para el N-pentano y el 2-metilbutano.

Por contra, el Benceno requería una mejora, ya que gran parte se iba por el fondo de la columna. Para solucionarlo, el siguiente paso fue la variación de la etapa de alimentación de BOT 1 que, como se ha comentado antes, está fuertemente ligada al tamaño de la pared divisoria. Se realizó un segundo análisis de sensibilidad para estudiar cuál era el plato más adecuado para introducir la esta corriente. Sus resultados se presentan en la Figura 4.19.



Figura 4.18. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de extracción lateral SIDE en MAIN



Figura 4. 19. Gráfica del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de alimentación de BOT 1 en MAIN.

La variación de plato óptimo de alimentación del BOT 1 provocaba, a su vez, un estudio complementario del número de etapas de PREHEAT, puesto que ambas variables están relacionadas por el tabique.

Finalmente, para ajustar el consumo energético de la columna, se buscó minimizar la relación de reflujo y variar los caudales de RECVAP y RECCOND.

La tabla de resultados numéricos de ambos análisis se encuentra en el Anexo V. En la Tabla 4.24, se han recogido los cambios realizados en el input, desde las bases de diseño primarias hasta el diseño final, optimizado con los análisis de sensibilidad.

	Diseño Base	Diseño Óptimo
Número de etapas totales	84	120
Plato de alimentación – BOT 1	14	55
Plato de extracción - SIDE	33	40
Caudal RECVAP (kmol/h)	5.284,04	3.980
Caudal RECCOND (kmol/h)	3.055,23	3.155,23
Reflux Ratio	20,46	11,68

Tabla 4.24. Comparativa de los parámetros de diseño de la columna MAIN – DWC.

Los estudios realizados para la columna PREHEAT han afectado al número de etapas totales y a la etapa de alimentación, que han pasado de 23 a 47 y de 10 a 21, respectivamente. Los resultados de estos análisis de sensibilidad se muestran en las Figuras

Los resultados de la simulación de la columna DWC se reflejan en el siguiente apartado. Se mostrarán los caudales y la composición de las corrientes de producto, así como el consumo energético que se ha requerido para la separación.

4.3.1 Resultados. Caudales y consumo energético.

En este apartado se recogen los resultados obtenidos tras la optimización y simulación de la columna DWC. En primer lugar, en la Tabla 4.25, se muestran los caudales molares que conforman los productos de salida de la columna, en kmol/h. A continuación, en la Tabla 4.26, se presentan estos mismos resultados, en caudales másicos en unidades de kg/h.

Nombre del componente	Molar Flow OVHD	Molar Flow SIDE	Molar Flow BOTTOM
ISOBUTANE	3,03	5,67E-20	8,23E-100
N-BUTANE	81,93	6,45E-11	1,04E-64
2,2-DIMETHYL-PROPANE	5,33	2,96E-08	5,87E-56
2-METHYL-BUTANE	470,82	10,06	1,13E-34
N-PENTANE	24,85	355,36	3,02E-28
CYCLOPENTANE	1,22E-04	24,90	5,53E-20
2,2-DIMETHYL-BUTANE	1,06E-06	21,08	1,13E-19
2,3-DIMETHYL-BUTANE	4,09E-10	35,24	2,88E-14
2-METHYL-PENTANE	1,23E-10	194,02	1,54E-12
3-METHYL-PENTANE	4,97E-12	119,89	1,35E-10
N-HEXANE	2,78E-14	275,02	8,66E-07
METHYLCYCLOPENTANE	1,37E-14	106,58	6,03E-05
CYCLOHEXANE	8,67E-18	74,15	21,23
	3,72E-14	167,09	0,0395
	7,68E-28	10,07	0,02
	1,41E-28	15,50	0,16
	6,60E-29	3,13	0,35
	8,04E-33	0,86	5,41
	2,09E-35	1,15	25,67
	2,90E-35	5,20	102,10
	1,36E-36	2,58	108,87
	6,02E-39	8,44E-02	7,59
	3,33E-41	2,32E-01	228,97
	7,13E-34	8,56E-01	14,08
TRANS-1,3-DIMETHYLOVCLOPENTANE	6,27E-36	9,35E-01	54,53
	4,37E-36	7,22E-01	43,36
	1,68E-43	3,59E-02	211,81
	2,32E-45	1,47E-03	10,31
2 METHYL HEDTANE	2,95E-48	1,25E-03	158,34
	7,62E-60	1,54E-05	243,52
	2,64E-68	1,13E-08	7,32
	5,03E-66	3,63E-09	1,85
	1,96E-55	4,43E-05	207,47
	1,45E-69	4,02E-09	28,01
	4,11E-67	2,49E-09	4,37
	2,96E-71	4,80E-10	15,45
	3,90E-74	1,25E-10	19,40
	3,45E-74	2,99E-10	64,76
	2,91E-//	1,54E-11	19,40
	7,51E-85	7,24E-12	78,93
	6,89E-92	1,69E-14	6,52
	2,09E-89	5,05E-14	37,33
1,2,0,7-1 LINALI DIVONALI HINALENE	9,91E-132	2,13E-26	0,80

Tabla 4.25. Caudales molares de los componentes de las corrientes OVHD, SIDE y BOTTOM.

Nombre del componente	Mass Flow OVHD	Mass Flow SIDE	Mass Flow BOTTOM
ISOBUTANE	176,11	3,30E-18	4,79E-98
N-BUTANE	4762,05	3,75E-09	6,07E-63
2,2-DIMETHYL-PROPANE	384,56	2,13E-06	4,24E-54
2-METHYL-BUTANE	33969,83	725,80	8,16E-33
N-PENTANE	1792,89	25639,37	2,18E-26
CYCLOPENTANE	8,53E-03	1746,35	3,88E-18
2,2-DIMETHYL-BUTANE	9,16E-05	1816,62	9,71E-18
2,3-DIMETHYL-BUTANE	3,53E-08	3036,92	2,48E-12
2-METHYL-PENTANE	1,06E-08	16720,33	1,33E-10
3-METHYL-PENTANE	4,29E-10	10332,19	1,16E-08
N-HEXANE	2,39E-12	23700,35	7,46E-05
METHYLCYCLOPENTANE	1,16E-12	8970,22	5,08E-03
CYCLOHEXANE	7,30E-16	6240,65	1787,05
BENZENE	2,91E-12	13051,95	3,08
2,2-DIMETHYLPENTANE	7,70E-26	1009,39	2,26
2,4-DIMETHYLPENTANE	1,41E-26	1553,56	15,72
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	6,61E-27	313,48	35,42
3,3-DIMETHYLPENTANE	8,06E-31	86,39	542,07
2,3-DIMETHYLPENTANE	2,09E-33	115,47	2571,95
2-METHYLHEXANE	2,91E-33	520,94	10230,69
3-METHYLHEXANE	1,36E-34	258,27	10909,38
3-ETHYLPENTANE	6,03E-37	8,46	760,10
N-HEPTANE	3,34E-39	23,23	22943,51
1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	7,00E-32	84,05	1382,82
TRANS-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	6,15E-34	91,79	5354,68
TRANS-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	4,29E-34	70,84	4257,26
METHYLCYCLOHEXANE	1,65E-41	3,53	20797,62
ETHYLCYCLOPENTANE	2,28E-43	0,14	1012,18
TOLUENE	2,72E-46	0,12	14589,41
3-METHYLHEPTANE	8,70E-58	1,76E-03	27817,52
N-OCTANE	3,01E-66	1,29E-06	836,17
ISOPROPYLCYCLOPENTANE	5,64E-64	4,08E-07	207,60
1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	2,20E-53	4,97E-03	23281,26
N-PROPYLCYCLOPENTANE	1,63E-67	4,51E-07	3143,15
ETHYLCYCLOHEXANE	4,61E-65	2,80E-07	490,38
ETHYLBENZENE	3,14E-69	5,09E-08	1640,29
P-XYLENE	4,14E-72	1,33E-08	2059,65
M-XYLENE	3,67E-72	3,17E-08	6875,41
O-XYLENE	3,09E-75	1,63E-09	2059,65
2-METHYLOCTANE	9,63E-83	9,29E-10	10123,40
N-NONANE	8,84E-90	2,17E-12	836,24
ISOPROPYLCYCLOHEXANE	2,64E-87	6,37E-12	4712,62
1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	1,31E-129	2,81E-24	105,76

Tabla 4.26. Caudales másicos de los componentes de las corrientes OVHD, SIDE y BOTTOM.

Con el objetivo de realizar un estudio comparativo completo, resulta apropiado cotejar los caudales molares de los productos principales obtenidos en la columna DWC, con las especificaciones sobre las que se ha diseñado la columna y que, como se ha comentado en el apartado de resultados anterior, se recogen en la Tabla 4.1.

Así, en las Tablas 4.27, 4.28 y 4.29 se realiza una comparativa entre las especificaciones y los caudales obtenidos – en kmol/h -, para cada componente de interés y por cada corriente de salida de producto.

	2–metilbutano	N-pentano	Benceno
Especificaciones	470,98	24,79	2,66E-15
DWC	470,82	24,84	3,72E-14

Tabla 4.27. Comparativa de los resultados obtenidos frente a las especificaciones OVHD.

	2–metilbutano	N-pentano	Benceno
Especificaciones	9,9	355,43	167,10
DWC	10,05	355,36	167,089

Tabla 4.28. Comparativa de los resultados obtenidos frente a las especificaciones SIDE.

	2–metilbutano	N-pentano	Benceno
Especificaciones	3,09E-12	4,69E-10	0,03
DWC	1,13E-34	3,04E-18	0,039

Tabla 4.29. Comparativa de los resultados obtenidos frente a las especificaciones BOTTOM.

Tal y como se puede observar en estas tablas, las especificaciones se cumplen con bastante precisión. En otras palabras, el rendimiento de la separación, como se presentará en apartados ulteriores, es bastante alto considerando que solo se ha empleado una única columna.

En la Tabla 4.30 se presentan los valores de los rendimientos que se viene mencionando para cada componente de interés, según los parámetros de cálculo que se han comentado para la Tabla 4.15.

	Rendimiento de la separación.
2-metilbutano (FEED/OVHD)	97,90%
N-Pentano (FEED/SIDE)	93,46%
Benceno (FEED/BOTTOM)	99,98%

Tabla 4.30. Rendimientos de la separación – estrategia DWC.

De nuevo, igual que en los resultados expuestos en la configuración en serie, se presentan los consumos energéticos de las columnas que forman parte de la simulación DWC.

	PREHEAT	MAIN
Condensador (KW)	0	51.362,9
Re-hervidor (KW)	0	62.044,6
TOTAL (KW)	113.4	407,5

Tabla 4.31. Consumo de la columna – estrategia DWC.

Respecto a la simulación, como resulta evidente, al haber sustituido el condensador y el rehervidor - que son los equipos que generan el consumo de la columna - en el pre-fraccionador, los valores del consumo para ese caso son nulos. Esto también se cumple de cara a la instalación, ya que se recuerda que la columna PREHEAT se sitúa dentro de la columna MAIN y por ello, el consumo total de la columna es el de MAIN.

