



Universidad de Valladolid

*MÁSTER EN INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA DE
PROCESOS Y SISTEMAS INDUSTRIALES*

TRABAJO FIN DE MÁSTER

**ESTUDIO Y SIMULACIÓN DE LA
INFLUENCIA DE LA INTEGRACIÓN
ENERGÉTICA DE UN PROCESO EN SU
COMPORTAMIENTO DINÁMICO**

Verónica San José Arnaiz

Julio 2016



Estudio y simulación de la influencia de la integración energética de un
proceso en su comportamiento dinámico



FIDEL MATO CHAIN, profesor del Departamento de Ingeniería Química de
la Universidad de Valladolid y GLORIA GUTIERREZ RODRIGUEZ, profesora del
Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática, CERTIFICAN:

Que D^a VERÓNICA SAN JOSÉ ARNAIZ ha realizado bajo su dirección el Trabajo Fin de Máster
Titulado: *ESTUDIO Y SIMULACIÓN DE LA INFLUENCIA DE LA INTEGRACIÓN
ENERGÉTICA DE UN PROCESO EN SU COMPORTAMIENTO DINÁMICO*

Valladolid, 08 de Julio de 2016

Fdo. Fidel Mato Chain

Fdo. Gloria Gutiérrez Rodríguez



Estudio y simulación de la influencia de la integración energética de un
proceso en su comportamiento dinámico



Reunido el Tribunal designado por el Comité Académico del Máster en Investigación en Ingeniería de Procesos y Sistemas Industriales, para la evaluación de los Trabajos Fin de Máster y después de estudiar la memoria y atender a la defensa del trabajo *Estudio y Simulación de la influencia de la integración energética de un proceso en su comportamiento dinámico*, presentado por la alumna D^a Verónica San José Arnaiz, decidió otorgarle la calificación de _____.

Valladolid, 12 de Julio de 2016

El Presidente

El Secretario

Fdo.:

Fdo.:

Vocal

Fdo.:



Estudio y simulación de la influencia de la integración energética de un
proceso en su comportamiento dinámico





ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN.....	6
1.1.OBJETIVOS	6
1.2.ANTECEDENTES.....	6
1.2.1. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO.....	6
1.2.2. COMPUESTOS QUÍMICOS INVOLUCRADOS.....	8
1.2.3. DESCRIPCIÓN DE LA PLANTA ORIGINAL.....	12
2. SIMULACIÓN DEL PROCESO EN HYSYS.....	14
2.1.RÉGIMEN ESTACIONARIO.....	14
2.2.RÉGIMEN DINÁMICO.....	27
3. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA PROCESO.....	31
3.1.TECNOLOGÍA PINCH.....	31
4. SIMULACIÓN DE LOS PROCESOS INTEGRADOS EN HYSYS.....	36
4.1.INTEGRACIÓN OPCIÓN 1.....	36
4.2.INTEGRACIÓN OPCIÓN 2.....	37
5. AHORRO ENERGÉTICO.....	38
6. COMPARATIVA COMPORTAMIENTO PROCESOS.....	40
6.1.SIN PERTURBACIÓN.....	41
6.2.REGÍMENES PERTURBADOS.....	44
7. PROPUESTA CONTROL PROCESO ORIGINAL.....	49
8. CONCLUSIONES.....	57
9. BIBLIOGRAFÍA.....	59



1. INTRODUCCIÓN

1.1. OBJETIVOS

El principal objetivo de este trabajo es el estudio comparativo del comportamiento en régimen dinámico de un proceso sin integrar frente al del mismo proceso integrado energéticamente, con el fin de analizar la operabilidad y controlabilidad de los mismos. Para ello, se han realizado las simulaciones del proceso de fabricación del compuesto químico cumeno original e integrado, utilizando la herramienta informática de simulación Aspen HYSYS V.8 y la integración mediante la tecnología de Pinch. Los modelos resultantes se han sometido posteriormente a determinadas perturbaciones en sus condiciones de entrada para terminar de caracterizar su comportamiento dinámico.

Se plantean dos diferentes opciones de integración. Se compara la ganancia energética obtenida y la influencia de esta integración en la controlabilidad de ambos sistemas con el caso sin integrar y entre sí. Con este análisis se pretende valorar, al menos cualitativamente, la viabilidad de la integración en términos del ahorro energético conseguido frente a la necesidad de un control más complejo del sistema, derivada de sus cambios en la estabilidad y respuesta a las perturbaciones. Adicionalmente, en el presente trabajo se realiza una propuesta completa de controlabilidad del sistema original desarrollada con el software Aspen HYSYS V.8.