Aplicando la relación precio-consumo que ofrece la base de datos de la Eurostat [17] – 0,0982 €/kWh – se ha calculado el coste que supondría, en calidad de energía, la separación con la columna DWC. De nuevo, se debe considerar que este valor se hace referencia al coste del proceso en estado estacionario, sin tener en cuenta el arranque y las paradas de la columna. Es probable, que los costes de estas operaciones distorsionaran cuantiosamente el precio aquí presentado.

	Distribución de columnas en serie
Coste del proceso estacionario (€)	11.136,62€

Tabla 4.32. Coste energético de la columna – estrategia DWC

Al igual que en el caso de las columnas en serie, se ha realizado un estudio económico para la DWC empleando la herramienta *Aspen Economics*. Para emular el caso anterior y poder realizar una comparación fiel, en las tablas siguientes se exponen los resultados de los costes, a modo de resumen – Tabla 4.33 – los costes para los servicios auxiliares necesarios, así como el coste de equipamiento e instalación – Tabla 4.34 y Tabla 4.35, respectivamente – y para terminar se exponen los resultados relacionados con el diseño de las columnas – Tabla 4.36 -, que se comentarán con mayor detenimiento más adelante.

Resumen

Coste Capital Total [€]	17.862.327,59
Coste Total de Operación [€/Año]	18.950.775,86
Coste Total de Utilities [€/Año]	15.613.793,10
Coste de Equipamiento [€/Año]	7.378.103,45
Coste total de la Instalación [€/Año]	10.289.913,79

Tabla 4.33. Resumen de los resultados económicos para la columna DWC.

Servicios auxiliares - Utilities

Nombre	Fluido	Rate	Unidades	Coste por Hora	Unidades
Electricidad		222,52	KW	14,87	€/H
Refrigerante - Freon 12	Refrigerante	8,8E+06	m ³ /H	171,21	€/H
Vapor @100PSI	Vapor	103.106,95	KG/H	1.595,10	€/H

Tabla 4.34. Consumo y coste de los servicios auxiliares.

Equipamiento.					
Nombro	Coste del	Coste de	Peso del	Peso de la	
Nombre	equipo [€]	instalación [€]	equipo [Kg]	instalación [Kg]	
DWC600.PREHEAT-tower	1.950.603,45	2.744.051,72	385.553,97	482.296,72	
DWC600.MAIN-cond	209.741,38	364.568,97	43.635,64	61.274,05	
DWC600.MAIN-cond acumulador	44.051,72	200.603,45	8.799,70	22.462,83	
DWC600.MAIN-reb	279.827,59	482.586,21	48.171,57	72.084,99	
DWC600.MAIN-reflux pump	38.275,86	120.086,21	1.315,42	9.476,46	
DWC600.MAIN-tower	4.855.603,45	6.378.017,24	1.078.553,22	1.276.352,39	

Tabla 4.35. Costes y pesos del equipamiento e instalación.

	MAIN	PREHEAT
Diámetro de las columnas (m)	7,6	5,8

Tabla 4.36. Diámetros de las columnas MAIN y PREHEAT de la DWC.

Como se ha comentado anteriormente, las columnas DWC no presentan en su interior dos columnas, sino que un tabique las divide de manera transversal en una zona de prefraccionamiento y en otra de fraccionamiento o principal. Por tanto, tal y como se ha realizado la simulación, el diámetro total de la columna DWC coincide con el diámetro de MAIN. El diámetro de PREHEAT nos servirá, por tanto, para estimar de manera aproximada la distancia a la que se encuentra el tabique separador de una de las paredes. En el caso que aquí concierne, el tabique se sitúa a 1,83 m de la pared que limita la zona de fraccionamiento.

Se debe considerar que esta estimación no es exacta, y la ausencia de este parámetro de diseño en las DWC deja constancia de lo elemental que resulta la plantilla de simulación que ofrece el programa.

En los apartados anteriores, se han explicado los pasos seguidos para la construcción de la simulación de ambas estrategias, así como los análisis realizados para la optimización de los sistemas diseñados. Además, para cada uno de ellos, se han expuesto los resultados obtenidos en las corrientes de producto y en los consumos de las columnas.

En el siguiente apartado, se realizarán análisis de robustez para estudiar la reacción e influencia que presentan ambas estrategias ante cambios en la alimentación. Seguidamente, se analizarán en conjunto la suma de todos estos resultados y se realizará una comparativa entre los rendimientos de separación obtenidos en la simulación y el rendimiento calculado a partir de las especificaciones. De modo, que se decidirá qué estrategia resulta más conveniente.

5. Comparación de resultados y conclusiones. Impacto medioambiental.

En este apartado se van a comparar los resultados de las simulaciones de cada estrategia, en cuanto al rendimiento de la separación, los parámetros de diseño empleados y el consumo energético de sus respectivos condensadores y re-hervidores. Además, como se ha comentado en apartados anteriores, se ha realizado el estudio de la robustez de cada estrategia frente a cambios de temperatura en la alimentación. Finalmente, se expondrá una comparación de los costes que supone cada columna y se concluirá qué disposición resulta más eficiente.

Comparación de los resultados de la simulación.

El primer resultado que se va a cotejar tiene es el porcentaje de rendimiento de la separación. Si bien es cierto que en los apartados referentes a los resultados se han expuesto estos rendimientos, a continuación, se van a comparar estos valores con los rendimientos que debían obtenerse según la especificación. Para ello, se recogen estos valores en la Tabla 5.1, habiendo calculado el rendimiento de la separación de las especificaciones de la misma manera que se ha comentado para el caso en serie y la DWC.

	Rto. especificaciones	Rto. SERIE	Rto. DWC
2-metilbutano	97,94%	97,83%	97,90%
N-pentano	93,48%	93,59%	93,46%
Benceno	99,97%	99,97%	99,98%

Tabla 5.1. Comparativa de rendimientos de la separación.

Los resultados de estos rendimientos para la separación del 2-metilbutano, como se puede apreciar, son ligeramente menores que los que requiere la especificación. Sin embargo, aun en esta circunstancia, el rendimiento de la DWC para este componente es 0,07% mayor que en el caso en serie; no siendo así para el N-pentano, cuyo rendimiento es superior para las dos columnas. Naturalmente, ambos hechos están relacionados y su explicación reside en la dificultad de la separación que existe entre el 2-metilbutano y el N-pentano, lo que provoca que el segundo arrastre cierta cantidad del primero por la corriente lateral. Es decir, para que el rendimiento del 2-metilbutano fuera superior, era necesario reducir el rendimiento del N-pentano y viceversa.

Para el benceno, los rendimientos en ambas estrategias resultan muy similares, prácticamente con una diferencia de un 0,01%.

Cabe destacar que los resultados aquí comentados sobre la facilidad (o dificultad) de la separación cumplen con lo predicho anteriormente, gracias a los diagramas Txy y Pxy expuestos en el apartado 4.2.

Una cuestión remarcable es que, siendo estos resultados muy similares entre los dos casos, la distribución en serie ha requerido dos columnas de destilación, con 100 y 120 etapas respectivamente, mientras que la DWC ha conseguido la separación con una única columna de 120 etapas. Para acercar este hecho a términos más tangibles, ya que las etapas son elementos teóricos, habría que traducir el número de etapas a número de platos mediante el empleo del coeficiente de eficiencia del plato. Este coeficiente viene calculado en el apartado 2.1.5 y presenta un valor de 64,61%. Aplicando este porcentaje al número de etapas calculadas por el simulador, se obtienen los platos reales que se necesitan. Estos valores se recogen en la Tabla 5.2.

SERIE		DWC
RD1	RD2	MAIN
147	187	187

Tabla 5.2. Número de platos reales de cada columna.

En el caso de la columna DWC solo se ha expuesto el número de platos de la columna principal (MAIN), ya que la simulada como PREHEAT solo correspondería al número de platos que presentan la división por el tabique. El número de platos divididos sería de117.

Lo que se concluye con estos resultados es que la cantidad de platos necesaria para la separación cuando se emplea la distribución en serie es de 532 entre las dos columnas. Con poco más de la mitad de los platos para las columnas en serie, es posible realizar esta misma separación si se emplea una DWC. Este hecho es importante, sobre todo, a nivel de instalación, puesto que en términos logísticos resulta más sencillo instalar una columna DWC. Además, un número de platos muy alto provoca un aumento en el consumo de los equipos de la columna. Por un lado, el condensador requerirá de mayor potencia para evitar que la columna se seque por la falta de líquido condensado y, por otro, el re-hervidor deberá generar más vapor para que no ocurra el efecto contrario, que se inunde la columna.

Otro hecho que se debe considerar es que los 532 platos se reparten en dos columnas, que tienen cada una un condensador y un re-hervidor. En cambio, la columna DWC tiene los 120 en una única torre y, por tanto, presenta la mitad de los equipos. Como era de esperar por lo comentado en este párrafo y en el anterior, el consumo de la estrategia en serie ha sido mayor

el de la columna DWC. En la Tabla 5.3 se recogen los resultados del consumo energético total para cada caso, así como el ahorro que supone la DWC.

Consumo SERIE	Consumo DWC
139.923,4	113.407,5

Ahorro: 18,95%

Tabla 5.3. Comparación de los consumos totales de condensador y re-hervidor.

Esta reducción en el consumo, de casi un 20% es ya un claro ejemplo del ahorro energético que suponen las columnas DWC. Hay que reparar en que, además de los motivos relacionados con el número de platos y el número de columnas, otra razón por la cual se ahorra energía es que la sección de pre-fraccionamiento – simulada como PREHEAT – está acoplada a la zona de fraccionamiento y que ambas constituyen la columna principal – simulada como MAIN -. Por esta razón, es evidente que el consumo va a ser menor, aunque existan dos zonas de separación dentro de la columna.

El ahorro energético, aparte de influir en los aspectos económicos que se comentan más adelante, genera un gran impacto positivo a escala medioambiental. La disminución de este consumo reduce la enorme huella ecológica que producen este tipo de separaciones cuando se realizan con la disposición tradicional. Este aspecto es fundamental en la industria actual, ya que el endurecimiento de las leyes de gestión ambiental – ISO 14000 – obligan a muchas plantas químicas y refinerías a remodelar sus sistemas de producción para que cumplan con la nueva normativa. Por otro lado, esta disminución en el consumo del condensador y rehervidor afecta a los caudales de los servicios auxiliares empleados. La reducción de la potencia del condensador va ligada a una disminución del caudal de agua de refrigeración con la que sucede la transferencia de calor. De la misma manera ocurre con el vapor destinado al re-hervidor.

Comparación del análisis de robustez.

Un aspecto a tener en cuenta es la respuesta de cada estrategia ante cambios en la alimentación. En este proyecto, se ha estudiado la variación de los caudales de salida de los cortes cuando existe un cambio en la temperatura de la corriente de alimentación. Debido a que para realizar optimizaciones de elementos internos en las columnas DWC se requieren programas externos a Aspen, únicamente se ha tratado el caso comentado.

Para realizar este estudio, se ha ejecutado un análisis de sensibilidad en cada estrategia. Los resultados gráficos de estos análisis se reflejan en las Figuras 5.1 y 5.2. Los resultados numéricos se recogen en el Anexo VI.



Figura 5.1. Efecto de la variación de la temperatura en los caudales de salida para las columnas en serie.



Figura 5.2. Efecto de la variación de la temperatura en los caudales de salida para la columna DWC.