1.2. ANTECEDENTES

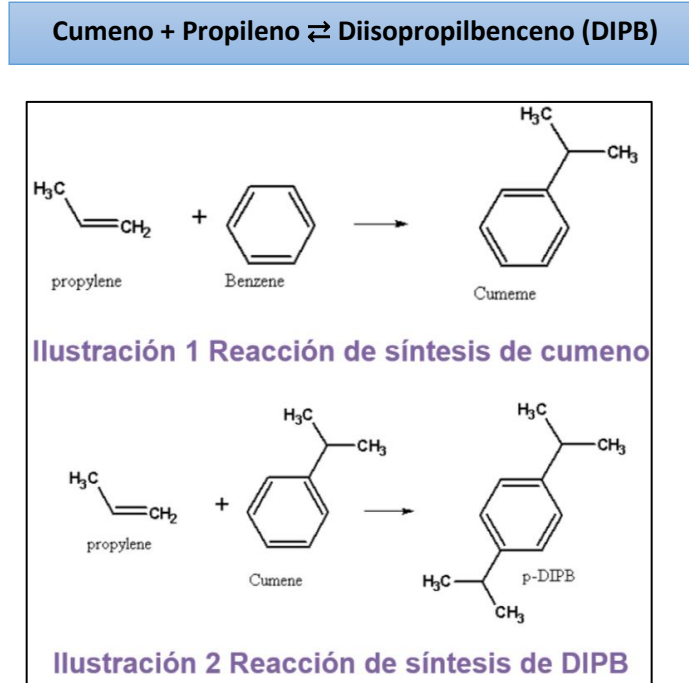
1.2.1. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

El proceso de formación del cumeno se comenzó a desarrollar entre los años 1939 y 1945 en unidades de polimerización de refinerías, usado esencialmente para mejorar el octanaje de la gasolina de aviación durante la Segunda Guerra Mundial. No obstante, con el paso de los años el cumeno ha ido cambiando su uso por el de reactivo en la formación de acetona y fenol mediante el proceso Hock, inventado en 1944 ocupando en el año 1989 un 95% de la demanda total de cumeno [2 y 10].

La fabricación industrial de cumeno se realiza a partir de la alquilación del benceno con propileno según la siguiente reacción:



Simultáneamente tiene lugar una reacción secundaria en la que se obtiene como subproducto no deseado el 1-3 Diisopropilbenceno (DIPB):



Como materias primas se utilizan el benceno (prácticamente puro 99.4 %) y propileno que contiene un 3.7 % de propano como impureza. La reacción de alquilación tiene lugar en presencia de un catalizador ácido (ácido fosfórico H₃PO₄) y en estado gaseoso. Hoy en día es común el uso de catalizadores minerales como la Zeolita, a causa de la dificultad que presentan los ácidos para ser tratados como residuos y su peligro corrosivo.

La reacción se produce en un reactor multi-tubular de lecho fijo donde se encuentra el catalizador, que opera en un rango de temperatura entre 300-400 °C y a una presión entre 25-30 atm. Se utiliza un exceso de benceno para minimizar los productos de polialquilación (subproducto DIPB).

Los reactantes se alimentan en fase líquida desde sus tanques de almacenamiento respectivos (a 20°C y 1 atm). Estos se vaporizan y se calientan hasta la temperatura de reacción.

A la salida del reactor, los productos se enfrían y el condensado presenta esencialmente mezcla de cumeno, benceno no reaccionado y DIPB. Las cantidades restantes de propileno y propano se separan del líquido en forma de vapor gracias a una unidad flash. Posteriormente, la corriente líquida obtenida pasa por 2 columnas de destilación. En la primera torre se separa el benceno del cumeno y DIPB, siendo el primero recirculado a las condiciones de entrada del proceso. En la segunda torre, se

obtiene por cabezas el cumeno con un 99,8% de pureza y por colas el subproducto DIPB, que se puede utilizar como combustible.

1.2.2. COMPUESTOS QUÍMICOS INVOLUCRADOS

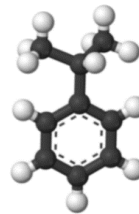
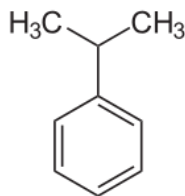
1.2.2.1. CUMENO

1.2.2.1.1. DEFINICIÓN Y CARACTERÍSTICAS

Cumeno (cumene) es el nombre comúnmente utilizado para denominar el compuesto químico del tipo hidrocarburo aromático isopropilbenceno. Su producción mundial es de unas 11×10^6 Tm [11].

Fórmula molecular: C_9H_{12}

Fórmula estructural:



El cumeno se encuentra como componente minoritario del petróleo y de los disolventes derivados del petróleo. Este compuesto puede aparecer como contaminante en el aire a niveles de ppb muy bajos (0,1 a 2,5 ppb), posiblemente proveniente de la emisión de gases de los automóviles.

PROPIEDADES FISICO-QUÍMICAS:

Se trata de un líquido transparente, incoloro y con fuerte olor aromático, detectable a bajas concentraciones.