En este sentido, de nuevo, las columnas DWC presentan una clara ventaja con respecto a las columnas en serie. Como se puede apreciar, en ambas gráficas, la variación de la temperatura es una alteración que afecta a los caudales de salida de los cortes y, por tanto, al rendimiento de la separación. Sin embargo, las columnas en serie generan resultados muy inestables para dos componentes, el 2-metilbutano y el N-pentano, mientras que la columna DWC solo presenta esta inestabilidad en la corriente de salida del Benceno. Naturalmente, es conveniente instalar aquel equipo que genere menor inestabilidad y, en este caso, la columna DWC vuelve a mostrar cierta superioridad frente a las columnas en serie. Además, la columna DWC ofrece un intervalo de relativa estabilidad para el benceno, entre 24°C y 36°C. Esto ofrece un rango donde se puede trabajar sin demasiada desviación y facilita el acondicionamiento de la alimentación.

Para corregir este desajuste se puede tratar la alimentación previamente, haciendo que esta atraviese un tren de intercambiadores de calor que la sitúe en la temperatura óptima. Pudiendo instalar estos equipos en ambas configuraciones, es preferible hacerlo en la DWC puesto que el consumo global de la combinación tren – columna siempre será menor para este caso que para la estrategia en serie.

Comparación de costes.

En cuestión de costes, también se puede apreciar un ahorro importante en las DWC respecto de las columnas en serie, gracias a la reducción del consumo energético y al coste de instalación.

En la sección de resultados, se han presentado tablas donde se recogen los costes de equipos e instalación (CAPEX) y los costes de las *utilities* (OPEX), además de una tabla resumen con todos los costes.

Como es de esperar, al instalar una única columna en el caso DWC, los costes de equipamientos y de instalación serán menores que para las columnas en serie. Este ahorro ocurre debido a que hay menos equipos anexos a la columna DWC: solo hay un condensador, un acumulador, un re-hervidor y una bomba de impulsión de reflujo; mientras que en la disposición de columnas en serie hay dos unidades de cada tipo. Aunque el precio de los equipos, por unidad, es menor en las columnas en serie, la suma de ambos costes supera al de la columna DWC. De igual manera ocurre con el coste de la torre en sí.

Nótese que el coste de la columna DWC se ha calculado como la suma del coste de MAIN más el coste de PREHEAT. Pese a que forman parte de la misma columna y, en principio, se podría pensar que el coste DWC sería igual al coste de MAIN, la interpretación que se ha dado en este trabajo al coste de PREHEAT que presenta el diseño y la instalación de un

tabique divisorio y la partición de platos correspondiente. Por este motivo, el coste total de DWC resulta como la suma de ambos.

En la Tabla 5.4, aparecen los costes de la estrategia en serie en total – habiendo sumado los costes de los dos equipos de cada tipo – y los costes de la columna DWC.

	SERIE (total)	DWC	Ahorro
Condensador	565.344,83€	209.741,38€	355.603,45 €
Acumulador	108.362,06 €	44.051,72€	64.310,34 €
Re-hervidor	284.310,34 €	279.827,59€	4.482,75€
Bomba de reflujo	50.000,00€	38.275,86€	11.724,14 €
Torre	7.714.396,55€	6.806.206,90€	908.189,65 €
Ahorro total			1.344.310,33 €

Tabla 5.4. Comparación y ahorro de costes de equipamiento.

Como se expone en esta tabla, solo con el coste de adquisición de equipamiento se aprecia un ahorro de más de 1 millón de euros. Puesto que los costes de adquisición del equipo van directamente relacionados con los costes de instalación, también se va a mostrar una tabla donde se recoge la comparativa de estos gastos (Tabla 5.5). El número de columnas que se deben instalar para el caso DWC es menor que para el caso en serie, así como el número de equipos asociados a cada torre. Por lo tanto, los costes de instalación de la DWC serán menores que para el caso en serie, generando un ahorro importante.

Igual que en la tabla anterior, el coste de instalación de la DWC se ha tomado como la suma del coste de PREHEAT y de MAIN.

	SERIE (total)	DWC	Ahorro
Condensador	905.948,28 €	364.568,97	541.379,31 €
Acumulador	370.344,83 €	200.603,45	169.741,38 €
Re-hervidor	591.379,31 €	482.586,21	108.793,10 €
Bomba de reflujo	192.327,58 €	120.086,21	72.241,37 €
Torre	10.053.362,07 €	9.122.068,96 €	931.293,11 €
Ahorro total			1.823.448,27 €

Tabla 5.5. Comparación y ahorro de costes de instalación.

De nuevo, los costes de instalación vienen acompañados de un ahorro recalcable para el caso de la DWC, donde se puede apreciar una reducción del valor total de aproximadamente 2 millones de euros al año.

En definitiva, queda demostrado que el CAPEX de la parte de *hard cost* – equipos e instalación – resulta más económica en las DWC que en las dos columnas en serie.

Si extendemos este análisis comparativo a los costes de servicios auxiliares, el resultado vuelve a ser positivo para las DWC.

Como se ha comentado en la Tabla 5.3, el consumo de las columnas en serie es mayor que el del DWC. Esto se debía a que en las DWC se aprovechaba el uso de un condensador y un re-hervidor para la sección de pre-fraccionamiento y fraccionamiento. El ahorro de equipos también genera un impacto visible en el coste de las *utilities*. Si se emplean menos condensadores, se necesitará menos caudal de agua de refrigeración y refrigerante y generará menos gasto económico. También es aplicable en el caso del re-hervidor y el vapor producido, donde además este ahorro toma especial importancia puesto que el vapor es más caro que el agua refrigerada.

El ahorro en los servicios auxiliares no es solo importante para la reducción del gasto total del Splitter, sino que también juega un papel fundamental en el impacto medioambiental. La eficiencia energética con la que resuelve la separación la columna DWC se proyecta en un consumo menor de *utilities*, lo que quiere decir que se consume menos agua, tanto de refrigeración como vaporizada y se consume, también, menos potencia eléctrica. El efecto que tiene esto sobre el medio ambiente es positivo, ya que implantando las columnas DWC en los módulos de Splitter de nafta se estaría consiguiendo un proceso con mayor sostenibilidad, según los resultados obtenidos en este proyecto.

Para acompañar toda esta explicación, en la Tabla 5.6, se muestra la comparativa entre los costes de los servicios auxiliares para los dos casos. Estos valores se han calculado suponiendo que la planta trabaja en régimen continuo durante todo el día, contando con las paradas por mantenimiento y limpieza que puedan surgir a lo largo del año: 24 horas de servició durante 360 días al año.

	SERIE		DWC	
	Caudal	Coste total	Caudal	Coste total
Electricidad	257,47 KW	148.608,00 €	222,52 KW	128.476,80 €
Agua de refrigeración	2.660,29 m ³ /H	625.708,80 €	-	-
Refrigerante - Freon 12	664.886,17 KG/H	928.022,40 €	8,80E+06	1.479.254,40 €
Vapor @100PSI	131.048,47 KG/H	17.516.476,80 €	103.106,95 KG/H	13.781.664,00 €
	Ahorro total:		3.829.42	0,80 €

Tabla 5.6. Comparativa de costes de los servicios auxiliares.

Para el coste de los servicios auxiliares, se puede observar que el coste de los refrigerantes - sea agua o fluido refrigerante - es más caro en el caso DWC. Esto se debe a que en el caso en serie se ha repartido el proceso de refrigeración entre dos fluidos, agua y refrigerante, siendo más caro el segundo. Además, el refrigerante de la DWC es un 60% más caro que el

de las columnas en serie, ya que debe tratarse de un fluido de refrigeración con mayor coeficiente de intercambio calorífico y, por tanto, más efectivo que el refrigerante de las columnas en serie. El hecho de que un fluido refrigerante presente mayor efectividad en su cometido, naturalmente, encarece su precio por hora. A pesar de este hecho, el ahorro es especialmente llamativo, puesto que ronda los 4 millones de euros al año.

Para concluir con este apartado, se presenta una tabla resumen donde se muestra el ahorro que generan las DWC, en el CAPEX, el OPEX y el TOTEX, siendo este último la suma de los dos anteriores. Los valores que se presentan en la Tabla 5.7 son los extraídos del simulador, sin tener en cuenta el *soft cost* en la parte de coste de capital (CAPEX) ni el precio de la mano de obra en el coste operacional (OPEX), ya que son estimaciones que el programa ha realizado y han quedado indeterminadas.

		SERIE	DWC
CAPEX	Equipos e instalación	20.835.775,85€	17.668.017,25€
OPEX	Servicios auxiliares	23.614.568,97 €	17.851.704,96€
ΤΟΤΕΧ		40.054.591,85 €	33.057.412,45€
Ahorro total:		6.997.179,40 €	

Tabla 5.7. Resumen de la comparativa de precios.

El ahorro final de la instalación de una DWC en un sistema de Splitter de nafta ascendería prácticamente a los 7 millones de euros anuales.

Debe tenerse en cuenta que este valor discrimina el *soft cost* comentado anteriormente, así como el coste de la mano de obra.

En conclusión, después del estudio de simulación y los análisis realizados, es innegable que la instalación de columnas DWC en los procesos tradicionales supone un gran avance, que se ve reflejado tanto en el ahorro económico como en la disminución del impacto ambiental negativo que ejercen las refinerías sobre el medio ambiente. Se espera que, con este estudio, queden reafirmados los buenos resultados que ofrecen estas columnas, gracias a su tabique intermedio, y la eficiencia en la que se traduce el hecho de aprovechar la potencia de los equipos para la separación de una mezcla dentro de la misma columna. Una solución que a priori puede parecer sencilla – no siendo así en el caso de su simulación y diseño – como la adición de un tabique que divide en dos zonas de separación la columna, ha terminado siendo un importante avance en el terreno de la eficiencia energética para la industria del refino y la petroquímica.

6. Aportaciones del proyecto y líneas futuras.

En la actualidad, el estudio de las columnas DWC está aumentando su peso considerablemente dentro de la comunidad científica e industrial. En algunas páginas de divulgación científica, como *Science Direct*, se observa este aumento progresivo: en 2017 se publicaron alrededor de 58 artículos relacionados con las columnas DWC en la plataforma mencionada, mientras que en 2018 el número asciende a 42 en lo que llevamos de año. Sin embargo, comparando estos valores con los de los artículos relacionados con las columnas en serie – 2,227 artículos en 2018 – se puede observar que los estudios de las DWC siguen siendo escasos.

Es, por tanto, que la realización de este trabajo aporta una nueva línea de investigación al haber simulado la columna con Aspen Plus y al haber expuesto resultados, tanto de caudales como de coste, de manera explícita. Como se ha comentado en apartados anteriores, la optimización de las columnas DWC realizada con las herramientas que ofrece este simulador es inadecuada [22] por el simple hecho de que aplica la optimización como si se tratasen de dos columnas separadas. En el caso aquí presente, el proceso de optimización se ha llevado a cabo mediante un profundo y complejo estudio del funcionamiento de estas columnas, a través de artículos donde se explicaba la función del tabique divisor. La profunda comprensión de la dinámica interna que adquiría esta columna ha sido la clave para poder descifrar los mejores métodos para reducir costes y aumentar, al mismo tiempo, la eficacia.

Se espera que las reflexiones que se han llevado a cabo para mejorar la eficiencia y reducir el coste, y que vienen aquí recogidas, sirvan de guía para futuras simulaciones sin necesidad de recurrir a programas externos.

El estudio de las columnas DWC en simuladores resulta relativamente innovador. En el trabajo que aquí se presenta, las dos únicas variables que han guiado su desarrollo han sido el cumplimiento de las especificaciones y la mejora del consumo energético con respecto a la configuración tradicional. En aras de continuar desarrollando este proyecto, aquí se recogen algunas líneas de investigación futuras, que tienen el objetivo de estudiar la versatilidad de la columna para poder implementarla en otros procesos de la industria.

Una primera posibilidad para la ampliación de este proyecto podría ser el estudio de la influencia de la caída de presión a lo largo de la columna en las corrientes de salida. De esta forma, se podría conseguir un diseño más próximo a los sistemas reales puesto que, en las columnas de destilación sí existe esta caída de presión. El motivo por el cual no se ha tenido en cuenta este aspecto en las simulaciones ha sido la dificultad para hacer que las presiones

de un plato de la columna MAIN y otro plato de la columna PREHEAT, situados a la misma altura métrica, presentaran la misma presión.

Otro posible camino que seguir para continuar con el estudio de las DWC es la implementación de pumparounds en la columna. Un pumparound es un método de recirculación externa de las columnas, de tal manera que se extrae cierto caudal de uno de los platos y se introduce en otro. Esta alternativa resulta interesante, ya que podría ayudar a mejorar el rendimiento de la separación disminuyendo el número de platos necesarios. Una implementación de pumparounds planteará frecuentes problemas de convergencia, lo que generará previsiblemente que el balance de materia no se cumpla. En este sentido, la simulación de pumparounds requiere de medios materiales más potentes, y mayor tiempo de investigación.

Finalmente, habiendo analizado la influencia que presenta la temperatura de la alimentación en la separación, se podría plantear la instalación de un conjunto de trenes de calor para preparar la alimentación, llevándola a una temperatura que asegure un buen rendimiento de la separación y eliminando las variaciones de carácter indeseado que se puedan producir. En la misma línea, también es interesante comprobar las posibilidades que existen para reducir estas alteraciones dentro de la propia columna, sin necesidad de emplear equipos externos.

Otros estudios han llevado la implementación de columnas de pared divisoria a separaciones que presentan reacciones químicas [9], obteniendo resultados muy favorables en los que se ha conseguido suprimir el efecto de las perturbaciones provocadas por la composición, así como reduciendo de nuevo el consumo.

Cabe destacar que los módulos de simulación para esta clase de columnas no están completamente desarrollados, si bien es cierto que la mayoría de los estudios realizados sobre este tema se han desarrollado en plantas piloto. En el caso del programa de simulación que se ha empleado, Aspen Plus, la plantilla DWC no trabajaba con una columna de tabique divisorio propiamente dicho, sino que hacía uso del formato que presentan las columnas Petlyuk para este propósito. Este método, naturalmente, presenta ciertas carencias. La principal de todas ellas es que la estimación y situación dentro de la columna del tabique divisorio no queda totalmente especificada, sino que sus dimensiones deben estimarse en función del número de etapas que presenta el bloque PREHEAT y su posicionamiento se realiza mediante una relación de semejanza entre los diámetros de ambas columnas, que se obtienen como resultado de la simulación.

En definitiva, al ser un equipo de destilación relativamente nuevo, existe un amplio abanico de posibilidades para continuar con la mejora de los procesos de simulación de estas columnas, desde el desarrollo y mejora de los elementos de simulación, hasta nuevos caminos de simulación que seguir para obtener resultados que se acerquen más a la realidad.

7. Planificación temporal y presupuesto.

Los costes que conforman el presupuesto de este trabajo de simulación se desglosan, principalmente, en tres: coste de personal, coste material y costes indirectos. A continuación, se explicará el concepto de cada uno de ellos y se presentará una tabla con el coste total.

- <u>Coste de personal</u>: valor económico del tiempo invertido por el Tutor y la Alumna en la realización del trabajo. Para el cálculo de este coste, se ha convenido que el coste de las horas del tutor, las tratarse de un ingeniero de calidad Senior, sea 100 €/h. Para la Alumna, considerado como un ingeniero Junior, el coste es de 40 €/h. Además, el número de horas dedicadas por el Tutor se ha calculado como el 10% de las horas laborables que ha empleado la Alumna, puesto que al primero se le ha asignado la tarea de supervisión del proyecto.

Con todo, el resultado de este coste es:

	Tiempo dedicado (h)	Coste por hora (€/h)	Total	
Alumna	1232	40	49.280	
Tutor	123,2	100	12.320	
TOTAL		61.600 €		

Coste de personal

Tabla 7.1. Coste de personal para la realización de este trabajo.

- <u>Coste material</u>: relacionado con el precio de la licencia, coste de los equipos empleados y calculado a partir de las horas de utilización.

Costes materiales		
Licencia Académica Aspen Plus V10.	2.000 €	
Coste ordenador	1.100€	
TOTAL	3.100€	

Tabla 7.2. Desglose de los costes materiales.

- <u>Costes indirectos</u>: se consideran los costes de los servicios auxiliares, necesarios para el desempeño del trabajo – coste de la contratación de un servicio de internet y coste de la electricidad –. Se ha calculado, para cada caso, como una ponderación sobre el coste directo

total, este es, la suma del coste de los equipos y del personal. La ecuación empleada es la siguiente:

• Ponderación_i = $\frac{Coste Utility durante el tiempo que ha sido empleada}{Coste directo al que va directamente asociado}$

-

Ecuación 7.1.

Donde i es el servicio auxiliar correspondiente.

Así pues, la ponderación para el servicio de internet es 0,16 y el correspondiente para el consumo eléctrico es de 0,18. En definitiva, se agruparán los costes indirectos como el cálculo del <u>20% del coste directo total.</u>

El presupuesto total del trabajo será la suma de los tres costes mencionados. El resultado se presenta en la tabla 7.3.

Coste de personal	61.600€
Coste material	3.100 €
Coste indirecto	620 €
Coste TOTAL	65.320 €

Tabla resumen de costes.

Tabla 7.3. Recopilación de costes y coste total.

Para concluir este apartado, se adjunta el Diagrama de Gantt donde queda representado el desarrollo del trabajo y tiempo que ha consumido cada tarea.


8. Bibliografía.

[1] Kraus, R. (2012). *Capítulo 78 Petróleo y gas natural*. Madrid: Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSHT), pp.2-10.

[2] Da Silva, V., Reboucas, M., Salles, A., Pimentel, M., Pontes, M. and Pasquini, C. (2015). *Determination of naphtha composition by near infrared spectroscopy and multivariate regression to control steam cracker processes. Fuel Processing Technology*, 131, pp.230-237.

[3] Galán Casado, S. (2015). Apuntes de Operaciones de Separación por Transferencia de Materia I. 2nd ed. Madrid: Universidad Politécnica de Madrid.

[4] Tdx.cat. (2018). [online] Disponible en: https://www.tdx.cat/bitstream/handle/10803/6448/05AM05de09.pdf [Visitado el 8 Feb. 2018].

[5] Valiente-Barderas, A. (2018). *Historia de la destilación. Antonio valiente-barderas.pdf*. [online] Scribd. Disponible en: https://es.scribd.com/document/241188792/HISTORIA-DE-LA-DESTILACION-ANTONIO-VALIENTE-BARDERAS-pdf [Visitado el 12 mayo 2018].

[6] Erwin, D. (2014). Industrial chemical process design. New York: McGraw-Hill Education.

[7] Mehl, A., Nascimento, F., Falcão, P., Pessoa, F. and Cardozo-Filho, L. (2011). Vapor-Liquid Equilibrium of Carbon Dioxide + Ethanol: Experimental Measurements with Acoustic Method and Thermodynamic Modeling. *Journal of Thermodynamics*, 2011, pp.1-11.

[8] Liu, Y., Chang, A. and Pashikanti, K. (n.d.). Petroleum refinery process modeling.

[9] Segovia - Hernández, G., Barroso - Muñoz, O., Hernández - Escoto, H. and Hernández, S. (2010).Columna de Destilación de Pared Divisoria: Caso Reactivo. *Revista Enlace Químico*.

[10] Bhargava, M., Kalita, R. and Gentry, J. (2017). Dividing wall column applications in FCC naphtha splitter columns. *Hydrocarbon Processing*, [online] septiembre 2017. Disponible en: http://www.hydrocarbonprocessing.com/magazine/2017/september-2017/special-focus-refining-technology-developments/dividing-wall-column-applications-in-fcc-naphtha-splitter-columns [Visitado el 13 noviembre 2017].

[11] LG Chem, Ltd. (2018). Dividing Wall Distillation Column. US 8.845.864 B2.

[12] MONTZ Trennwandkolonnen - Montz. [online] Montz.de. Disponible en: http://montz.de/httpmontzdeprodukte/montz-trennwandkolonnen/ [Visitado el 6 Mar. 2018].

[13] Peng, D. and Robinson, D. (1976). A New Two-Constant Equation of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1), pp.59-64.

[14] Mathias, P., Klotz, H. and Prausnitz, J. (1991). Equation-of-State mixing rules for multicomponent mixtures: the problem of invariance. *Fluid Phase Equilibria*, 67, pp.31-44.

[15] Döring, R., Knapp, H., Oellrich, L., Plöcker, U. and Prausnitz, J. (1990). Vapor-Liquid Equilibria for Mixtures of Low Boiling Substances. VI.

[16] Martín Rubio, I. y Quevedo Cano, P. (2011). *Manual de economía y gestión de empresas en ingeniería*. 1^{er} ed. Cizur Menor: Aranzadi.

[17] Appsso.eurostat.ec.europa.eu. (2018). [online] Disponible en: http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/show.do?dataset=nrg_pc_205&lang=en [Visitado el 10 junio 2018].

[18] Nguyen, T., Rouzineau, D., Meyer, M. and Meyer, X. (2016). Design and simulation of divided wall column: Experimental validation and sensitivity analysis. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 104, pp.94-111.

[19] Rakshit, P. (2018). Simulation studies of Naphtha Splitter unit using Aspen Plus for improved product quality.

[20] Rangaiah, G., Ooi, E. and Premkumar, R. (2009). A Simplified Procedure for Quick Design of Dividing-Wall Columns for Industrial Applications. *Chemical Product and Process Modeling*, 4(1).

[21] Arora, S. (2014). *Simulation study of divided wall distillation column*. Licenciatura. National Institute of Technology Rourkela.

[22] Dejanović, I., Matijašević, L. and Olujić, Ž. (2010). Dividing wall column—A breakthrough towards sustainable distilling. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 49(6), pp.559-580.

[23] U-Cursos. (2018). Material Docente: ME43B-1 Transferencia de Calor. [online] Disponible en: https://www.u-cursos.cl/ingenieria/2008/1/ME43B/1/material_docente/bajar?id... [Visitado el 2 junio. 2018].

Anexos

Anexo I. Tipos de re-hervidor. Diferencias entre Kettle y Termosifón.