Es un compuesto inflamable cuyo límite de explosividad es inferior a 0,9% y superior 6,5% (concentración en aire). Otras propiedades son [1]:

- Peso molecular: 120,21.
- Factor de conversión (20 °C, 101 kPa): $5,00 \text{ mg/m}^3 = 1 \text{ ppm}$.
- Solubilidad: soluble en la mayoría de los disolventes orgánicos, insoluble en agua.
- Punto de fusión: $-97 \text{ }^\circ\text{C}$.
- Punto de ebullición: $152 \text{ }^\circ\text{C}$.
- Presión de vapor: 0,4 kPa a $20 \text{ }^\circ\text{C}$.
- Densidad de vapor: 4,2 veces la densidad del aire .



1.2.2.1.2. USOS Y UTILIDADES CUMENO

En la actualidad, la mayor parte de la producción de cumeno es dedicada a la posterior fabricación de acetona y fenol, ampliamente valorados en el mercado internacional debido a su polivalencia en síntesis orgánica, así como por sus propiedades físico-químicas.

En los años 1960 comenzó a aumentar la popularidad del proceso de oxidación del cumeno para la síntesis del fenol, siendo hoy prominente.

El cumeno también presenta los siguientes usos:

- Como componente de alto octanaje en los combustibles de los aviones.
- Disolvente de pinturas, barnices y lacas de celulosa. Subproducto del proceso de fabricación de pasta de papel al sulfito.
- Materia prima para la síntesis de acetatos fenólicos y metilestireno, y para la producción de estireno por pirolisis, producto intermedio importante desde que la industria en 1950 logró su transformación sencilla en fenol y acetona.
- También se encuentra en muchos disolventes comerciales derivados del petróleo, con puntos de ebullición que oscilan entre 150 y 160 °C.
- Es un buen disolvente de grasas y resinas y, por este motivo, se ha utilizado como sustituto del benceno en muchos de sus usos industriales.
- Se usa en los catalizadores de polimerización para la fabricación de plásticos.
- Catalizador para acrílicos y tipos de resinas poliéster.
- Se utiliza en la síntesis de algunos detergentes y, principalmente, en la fabricación de fenol y acetona mediante la obtención previa de hidroperóxido de cumeno.

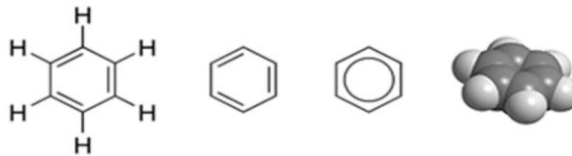
1.2.2.2. BENCENO

El benceno es un hidrocarburo aromático descubierto en 1825 por Michael Faraday entre los hidrocarburos del petróleo, obtenido a través de la destilación seca del ácido benzoico.

La mayor parte el benceno se obtiene del gas de los hornos de coque y alquitrán de hulla, encontrado por primera vez en este último en el año 1845 por A.W.v.Hoffmann. Algunos yacimientos de petróleo, especialmente los del Pacífico occidental, contienen también cantidades notables de benceno [11].

Fórmula molecular: C_6H_6

Fórmula estructural:



PROPIEDADES FISICO-QUÍMICAS:

Se trata de un líquido incoloro de olor agradable (aroma dulce). Presenta efectos cancerígenos y puede resultar venenoso si se inhala en grandes cantidades. Sus vapores son explosivos, y el líquido es violentamente inflamable.

A continuación, se indican algunas de sus propiedades [3]:

- Punto de ebullición: 80,1°C.
- Punto de fusión: 5,5°C.
- Densidad relativa (agua = 1 a 20 °C): 0.88.
- Solubilidad en agua, g/100 ml a 25°C: 0.18.
- Presión de vapor, kPa a 20°C: 10.
- Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.7.
- Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.2.
- Punto de inflamación: -11°C.
- Temperatura de autoignición: 498°C.

El benceno se usa en grandes cantidades en los Estados Unidos. Se encuentra en la lista de los 20 productos químicos de mayor volumen de producción. Uno de sus mayores usos es como carburante para motores mezclado con la gasolina. Otro uso importante es el de disolvente o agente de extracción.

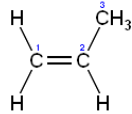
A partir de él se obtienen numerosos compuestos químicos, utilizándose en algunas industrias como la fabricación de plásticos, resinas, ciertos polímeros, medicinas, explosivos...

1.2.2.3. PROPILENO

El propileno o propeno es un hidrocarburo perteneciente al grupo de los alquenos, homólogo del etileno. Como todos los alquenos, presenta el doble enlace como grupo funcional. El propileno se obtiene durante la refinación de la gasolina. Pero también puede ser producida por la división, el agrietamiento y la reforma de mezclas de hidrocarburos. Es el segundo compuesto más utilizado en la industria química en todo el mundo [11].

Fórmula molecular: C_3H_6

Fórmula estructural:



PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS:

Es un gas combustible incoloro con un olor natural picante. Aunque es similar al propano, que tiene un doble enlace que le da una ventaja de combustión. Este gas combustible es altamente inflamable y no tóxico.

Algunas de sus propiedades son:

- Masa molecular: 42,1 g/mol
- Punto de fusión: $-185,3\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Punto de ebullición: $-48\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Temperatura de ignición: $460\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Presión de vapor a $20\text{ }^{\circ}\text{C}$: 10.200 hPa
- Límites de explosividad: 2,0 - 11,1% de propeno en el aire.