Los re-hervidores son equipos similares a los intercambiadores de calor que, conectados a la zona inferior de una torre de destilación, ofrecen el calor necesario para tornar la corriente líquida que entra del fondo de la columna en vapor, la cual se devuelve a la columna para continuar con la separación.

Estos equipos pueden presentar diferentes formas [21], así, por ejemplo, los fraccionadores pequeños empleados en las plantas piloto suelen emplear una camisa en el fondo de la columna (Figura 1), puesto que la carga térmica a intercambiar no es muy alta. Por este mismo motivo, la superficie de transferencia de calor para estos casos es pequeña y la capacidad de generación correspondiente también lo es.

Una variación que proporciona una superficie de intercambio mayor es el intercambiador de calor tubular interno, que se construye en el fondo de la columna. Sin embargo, presenta un inconveniente importante, y es que su limpieza obliga a cancelar la operación de destilación. Además, obliga a aumentar la altura del fondo de la columna. En la Figura 2 se puede observar un esquema de este tipo de re-hervidores.





Figura 1 Esquema de una columna con re-hervidor de camisa

Figura 2. Esquema de una columna con re-hervidor interno.

Para instalaciones de mayor envergadura, se suelen emplear re-hervidores externos, que acostumbran a ser intercambiadores de carcasa y tubos. Estos intercambiadores presentan diferentes variedades y son los más utilizados en industria. Los intercambiadores de carcasa y tubos están formados por un haz de tubos que conduce uno de los fluidos y una carcasa, o envolvente, normalmente cilíndrica, por la cual circula un segundo fluido con el que ocurre el intercambio calorífico. Estos intercambiadores tienen aplicación en una amplia variedad de intercambios térmicos entre dos fluidos, incluyendo aquellos intercambios en los que ocurre un intercambio de fase.

Con respecto al diseño de estos intercambiadores, presentan deflectores (Figura 3). Se tratan de segmentos circulares, perforados para dejar pasar los tubos, que bloquean parte de la sección transversal para el fluido en la carcasa e inducen en éste un movimiento de dirección

cambiante. De esta manera, el flujo se convierte en una combinación de flujos paralelos y cruzados, con respecto al haz de tubos, que tiene como efecto aumentar el coeficiente de transferencia de calor.



Figura 3. Representación esquemática de un deflector.

Se pueden diferenciar entre varios tipos de cabezales y carcasas, pudiendo combinar estos de diversas maneras. En particular, por ser los más frecuentados a nivel industrial, se comentarán a continuación tres tipos:

a) <u>Intercambiador 1-1:</u> Un paso por la carcasa, un paso por los tubos. Estos pueden emplearse en flujos a contracorriente.

b) <u>Intercambiador 1-2:</u> Un paso por la carcasa, dos pasos por los tubos. El haz de tubos presenta una subdivisión en dos partes, permitiendo que el fluido retorne, presentando entrada y salida por el mismo terminal. En respuesta, una parte del haz estará en contracorriente, mientras que el resto del haz fluirá en la dirección que el fluido de la carcasa.

c) <u>Evaporador tipo Kettle</u>: Se trata de un haz de tubos sumergido que se calienta, por ejemplo, mediante el empleo de un vapor de condensación. El fluido que empapa los tubos se evapora, por ebullición. La carcasa está considerablemente expandida para dejar espacio para separar el vapor del líquido.

A continuación, se presentan dos figuras – Figura 4 y Figura 5 – donde podemos encontrar un ejemplo de los dos primeros intercambiadores de carcasa y tubos comentados anteriormente. El evaporador tipo Kettle se comentará más adelante.



Figura 4. Esquema de un intercambiador 1-1.



Figura 5. Esquema de un intercambiador 1-2.

Además de los dos tipos de intercambiadores genéricos comentados anteriormente, los dos tipos más importantes y que merecen especial atención debido al enfoque que presenta este trabajo, son el re-hervidor tipo Kettle y el Termosifón, pudiendo discriminar estos últimos entre horizontales y verticales. A continuación, se explicará brevemente cada uno de los intercambiadores comentados.

- Re-hervidores tipo Kettle. También conocidos como pailas o marmitas. En estos equipos, el fluido de calentamiento circula por el interior de los tubos, mientras que la ebullición ocurre por la carcasa. Estos equipos presentan un espacio extra en la carcasa, donde se separa el líquido y el vapor de manera que el vapor puro puede recircularse a la torre y el líquido, que se encuentra en equilibrio con este vapor, sale del re-hervidor como producto de fondo. Al generarse un líquido y un vapor que presentan la misma composición y que, por lo tanto, están en equilibrio, estos equipos se consideran como una etapa teórica más dentro de la columna.

Generalmente, presentan la misma estructura que los intercambiadores 1-2. Un ejemplo esquematizado de este tipo de intercambiadores es el que puede observarse en la Figura 6.



Figura 6. Esquemas de un re-hervidor tipo Kettle.

- Re-hervidores tipo Termosifón horizontal. El fluido de calentamiento circula por la zona interna de los tubos, mientras que la ebullición ocurre por la carcasa, de la misma manera que ocurre en el intercambiador anterior. Sin embargo, no posee el espacio extra para la separación, de forma que el caudal vuelve a la columna como una mezcla de líquido y vapor. En el espacio que queda por el fondo de la columna, bajo el último plato, es donde se produce la separación. Estos intercambiadores suelen presentar una estructura similar que los intercambiadores 1-2.



Figura 7.1. Esquema termosifón horizontal. Circulación Directa.

Figura 7.2. Esquema termosifón horizontal. Circulación Natural.

- Re-hervidores tipo Termosifón vertical. Es el tipo de re-hervidor más implementado en los procesos modernos de destilación, siendo similar que los intercambiadores de tipo tubo y carcasa, pero con la configuración vertical. El fluido calefactor circula por el exterior de los tubos en contracorriente con el fluido a evaporar, que fluye por el interior de los tubos. En esta clase de equipos, también se devuelve a la torre una mezcla de líquido – vapor que se separa, posteriormente, en el espacio que queda bajo el último plato. En este caso, este tipo de intercambiadores presentan una configuración similar a los intercambiadores del tipo 1-1.





Figura 8.1. Esquema termosifón vertical. Circulación Directa.

Figura 8.2. Esquema termosifón vertical. Circulación Natural.

Los intercambiadores tipo termosifón, tanto verticales como horizontales, tienen dos formas de circulación, tal y como se puede apreciar en las figuras 7.1, 7.2, 8.1 y 8.2. La circulación directa, o en un paso, ocurre cuando el líquido del último plato de la torre se envía directamente al re-hervidor, donde se vaporiza parcialmente, mientras que la mezcla líquido-vapor que vuelve a la torre se separa en el fondo de la columna. De esta manera, el producto de fondo está constituido por el líquido que se obtiene en el termosifón, que está a su vez en equilibrio con el vapor generado. En definitiva, los termosifones que funcionan con circulación directa – Figuras 7.1 y 8.1 – se comportan como una etapa más o, bien, como un plato teórico.

Por otra parte, aquellos termosifones que circulan de manera natural mezclan el líquido del último plato de la torre con el líquido procedente del re-hervidor en el fondo de la columna. De esta forma, tanto el producto de fondo de la destilación como el líquido que se recircula al re-hervidor estarán constituidos por esta mezcla. Por este motivo, los termosifones que operan con este tipo de circulación – Figuras 7.2 y 8.2 – no se consideran como un plato teórico, al contrario que los anteriores, ya que el producto de fondo de la columna es una mezcla que no se encuentra en equilibrio con el vapor generado.

En definitiva, la diferencia principal y que concierne a este trabajo, que existe entre el rehervidor tipo Kettle y el Termosifón es que los primeros siempre se consideran como una etapa teórica y, para el caso del termosifón, se vuelve necesario un análisis del tipo de circulación que se da por los tubos de dicho equipo para concretar si se genera un equilibrio líquido-vapor. En tal caso, sí se consideraría una etapa de equilibrio.

Anexo II. Explicación de la regla de la palanca. Cálculo de la fracción vaporizada y fracción líquida de una mezcla.

La regla de la palanca es un método de cálculo gráfico comúnmente empleado para la determinación de la composición química de una mezcla en equilibrio, a cualquier temperatura y presión, en un sistema binario. Para poder aplicar la regla de la palanca, es necesario que el punto de mezcla se encuentre en la región bifásica del diagrama, es decir, en la región en la que existe un equilibrio líquido-vapor.

Para la explicación de este método, supóngase el diagrama Txy de la Figura 9. Se tiene una mezcla binaria y bifásica de N-pentano y, componentes relevantes en el caso de estudio al que se ha adjuntado el anexo en cuestión. El punto de mezcla se ha representado en el diagrama bajo la letra M.





Es necesario recordar que, al tratarse de un diagrama Txy, la curva verde se corresponde al vapor saturado y la curva azul es la de líquido saturado. Las explicaciones pertinentes a los diagramas Txy vienen recogidas en el aparatado 2.1.

Por lo tanto, el objetivo de este método es determinar cuál es la fracción de mezcla que se encuentra en estado vapor y cuál en estado líquido. Para ello, se traza una horizontal por el punto M, y se prolonga hasta el corte con las dos curvas de saturación. Puede observarse que la línea trazada, que aparece en la Figura 9, se puede subdividir en dos segmentos, tomando como punto central el punto de mezcla M: el segmento \overline{LM} y el segmento \overline{MV} .

Planteando las ecuaciones del balance de materia pertinentes – Ecuación 1 y Ecuación 2 - y combinando estas con la resolución gráfica, se deduce una expresión para averiguar la fracción de vapor presente en la mezcla:

M = L + V	Ecuación 1
Mz = Lx + Vy	Ecuación 2

Se elimina el término M mediante la combinación de las Ecuaciones 1 y 2:

(L+V)z = Lx + Vy	Ecuación 3
L(z-x) = V(y-z)	Ecuación 4
$\frac{V}{L} = \frac{(z-x)}{(y-z)} = \frac{\overline{LM}}{\overline{MV}}$	Ecuación 5

En la Ecuación 5 aparece reflejado que, por un lado, el segmento \overline{LM} se corresponde con la cantidad de vapor presente en la mezcla; mientras que el segmento \overline{MV} está relacionado con la cantidad de líquido. Por lo tanto, teniendo en cuenta que el segmento total, la suma de los dos segmentos, se refiere a la mezcla completa incluyendo ambas fases, es posible hallar la fracción de vapor presente en la mezcla mediante la siguiente ecuación:

$$\vartheta = \frac{V}{M} = \frac{\overline{LM}}{\overline{LV}}$$
 Ecuación 6

Donde se ha definido ϑ como la fracción vaporizada de la mezcla. Es decir, es posible averiguar qué porción de la mezcla se encuentra en fase vapor mediante la división de la longitud del segmento LM entre el segmento total. Igualmente, es posible hallar la fracción de líquido presente en la mezcla. Se puede calcular empleando una ecuación análoga a la Ecuación 6, donde el numerador de la fracción será el segmento opuesto al del caso anterior, tal y como aparece en la Ecuación 7:

$$\delta = 1 - artheta = rac{L}{M} = rac{\overline{MV}}{\overline{LV}}$$
 Ecuación 7

En definitiva, es posible calcular la fracción vaporizada y licuada de la mezcla sin necesidad de conocer los caudales de líquido y vapor exactos que hay en un punto de mezcla determinado. Empleando, únicamente, un diagrama Txy – o incluso un diagrama Pxy – resulta un método de cálculo sencillo y eficaz.

Anexo III. Proceso de obtención de input para RADFRAC.

Como se ha comentado en el apartado 4.2, el procedimiento que se ha seguido para diseñar las columnas RADFRAC, lleva implícito el uso del bloque DSTWU. En muchas ocasiones, puede darse que, al tratarse de una separación sencilla o convencional, no sea necesario el empleo de este bloque, puesto que los parámetros de diseño se puedan aproximar con facilidad. Posteriormente, se pueden realizar los análisis de sensibilidad pertinentes que permitan afinar la separación hasta el punto deseado.

Sin embargo, en el caso del Splitter de nafta que se estudia en este proyecto, la gran cantidad de componentes presentes en la mezcla dificulta bastante la estimación de los parámetros de diseño del RADFRAC, por lo que ha sido necesario acudir al DSTWU.

DSTWU es un bloque de simulación que, introduciendo el porcentaje de producto que se desea recuperar por cabeza, estima las propiedades de la columna RADFRAC que conseguiría dicha separación. Los valores de este porcentaje o *recovery* que requiere la simulación del DSTWU son los de los considerados como clave ligero (Light Key) y clave pesado (Heavy Key). Cuando se desea realizar la separación de una mezcla multicomponente, se entiende como clave ligero el componente más pesado de los que sale por cabeza; en otras palabras, el que tiene mayor punto de ebullición pero que se va a obtener por la corriente de destilado. Al contrario, el clave pesado será el componente más ligero de todos los que salen por la corriente de fondo o, igual que en el caso anterior, el que tenga menor punto de ebullición de todos los componentes de la corriente extraída por la zona inferior de la columna.

En definitiva, lo que solicita el bloque DSTWU es la especificación del corte, ya que con el dato del *recovery* del clave ligero se está limitando cuál es el último componente que se desea obtener totalmente por cabeza; mientras que el dato del clave pesado determina qué componente es el primero que no debe aparecer por la corriente de destilado. Cabe destacar que los *recoveries* introducidos son siempre con respecto al caudal de destilado, es decir, la cantidad de dicho producto que se desea que salga por cabeza frente a la cantidad introducida en la alimentación.

Estos *recoveries*, en muchas ocasiones, pueden introducirse según sea conveniente, puesto que, habiendo asegurado el correcto funcionamiento de la columna RADFRAC con los resultados del DSTWU, luego es posible retocar los parámetros de diseño del RADFRAC mediante *Sensitivities* y *Design Specs*. Sin embargo, en muchas ocasiones es apropiado realizar el proceso de diseño completo, que incluye el empleo de un bloque previo al DSTWU,

concretamente el SEP2. De este bloque, se obtienen con exactitud los *recoveries* de aquellos componentes elegidos para delimitar la separación.

En el caso que aquí concierne, no ha sido necesario el empleo del bloque SEP2, sino que se ha diseñado inicialmente sobre el bloque DSTWU.

Anexo IV. Resultados del análisis de sensibilidad en serie.

En las tablas aquí expuestas, se recogen los resultados numéricos de los análisis de sensibilidad realizados para la optimización de la simulación del bloque DWC.

Resumen de tablas recogidas en este Anexo:

- Tabla 1: Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación del número de etapas de RD1.

- Tabla 2. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación la relación de reflujo – RR – en RD1.

- Tabla 3. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación del plato óptimo de alimentación en RD1.

- Tabla 4. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación del plato óptimo de alimentación en RD2.

- Tabla 5. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación la relación D: F en RD2.

- Tabla 6. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación la relación de reflujo – RR – en RD2.

N-Stage RD1	TOP2MB	BOT2NPEN	BOT2BEN
2	397,817826	185,871581	94,9647949
3	430,977803	251,697766	102,018426
4	436,853898	264,264317	107,767708
5	438,097183	267,071268	111,329822
6	438,450305	267.879451	113.279135
7	438.595821	268.207528	114.315251
8	438.671434	268.37528	114,869529
9	438,716855	268,474744	115,176063
10	438 746869	268 539679	115 353834
11	438 768905	268 586713	115 463191
12	438 785379	268 621453	115 533566
13	438 798513	268 648828	115 581227
14	438 809234	268 670943	115 614728
15	438 818177	268 689231	115 639053
16	438 82555	268 704195	115 656979
17	438 832073	268 717364	115,630373
18	438,837735	268 728746	115 68172
10	430,037733	268 738702	115,00172
20	438 847052	268 747404	115 607/57
20	430,047032	200,747404	115,097437
2 I 22	430,0009	200,700009	115,709107
22	430,034310	200,701900	115,700197
23	430,007300	200,707970	115,712370
24	438,862402	200,773390	115,715904
25	430,002492	200,770222	115,719094
20	430,004070	200,702303	115,721001
27	430,000030	200,700307	115,724311
20	430,000403	200,790039	115,720495
29	430,009992	200,793221	115,720445
30	430,07 1424	200,790094	115,730199
22	430,072711	200,790070	115,731774
33	430,073074	268 803116	115,734/81
34	430,074921	268 805016	115,735643
35	438 876716	268 80673	115,736694
36	438 877485	268 808278	115 737646
37	438,878170	268 809679	115,738500
38	438 878808	268 810040	115,730202
30	430,070000	268 812104	115,739292
40	438 879902	268 813159	115,740656
41	438 880469	268 814304	115 741241
42	438 880896	268 815169	115 741774
42	438 881283	268 815953	115,747774
43	438 881634	268 816663	115 742699
45	438 88195	268 817305	115 743099
46	438 882237	268 817886	115 743462
40	438 882495	268 818411	115,743702
48	438 882728	268 818884	115 744091
40	430,002720	268 810311	115,744091
49 50	430,002939	200,019311	115,744302
50	430,003120	200,019090	115,744009
57	430,003299	200,020044	115,744000
52	430,003433	200,020302	115,745043
53 E4	430,0030	200,020007	115,745237
54	430,003/3/	200,020937	115,740422
56	438 883076	268 821/26	115 7/5730
50	100,000010	200,021420	110,140100

Tabla 1: Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación del número de etapas de RD1.

57	469,9692	331,190474	123,555812
58	478,098694	348,664625	130,212607
59	480,173982	353,555328	135,086585
60	480,702565	354,947893	139,307019
61	480,835368	355,343571	142,905689
62	480,868805	355,457273	146,044171
63	480,877191	355,490068	148,776377
64	480,879288	355,499566	151,163035
65	480,87981	355,502321	153,238054
66	480,87994	355,503123	155,041651
67	480,879973	355,503355	156,601258
68	480,87998	355,503421	157,948853
69	480,879982	355,503439	159,106532
70	480,879983	355,503443	160,098808
71	480,879983	355,503443	160,94244
72	480,879983	355,503443	161,656829
73	480,879983	355,503442	162,257218
74	480,879982	355,503441	162,765686
75	480,879982	355,503441	163,202028
76	480,879982	355,50344	163,585665
77	480,879982	355,50344	163,931719
78	480,879982	355,50344	164,239674
79	480,879982	355,50344	164,517552
80	480,879982	355,503439	164,76924
81	480,879982	355,503439	164,997628
82	480,879982	355,503439	165,205116
83	480,879982	355,503439	165,393492
84	480,879982	355,503439	165,564671
85	480,879982	355,503439	165,719933
86	480,879982	355,503439	165,860894
87	480,879982	355,503439	165,988538
88	480,879982	355,503439	166,104252
89	480,879982	355,503439	166,208831
90	480,879982	355,503439	166,303465
91	480,879982	355,503439	166,388818
92	480,879982	355,503439	166,465907
93	480,879982	355,503439	166,535295
94	480,879982	355,503439	166,597844
95	480,879982	355,503439	166,654037
96	480,879982	355,503439	166,704599
97	480,879982	355,503439	166,749942
98	480,879982	355,503439	166,790671
99	480,879982	355,503439	166,827139

_

Tabla 2. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación la relación de reflujo – RR – en RD1.

RR-RD1	TOP2MB	BOT2NPEN	BOT2BEN
1	480,879982	355,50344	166,591499
1.05	480,879982	355,503439	166,668249
1.1	480.879982	355,503439	166.710331
1.15	480.879982	355,503439	166.74302
1.2	480.879982	355,503439	166.770193
1.25	480,879982	355,503439	166,793502
1.3	480,879982	355,503439	166.813869
1.35	480,879982	355,50344	166.831882
1.4	480,879982	355,50344	166.847959
1.45	480,879982	355,50344	166.862408
1.5	480.879982	355,50344	166.875461
1.55	480,879982	355,50344	166,887307
1.6	480.879982	355,50344	166.898097
1.65	480,879982	355,50344	166,907958
1.7	480,879982	355,50344	166,916995
1.75	480,879982	355,503441	166,925302
1,8	480,879982	355,503441	166,932955
1,85	480,879982	355,503441	166,940023
1,9	480,879982	355,503441	166,946565
1,95	480,879982	355,503441	166,952634
2	480,879982	355,503441	166,958276
2,05	480,879982	355,503441	166,963531
2,1	480,879982	355,503441	166,968435
2,15	480,879982	355,503441	166,973021
2,2	480,879982	355,503441	166,977315
2,25	480,879982	355,503441	166,981345
2,3	480,879982	355,503441	166,985132
2,35	480,879982	355,503441	166,988696
2,4	480,879982	355,503441	166,992057
2,45	480,879982	355,503441	166,995229
2,5	480,879982	355,503441	166,998229
2,55	480,879982	355,503441	167,001069
2,6	480,879982	355,503441	167,003762
2,65	480,879982	355,503441	167,006317
2,7	480,879982	355,503441	167,008747
2,75	480,879982	355,503442	167,011058
2,8	480,879982	355,503442	167,01326
2,85	480,879982	355,503442	167,01536
2,9	480,879982	355,503442	167,017365
2,95	480,879982	355,503442	167,019281
3	480,879982	355,503442	167,021114
3,05	480,879982	355,503442	167,022869
3,1	480,879982	355,503442	167,024551
3,15	480,879982	355,503442	167,026164
3,2	480,879982	355,503442	167,027713
3,25	480,879982	355,503442	167,029201
3,3	480,879982	355,503442	167,030632
3,35	480,879982	355,503442	167,032009
3,4	480,879982	355,503442	167,033335
3,45	480,879982	355,503442	167,034615
3,5	480,879982	355,503442	167,035845
3,55	480,879982	355,503442	167,037037
3,6	480,879982	355,503442	167,038183
3,05	480,879982	355,503442	167,039295
3,1	480,879982	355,503442	107,040366

3,75	480,879982	355,503442	167,041404
3,8	480,879982	355,503442	167,042409
3,85	480,879982	355,503442	167,043382
3,9	480,879982	355,503442	167,044325
3,95	480,879982	355,503442	167,045239
4	480,879982	355,503442	167,046126
4,05	480,879982	355,503442	167,046986
4,1	480,879982	355,503442	167,047822
4,15	480,879982	355,503442	167,048634
4,2	480,879982	355,503442	167,047574
4,25	480,879982	355,503442	167,048438
4,3	480,879982	355,503442	167,049221
4,35	480,879982	355,503442	167,049987
4,4	480,879982	355,503442	167,050731
4,45	480,879982	355,503442	167,051457
4,5	480,879982	355,503442	167,052163
4,55	480,879982	355,503442	167,052852
4,6	480,879982	355,503442	167,053523
4,65	480,879982	355,503442	167,054178
4,7	480,879982	355,503442	167,054816
4,73631	480,879982	355,503442	167,056882
4,75	480,879982	355,503442	167,055439
4,8	480,879982	355,503442	167,056047
4,85	480,879982	355,503442	167,056641
4,9	480,879982	355,503442	167,057221
4,95	480,879982	355,503442	167,057788
5	480,879982	355,503442	167,058342

Tabla 3. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación del plato óptimo de alimentación en RD1.