El propileno es una alternativa atractiva a propano para la calefacción y de corte debido a su rendimiento de la combustión superior. También se utiliza ampliamente como un gas combustible en los procesos de combustible de oxígeno de alta velocidad (HVOF). Además, las industrias de los plásticos y químicos dependen de propileno como un gas combustible.

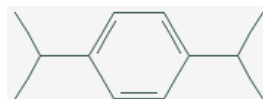
Las aplicaciones no-combustible incluyen la síntesis orgánica para producir materiales tales como acetona. El propileno puede ser polimerizado para formar plástico de polipropileno. También se puede emplear como un refrigerante, en mezclas de calibración y como intermediario químico. Además, se utiliza para la prueba de la eficiencia de quemadores de gas y motores.

1.2.2.4. DIISOPROPILBENCENO (DIPB)

Se trata del subproducto obtenido en la reacción de formación del cumeno, el cual puede ser utilizado en la producción de acetona tras una oxidación (hidroperóxido de diisopropibenceno).

Fórmula molecular: $\text{C}_{12}\text{H}_{18}$

Fórmula estructural





PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS:

Se trata de un líquido incoloro.

- Punto de ebullición: 203-205°C
- Temperatura de fusión: -17°C
- Densidad: 0.9 g/cm³
- Solubilidad en agua a 25°C: escasa
- Densidad relativa de vapor (aire = 1): 5.6
- Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1
- Punto de inflamación: 77°C
- Temperatura de autoignición: 449°C

1.2.3. DESCRIPCIÓN DE LA PLANTA ORIGINAL

En la planta de producción de cumeno Fig. 1 las dos materias primas, benceno y propileno, llegan de límites de batería en forma líquida a 25 °C y 1 atm. La corriente de benceno <1> se mezcla en el tanque V-801 con la corriente <19> de benceno sobrante procedente del proceso, la cual ha sido enfriada previamente en el enfriador E-808. Dicha mezcla (corriente <2>) es impulsada por la bomba P-801 A/B para mezclarse con la corriente de entrada de propileno <5>, previamente impulsada por la bomba P-802 A/B.

Esta corriente <6>, que contiene la mezcla de ambos reactantes, es calentada en primer lugar en el calentador E-801 y posteriormente en el horno de combustión H-801 hasta alcanzar una temperatura de 350 °C, temperatura a la cual la corriente <8> entra en el reactor R-801, y que es necesaria para que se produzca la reacción de formación de cumeno. Esta reacción es exotérmica, por lo que el calor producido se disminuye extrayendo la corriente <50> (correspondiente a un fluido de refrigeración Dowtherm A) del reactor y enfriándola con el equipo enfriador E-802, para retornar la corriente <52> al intercambiador interno del reactor por su zona superior.

La corriente <9>, producto de la reacción, contiene el cumeno producido, benceno y propileno no reaccionados, DIPB y el propano encontrado como impureza en la corriente de entrada de propileno. Ésta sale del reactor por su parte inferior, disminuyendo su temperatura al pasar a través del equipo E-803. La corriente <11> obtenida y enfriada pasa a un destilador flash V-802, en el cual se separan en forma de vapor parte del propileno, propano y benceno, siendo la corriente <13> líquida resultante rica en cumeno y benceno.

La corriente <13> pasa directamente a la primera torre de destilación T-801, donde por cabezas se separa el benceno, condensado por el equipo E-804, acumulado en el depósito V-803 y posteriormente realimentado gracias a la impulsión de la bomba P-804 A/B al depósito de mezcla V-801 con la corriente de alimentación del benceno, tras ser enfriado a 40°C por el enfriador E-808.

El producto de colas (corriente <15>) de la torre T-801 está compuesto principalmente por cumeno y el subproducto DIPB, que pasa a la segunda torre de destilación T-802.

En esa columna se separa por la parte superior como vapor el producto principal, cumeno con una pureza del 99,8 %. Esta corriente es condensada en el equipo E-806, almacenada del tanque V-804, y posteriormente impulsada como corriente <16> por la bomba P-805 A/B para su almacenamiento y comercialización.

La corriente <17> procedente de la parte inferior de la torre T-802 está compuesta principalmente por el subproducto DIPB.

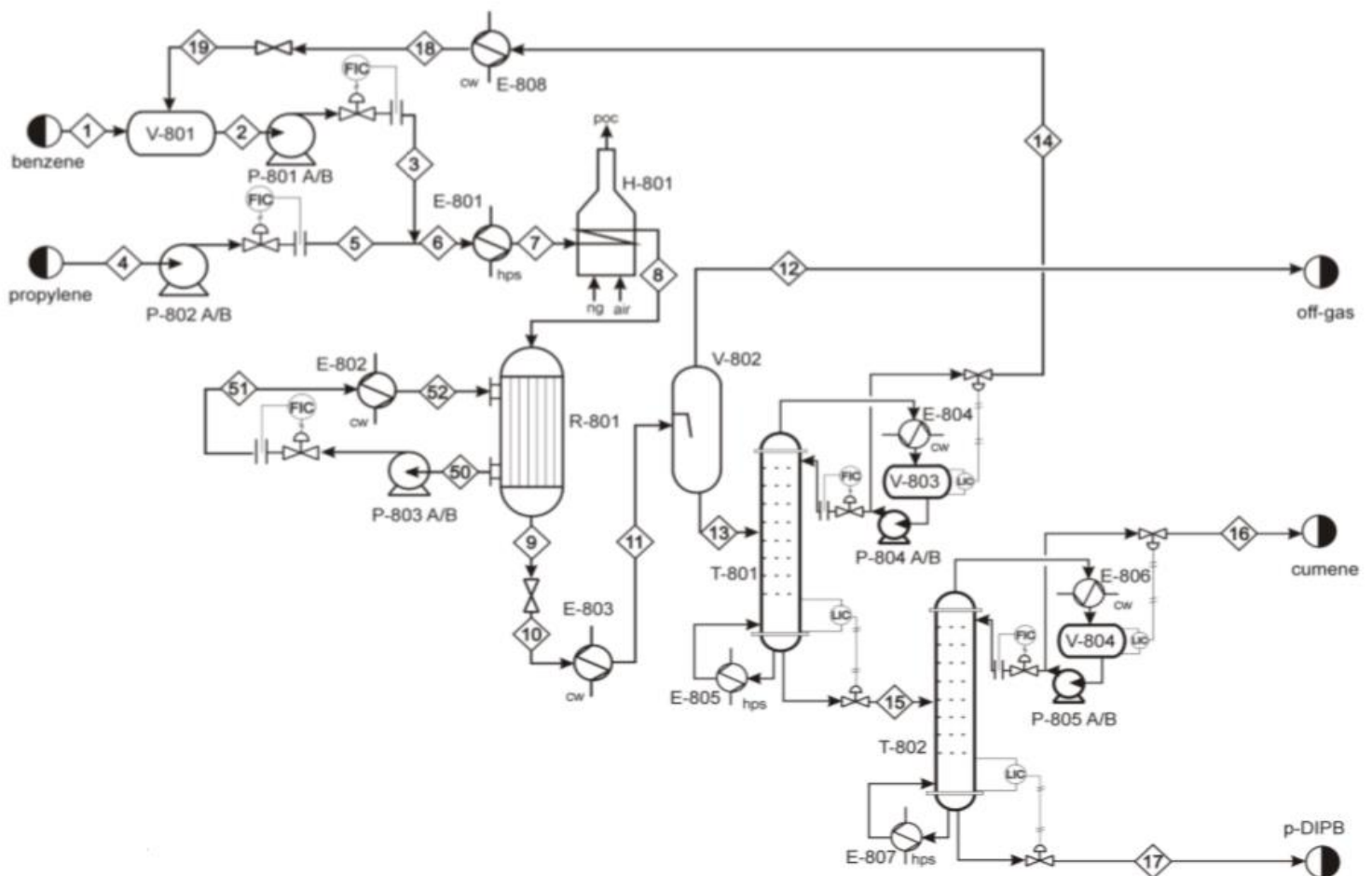


Figura 1. Diagrama de flujo de procesos de la planta original de producción de Cumeno, sin integrar.

2. SIMULACIÓN DEL PROCESO EN HYSYS

Aspen Hysys es una herramienta informática que permite, con fines de diseño o análisis, simular procesos químicos tanto en régimen estacionario como dinámico.

Para ello, este programa presenta herramientas con las que es posible estimar propiedades físicas, balances de materia y energía, equilibrios líquido-vapor, simulación de gran variedad de equipos de proceso, controladores de diferentes tipos y clases y además incluye opciones para generar resultados gráficos para realizar estudios y seguimiento del comportamiento de las variables deseadas del sistema.

Sin embargo, se ha de tener en cuenta que este software posibilita realizar una simulación del proceso químico, pero es rol del usuario indicar los parámetros de diseño de los equipos, como en el caso del número de platos que componen una columna de destilación, ya que el simulador no calcula dichos parámetros.

Los resultados obtenidos en la simulación dependen de la calidad de los datos de entrada del sistema. En este trabajo, se ha partido de los datos de una planta de producción de cumeno ya diseñada previamente, con unas determinadas especificaciones y características de sustancias, corrientes, conexiones y equipos implicados en el proceso indicados en el punto anterior.

2.1. RÉGIMEN ESTACIONARIO

Para comenzar con la simulación del proceso en Hysys, en primer lugar se han de indicar las propiedades químicas y físicas del sistema en la pestaña “**Properties**”.