Feed Stage-RD1	TOP2MB	BOT2NPEN	BOT2BEN
3	480.879572	355.503116	119.918367
4	480.879509	355,503017	143.982407
5	480.879477	355,502966	157.973316
6	480.879457	355,502934	166.453672
7	480.879455	355,502931	167.094509
8	480,879453	355,502928	167,113599
9	480.879452	355,502926	167.118926
10	480.879452	355,502923	167.121364
11	480,879451	355,502921	167,122558
12	480,87945	355,502919	167,123202
13	480,879449	355,502917	167,12351
14	480,879449	355,502916	167,123573
15	480.879448	355,502914	167.123542
16	480.879448	355,502913	167.123399
17	480.879448	355,502912	167.123137
18	480.879447	355,502911	167.122791
19	480.879447	355.50291	167.122343
20	480,879447	355,502909	167,121809
21	480.879447	355.502909	167.12117
22	480.879446	355,502908	167.120434
23	480,879446	355,502908	167,119578
24	480.879446	355.502907	167.118603
25	480,879446	355,502907	167,117486
26	480.879446	355,502906	167,116222
27	480,879446	355,502906	167,114784
28	480.879446	355,502906	167.11316
29	480.879445	355,502905	167.111321
30	480.879445	355,502905	167,109247
31	480.879445	355,502905	167.106904
32	480.879446	355,502905	167.104264
33	480,879445	355,502904	167,101286
34	480,879445	355,502904	167,097933
35	480,879445	355,502904	167,094156
36	480,879445	355,502904	167,089907
37	480,879445	355,502904	167,085119
38	480,879445	355,502904	167,079734
39	480,879445	355,502903	167,073678
40	480,879445	355,502903	167,066866
41	480,879445	355,502903	167,059211
42	480,879445	355,502903	167,050604
43	480,879445	355,502903	167,04094
44	480,879445	355,502903	167,030078
45	480,879445	355,502903	167,017892
46	480,879445	355,502903	167,004204
47	480,879445	355,502903	166,988862
48	480,879445	355,502903	166,97164
49	480,879445	355,502903	166,952356
50	480,879445	355,502902	166,930727
51	480,879445	355,502902	166,906535
52	480,879445	355,502902	166,879429
53	480,879445	355,502902	166,849149
54	480.879445	355,502902	166.815259
55	480,879445	355,502902	166,777456
56	480,879445	355,502902	166,735202
57	480,879445	355,502902	166,688143

58	480,879445	355,502902	166,635621
59	480,879446	355,502902	166,577227
60	480,879446	355,502902	166,512163
61	480,879446	355,502903	166,439964
62	480,879446	355,502903	166,359658
63	480,879446	355,502903	166,270721
64	480,879446	355,502903	166,171993
65	480,879446	355,502903	166,062877
66	480,879447	355,502903	165,94199
67	480,879447	355,502903	165,808655
68	480,879447	355,502904	165,661233
69	480,879448	355,502904	165,498948
70	480,879448	355,502904	165,319865
71	480,879448	355,502905	165,12308
72	480,879449	355,502905	164,906318
73	480,879449	355,502906	164,668494
74	480,87945	355,502907	164,40694
75	480,879451	355,502907	164,120298
76	480,879451	355,502908	163,805401
77	480,879452	355,502909	163,460425
78	480,879453	355,50291	163,081324
79	480,879454	355,502911	162,665073
80	480,879455	355,502912	162,205902
81	480,879456	355,502912	161,690529
82	480,879457	355,502909	161,098094
83	480,879458	355,502898	160,188443
84	480,879456	355,502851	158,972957
85	480,879435	355,502672	157,49868
86	480,879336	355,502032	155,747662
87	480,878913	355,499773	153,697517
88	480,877164	355,491818	151,29594
89	480,869997	355,463731	148,490249
90	480,840785	355,364256	145,23101
91	480,722289	355,010746	141,456393
92	480,244321	353,749743	137,074387
93	478,328313	349,228133	132,005236
94	470,729144	332,880852	125,433975
95	440,939161	273,025369	117,195771

Tabla 4. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación del plato óptimo de alimentación en RD2.

Feed Stage-RD2	TOP2MB	BOT2NPEN	BOT2BEN
2	356,396995	289,056912	161,284779
3	390,460044	295,225225	165,32818
4	409,46011	303,836339	166,573051
5	422,055272	312,459307	166,943651
6	431,531512	320,327775	167,051277
7	439,211499	327,301765	167,082057
8	445,680617	333,430906	167,090788
9	451,248693	338,820582	167,09325
10	456,097434	343,568987	167,093941
11	460,355014	347,767231	167,094135
12	464,110952	351,486882	167,094189
13	467,439178	354,792433	167,094204
14	470,394578	357,733475	167,094208
15	473,025923	360,35565	167,094209
16	475,369402	362,693248	167,094209
17	477,485019	364,805072	167,094209
18	479,362679	366,680293	167,094209
19	480,877919	368,193992	167,094209
20	480,879787	368,195035	167,094209
21	480,879865	368,194537	167,094209
22	480,87989	368,194156	167,094209
23	480,8799	368,193877	167,094209
24	480,879902	368,193674	167,094209
25	480,879901	368,193524	167,094209
26	480,879896	368,193412	167,094209
27	480,879889	368,193328	167,094209
28	480,879879	368,193261	167,094209
29	480,879867	368,193207	167,094209
30	480,879851	368,193161	167,094209
31	480,879835	368,193123	167,094209
32	480,879812	368,193084	167,094209
33	480,879785	368,193045	167,094209
34	480,879752	368,193003	167,094209
35	480,879714	368,192958	167,094209
36	480,879667	368,192907	167,094209
37	480,879613	368,192849	167,094209
38	480,879548	368,192781	167,094209
39	480,879472	368,192703	167,094209
40	480,879382	368,192611	167,094209
41	480,879275	368,192504	167,094209
42	480,879149	368,192377	167,094209
43	480,879	368,192228	167,094209
44	480,878824	368,192051	167,094209
45	480,878617	368,191843	167,094209
46	480,878372	368,191598	167,094209
47	480,878083	368,191309	167,094209
48	480,877741	368,190967	167,094209
49	480,877338	368,190564	167,094209
50	480,876862	368,190087	167,094209
51	480,8763	368,189526	167,094209
52	480,875637	368,188862	167,094209
53	480,874855	368,18808	167,094209
54	480,87393	368,187156	167,094209
55	480,872841	368,186066	167,094209
56	480,871554	368,18478	167,094209

57	480,870037	368,183262	167,094209
58	480,868245	368,181471	167,094209
59	480,866133	368,179358	167,094209
60	480,863638	368,176864	167,094209
61	480,860695	368,173921	167,094209
62	480,857225	368,170451	167,094209
63	480,853131	368,166357	167,094209
64	480,8483	368,161526	167,094209
65	480,842604	368,15583	167,094209
66	480,835885	368,14911	167,094209
67	480,827963	368,141188	167,094209
68	480,81862	368,131846	167,094209
69	480,807609	368,120834	167,094209
70	480,794627	368,107853	167,094209
71	480,779332	368,092558	167,094209
72	480,76131	368,074535	167,094209
73	480,740086	368,053311	167,094209
74	480,715094	368,028319	167,094209
75	480,685652	367,998877	167,094209
76	480,651032	367,964257	167,094209
77	480,610317	367,923543	167,094209
78	480,562461	367,875687	167,094209
79	480,506242	367,819468	167,094209
80	480,440252	367,753477	167,094209
81	480,362842	367,676067	167,094209
82	480,272133	367,585359	167,094209
83	480,165924	367,479149	167,094209
84	480,041736	367,354962	167,094209
85	479,896662	367,209887	167,094209
86	479,727498	367,040723	167,094209
87	479,530447	366,843672	167,094209
88	479,301444	366,614669	167,094209
89	479,035614	366,348839	167,094209
90	478,727903	366,041129	167,094209
91	478,372156	365,685381	167,094209
92	477,962243	365,275469	167,094209
93	477,490509	364,803734	167,094209
94	476,949698	364,262924	167,094209
95	476,330243	363,643468	167,094209
96	475,624068	362,937294	167,094209
97	474,819538	362,132763	167,094209
98	473,907067	361,220292	167,094209
99	472,872539	360,185764	167,094209
100	471,705062	359,018287	167,094209

_

D: F-RD2	TOP2MB	BOT2NPEN	BOT2BEN
0,05	24,9487129	379,289345	167,093765
0,06938776	46,7728109	378,326535	167,093764
0,08877551	82,127039	376,34739	167,093764
0,10816327	118,359965	374,086082	167,093763
0,12755102	154,535914	371,767084	167,093763
0,14693878	190,738974	369,47501	167,093762
0,16632653	227,017842	367,258449	167,093761
0,18571429	263,40296	365,147795	167,093761
0,20510204	299,911792	363,160498	167,093761
0,2244898	336,555264	361,307494	167,09376
0,24387755	373,334435	359,589863	167,09376
0,26326531	410,248564	358,006889	167,09376
0,28265306	447,288406	356,549372	167,09376
0,296543	473,981082	355,661091	167,09376
0,30204082	480,87998	351,646845	167,093759
0,32142857	480,879998	313,186468	167,093748
0,34081633	480,879998	274,726942	167,093733
0,36020408	480,879997	236,26792	167,093716
0,37959184	480,879998	197,809004	167,093695
0,39897959	480,88	159,349914	167,093672
0,41836735	480,88	120,890394	167,093649
0,4377551	480,88	82,4302759	167,093624
0,45714286	480,88	43,9695026	167,093598
0,47653061	480,88	5,50791895	167,093571
0,49591837	480,88	0	167,093293
0,51530612	480,88	0	167,052402
0,53469388	480,88	0	166,971334
0,55408163	480,88	0	166,853076
0,57346939	480,88	0	166,725636
0,59285714	480,88	0	166,5931
0,6122449	480,88	0	166,456102
0,63163265	480,879999	0	166,295193
0,65102041	480,88	0	165,998833
0,67040816	480,88	0	165,700175
0,68979592	480,88	0	164,538615
0,70918367	480,88	0	161,267341
0,72857143	480,88	0	157,956335
0,74795918	480,88	0	154,554746
0,76734694	480,88	0	151,055923
0,78673469	480,88	0	147,640768
0,80612245	480,88	0	144,386104
0,8255102	480,88	0	140,76646
0,84489796	480,88	0	138,176881
0,86428571	480,88	0	143,715251

Tabla 5. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación la relación D: F en RD2.