Dentro de esta sección se añaden los siguientes datos de entrada:

- 1) “**Component Lists**”: se indican los **componentes** presentes en las reacciones y en el sistema. La lista se denomina “Component List-1” e incluye las siguientes especies según se observa en la imagen:

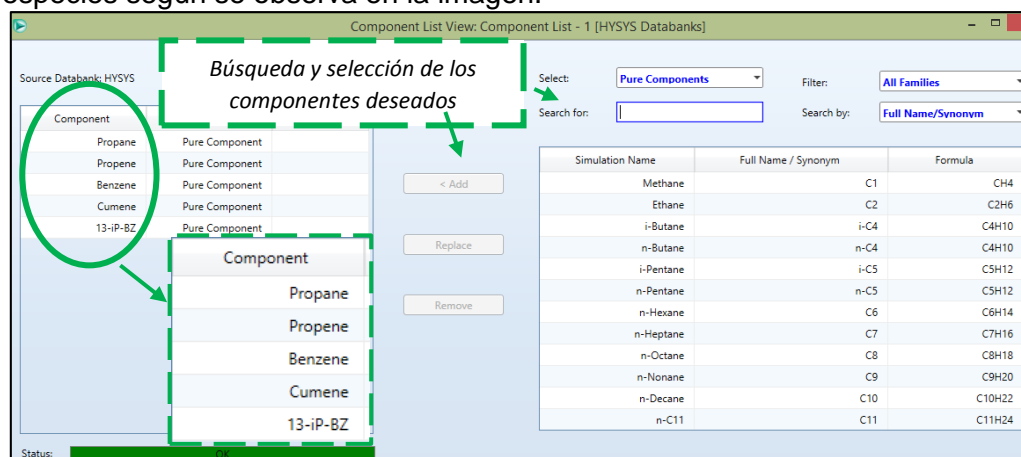


Figura 2. Imagen apartado selección componentes HYSYS.

2) “ **Fluid Packages** ”: en este apartado se eligen las propiedades físicas que se ajusten en mayor medida al sistema que se pretende simular. Esta elección tiene bastante importancia ya que la fiabilidad de los resultados de la simulación se pueden ver influenciados por una selección incorrecta del modelo termodinámico. Hysys ofrece una gran variedad de dichos modelos, los cuales presentan ecuaciones de estado, modelos de coeficiente de actividad, de presión de vapor, modelos semi-empíricos, especiales, etc...Para el sistema estudiado, se ha seleccionado el paquete denominado “ **PRSV** ”. Se trata de una mejora del modelo “Peng-Robinson PR”, el cual es adecuado para cálculos de equilibrio líquido-vapor así como el cálculo de densidades de líquidos para sistemas de hidrocarburos. El modelo “PRSV” amplía el rango de aplicabilidad del “PR” al incluir sistemas no ideales [5].

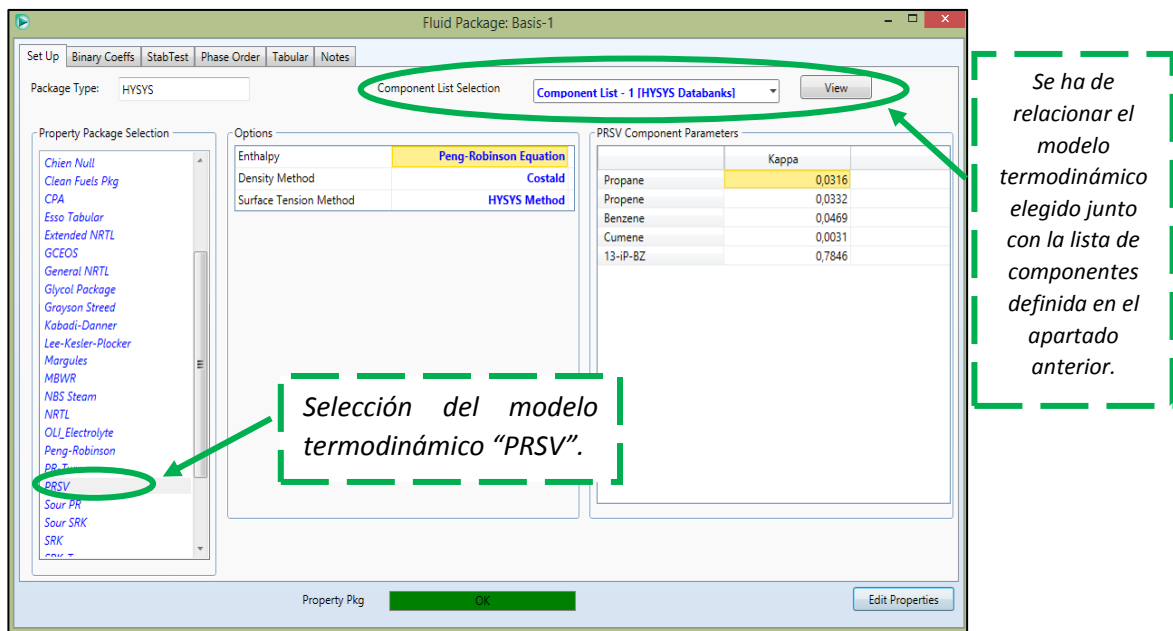


Figura 3. Imagen apartado selección “Fluid Packages” HYSYS

3) “ **Reactions** ”: en esta parte se definen la reacción o reacciones que tienen lugar en el proceso. Referente a este trabajo, se producen dos reacciones indicadas en apartados anteriores: una reacción principal de formación de cumeno y una secundaria donde se obtiene el subproducto DIPB. Estas reacciones son añadidas al “Set-1” de la siguiente manera, siendo posteriormente definido en el reactor (R-801):

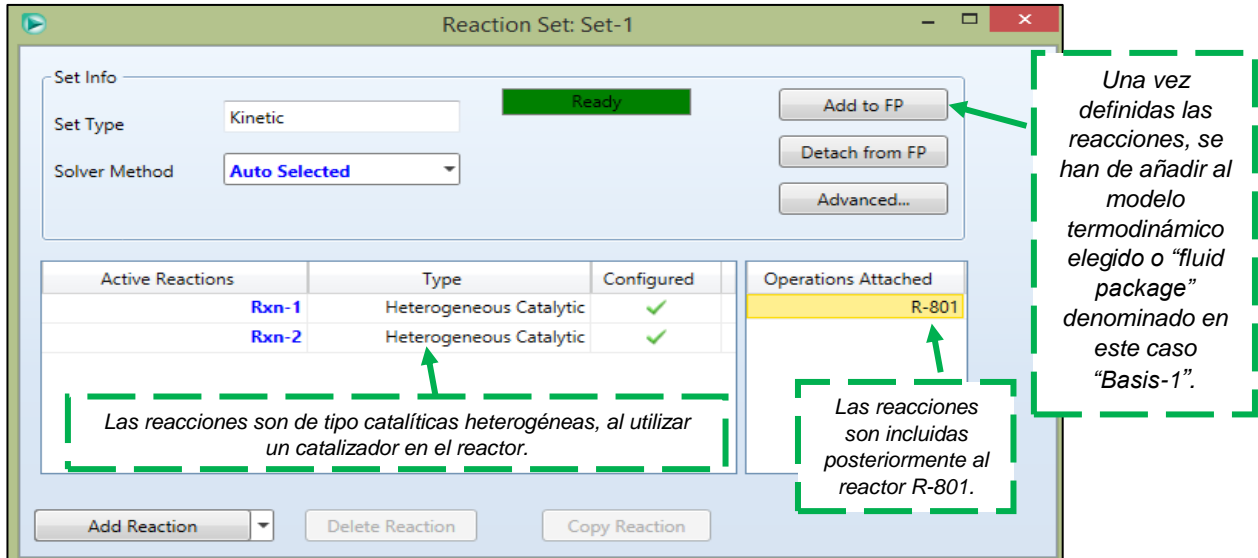


Figura 4. Imagen apartado selección "Reaction Set" HYSYS.

A continuación se muestra una imagen explicativa de los siguientes pasos a seguir para completar la definición de la reacción principal (Rxn-1):