RR-RD2	TOP2MB	BOT2NPEN	BOT2BEN
1	316,548788	217,431847	166,997145
1,2	327,445537	221,588075	167,077773
1,4	336,696296	228,184442	167,088786
1,6	345,448321	235,510674	167,091775
1,8	353,912043	243,124917	167,092916
2	362,154326	250,831128	167,093444
2,2	370,193624	258,516872	167,093722
2,4	378,026868	266,108108	167,093882
2,6	385,64241	273,552583	167,093981
2,8	393,023779	280,809605	167,094044
3	400,14932	287,842563	167,094087
3,2	406,997491	294,620381	167,094117
3,4	413,545768	301,114233	167,094139
3,6	419,776592	307,302299	167,094154
3,8	425,669309	313,160994	167,094166
4	431,208258	318,672569	167,094175
4,2	436,38037	323,822452	167,094181
4,4	441,177202	328,60109	167,094187
4,6	445,59625	333,005145	167,094191
4,8	449,640421	337,036887	167,094194
5	453,322789	340,708894	167,094196
5,2	456,657003	344,034431	167,094199
5,4	459,66782	347,037934	167,0942
5,6	462,379154	349,743074	167,094201
5,8	464,810371	352,169027	167,094202
6	466,992238	354,346389	167,094203
6,04377	467,444396	354,797643	167,094204
6,2	468,947324	356,297607	167,094204
6,4	470,697409	358,044353	167,094205
6,6	472,269374	359,613417	167,094205
6,8	473,67651	361,01803	167,094206
7	474,945704	362,285007	167,094206
7,2	476,09268	363,43003	167,094206
7,4	477,1299	364,465521	167,094207
7,6	478,060308	365,394401	167,094207
7,8	478,929469	366,262177	167,094207
8	479,702656	367,034138	167,094207
8,2	480,41268	367,743055	167,094207
8,4	480,879974	368,209473	167,094207
8,6	480,879995	368,208971	167,094208
8,8	480,879998	368,208484	167,094208
9	480,879999	368,208024	167,094208
9,2	480,879999	368,20759	167,094208
9,4	480,879999	368,20718	167,094208
9,6	480,88	368,206793	167,094208
9,8	480,88	368,206427	167,094208
10	480,88	368,20608	167,094208

Tabla 6. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación la relación de reflujo – RR – en RD2.

Anexo V. Resultados del análisis de sensibilidad en DWC.

En las tablas aquí expuestas, se recogen los resultados numéricos de los análisis de sensibilidad realizados para la optimización de la simulación del bloque DWC.

Resumen de tablas recogidas en este Anexo:

- Tabla 7: Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de alimentación de BOT 1 en MAIN.
- Tabla 8. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de extracción lateral SIDE en MAIN.

Etapa alimentación	OV/HD2MR (kmal/h)	SIDENDEN (kmol/b)	SIDERENZ (kmol/h)
BOT1		SIDENPEN (KINOVII)	SIDEBEINZ (KIIIOI/II)
30	459,406202	343,942172	66,2087724
31	459,986562	344,527655	66,2107272
32	460,427761	344,969622	66,2119699
33	460,757563	345,299205	66,2131744
34	461,000421	345,542335	66,2132585
35	461,177646	345,718409	66,2143829
36	461,303244	345,844594	66,2150122
37	461,391504	345,93005	66,214917
38	461,448207	345,988052	66,2156099
39	461,477857	346,017864	66,2154571
40	461,487326	346,027373	66,2154877
41	463,247194	347,786688	119,171523
42	465,398323	349,936178	156,71453
43	467,110651	351,649379	166,149683
44	468,30187	352,841411	166,789957
45	469,04464	353,587843	166,936797
46	469,527545	354,067128	166,998078
47	469,856049	354,400052	167,027617
48	470,090532	354,62978	167,046989
49	470,260428	354,803434	167,060861
50	470,398588	354,93813	167,069291
51	470,47253	355,030324	167,074341
52	470,596645	355,138254	167,079837
53	470,67429	355,219117	167,085539
54	470,753095	355,29196	167,088084
55	470,821658	355,362287	167,090447
56	470,889501	355,429983	167,091454
57	470,965506	355,503668	167,095611
58	471,036734	355,579162	167,097302
59	471,123882	355,666082	167,097953
60	471,206959	355,752927	167,098074
61	471,324712	355,865517	167,097648
62	471,457787	355,995717	167,102818
63	471,613219	356,154142	167,102129
64	471,810883	356,351174	167,102343
65	472,060849	356,601237	167,103489
66	472,388281	356,929831	167,103426
67	472,821882	357,365958	167,105419
68	473,430961	357,969604	167,10462
69	474,34107	358,879067	167,105623
70	476,005479	360,64843	167,272501

Tabla 7. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de alimentación de BOT 1 en MAIN.

Etapa extracción SIDE	OVHD2MB (kmol/h)	SIDENPEN (kmol/h)	SIDEBENZ (kmol/h)
30	467,275927	351,817437	167,103332
31	468,181431	352,722905	167,103252
32	468,891257	353,429669	167,102015
33	469,439587	353,980274	167,101079
34	469,860721	354,40076	167,098568
35	470,173872	354,716902	167,098577
36	470,409432	354,949203	167,097852
37	470,57605	355,117644	167,095556
38	470,695209	355,236141	167,094904
39	470,774568	355,315035	167,092594
40	470,839831	355,381783	167,087114
41	470,822301	355,361711	167,090729
42	470,838911	355,379243	167,084707
43	470,819863	355,354773	167,082457
44	470,818842	355,304514	167,064673
45	470,813107	355,252338	167,054591
46	470,81031	355,140155	167,085275
47	470,566225	354,983365	167,115558
48	470,312131	354,769791	166,993058
49	469,966008	354,467371	166,899965
50	469,439007	353,998597	167,010298
51	468,752742	353,269081	166,757906
52	467,764245	352,116913	166,089629
53	465,862875	350,392697	156,7074
54	463,505919	348,035517	119,179771
55	461,62771	346,170171	66,2185962
56	461,868016	346,386318	66,21713
57	462,113516	346,664552	66,217654
58	462,364184	346,901796	66,2184253
59	462,636133	347,152379	66,2225091
60	462,924694	347,438387	66,2220763
61	463,253941	347,769038	66,2220503
62	463,629577	348,194431	66,2231589
63	464,069808	348,57018	66,2279943
64	464,603111	349,131423	66,2342045
65	465,260454	349,790495	66,2441612
66	466,095358	350,619928	66,2598613
67	467,145618	351,695169	66,2853915
68	468,46031	353,00633	66,3165107
69	469,901961	354,439231	66,331005
70	470,191485	354,723403	66,3318908

 Tabla 8. Resultados del análisis de sensibilidad para la determinación plato óptimo de extracción lateral SIDE en

 MAIN.

Anexo VI. Resultados del análisis de sensibilidad para el estudio de la robustez.

Datos del análisis de la influencia de la temperatura de alimentación a la composición de los caudales de salida.

Tabla 9. Resultados de la influencia de la temperatura de alimentación sobre la estrategia de columnas en serie.

Temperatura (°C)	TOP22MB (kmol/h)	BOT2NPEN (kmol/h)	BOT2BENZ (kmol/h)
5	470,493083	355,823811	167,097726
6	470,493013	355,823741	167,097456
7	470,493124	355,823851	167,097337
8	470,492583	355,823311	167,097202
9	470,492845	355,823573	167,097063
10	470,493182	355,823909	167,096919
11	470,493075	355,823802	167,096771
12	470,492788	355,823515	167,096618
13	470,493212	355,823938	167,096461
14	470,49287	355,823597	167,096298
15	470,492978	355,823705	167,096131
16	470,493161	355,823888	167,095957
17	470,493192	355,823919	167,095779
18	470,493352	355,824078	167,095594
19	470,492938	355,823665	167,095404
20	470,493228	355,823954	167,095207
21	470,492753	355,82348	167,095003
22	470,492841	355,823569	167,094793
23	470,4933	355,824026	167,094576
24	470,492872	355,823599	167,094351
25	470,493048	355,823775	167,094118
26	470,493198	355,823924	167,093878
27	470,493309	355,824035	167,093628
28	470,493138	355,823864	167,093371
29	470,493292	355,824018	167,093104
30	470,493198	355,823924	167,092827
31	470,492928	355,823654	167,09254
32	470,493214	355,823939	167,092242
33	470,493086	355,823813	167,091934
34	470,493361	355,824086	167,091614
35	470,493391	355,824116	167,091281
36	470,493377	355,824102	167,090936
37	470,49323	355,823956	167,090578
38	470,493415	355,82414	167,090205
39	470,493453	355,824178	167,089817
40	470,493372	355,824097	167,089413
41	470,493296	355,824022	167,088993

42	470,49318	355,823906	167,088555
43	470,493542	355,824266	167,088099
44	470,493187	355,823913	167,087623
45	470,493422	355,824147	167,087126
46	470,493598	355,824323	167,086607
47	470,493553	355,824277	167,086065
48	470,493608	355,824332	167,085498
49	470,493235	355,82396	167,084904
50	470,493352	355,824077	167,084283

Temperatura (°C)	OVHD2MB (kmol/h)	SIDENPEN (kmol/h)	SIDEBENZ (kmol/h)
5	420,078306	304,622455	167,084212
6	421,991234	306,534832	167,086781
7	423,976	308,516875	167,091099
8	426,026367	310,564284	167,089427
9	428,149864	312,690128	167,087002
10	430,342019	314,87955	167,088705
11	432,599462	317,143457	167,086838
12	434,932999	319,473682	167,089577
13	437,343252	321,883734	167,088796
14	439,826779	324,367462	167,089828
15	442,383491	326,925974	167,089953
16	445,015191	329,554517	167,08852
17	447,722453	332,263768	167,090284
18	450,499648	335,042285	167,090503
19	453,344094	337,893297	167,092051
20	456,258916	340,801992	167,089226
21	459,220303	343,760117	167,090298
22	462,207233	346,747888	167,090458
23	465,185533	349,727434	167,090422
24	468,093316	352,633478	167,089999
25	470,820591	355,359981	167,090435
26	473,22248	357,763604	167,090538
27	475,152863	359,692625	167,090952
28	476,546468	361,087855	167,091047
29	477,465233	362,002481	167,09123
30	478,008941	362,550669	167,090934
31	478,270085	362,81071	167,091169
32	478,29634	362,836658	167,091124
33	478,105145	362,645758	167,09118
34	477,677858	362,21978	167,091215
35	477,025577	361,56588	167,090847
36	476,122231	360,662205	167,091097
37	474,982542	359,521611	167,091276
38	473,629376	358,166502	167,090397
39	472,086621	356,629669	167,090442
40	470,389029	354,930944	167,091092
41	468,554874	353,096563	167,090795
42	466,601244	351,142495	167,090503
43	464,539803	349,08258	167,090072
44	462,381436	346,923554	167,090044
45	460,132128	344,673366	167,089652
46	457,797012	342,339366	167,0908
47	455,381596	339,924756	167,092505
48	453,589147	338,198064	167,089458

Tabla 10. Resultados de la influencia de la temperatura de alimentación sobre DWC.

49	452,838946	337,599781	167,092224
50	452,100106	336,941341	167,090999