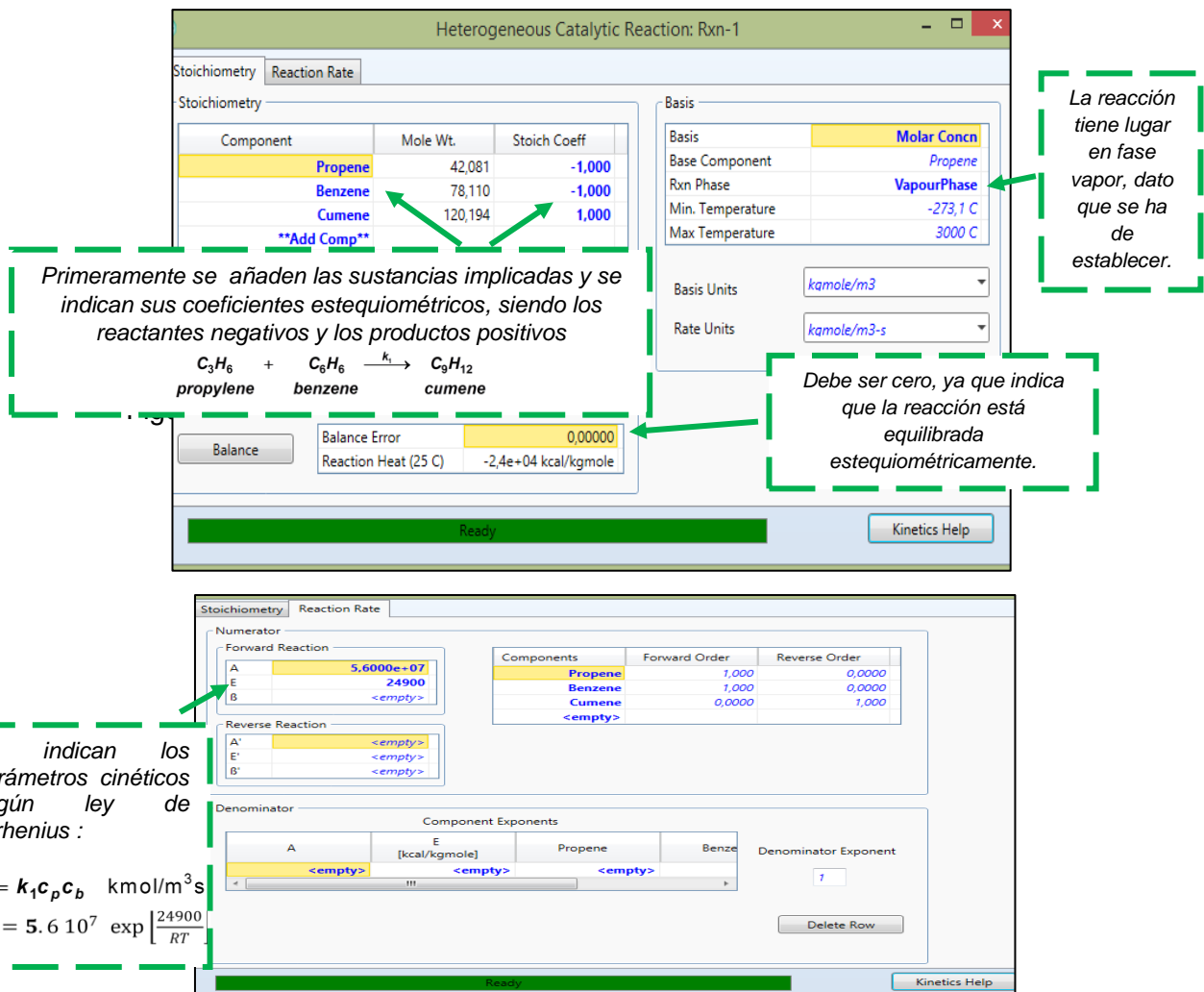
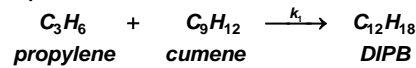


Figura 5. Imagen apartado "Reaction Rxn-1 Reaction Rate" HYSYS.

La reacción secundaria (Rxn-2) se define siguiendo los mismos pasos indicados para Rxn-1, teniendo en cuenta:

- Estequiometría y componentes:

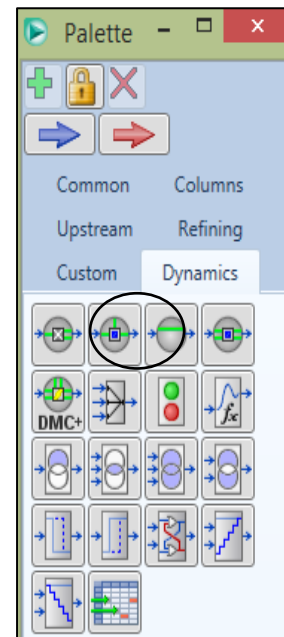
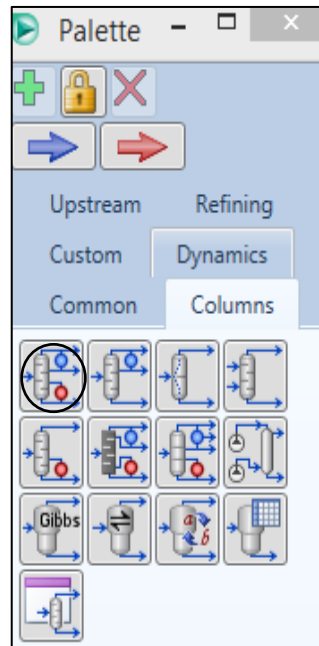
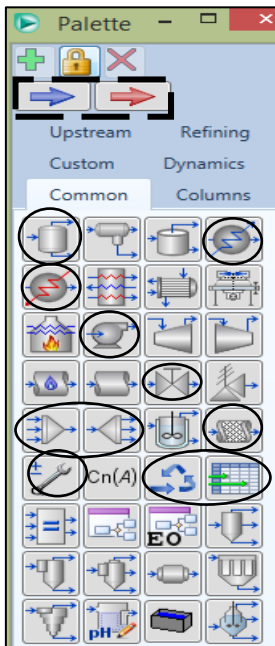


- Parámetros cinéticos:

$$r_1 = k_2 c_p c_c \quad \text{kmol/m}^3\text{s}$$

$$k_1 = 4.64 \cdot 10^9 \exp \left[\frac{35080}{RT} \right]$$

Una vez definidas las propiedades del sistema, se procede a iniciar la definición de los equipos y corrientes en el dominio de “**Simulation**”. Este es el espacio donde se dibuja el proceso, inicialmente en estado estacionario, utilizando los comandos que ofrece Hysys (“**Palette**”), donde se encuentran diferentes equipos, controladores, operadores lógicos y corrientes tanto de materia como energía. A continuación se muestra dicha paleta donde se indican los comandos utilizados en este trabajo:



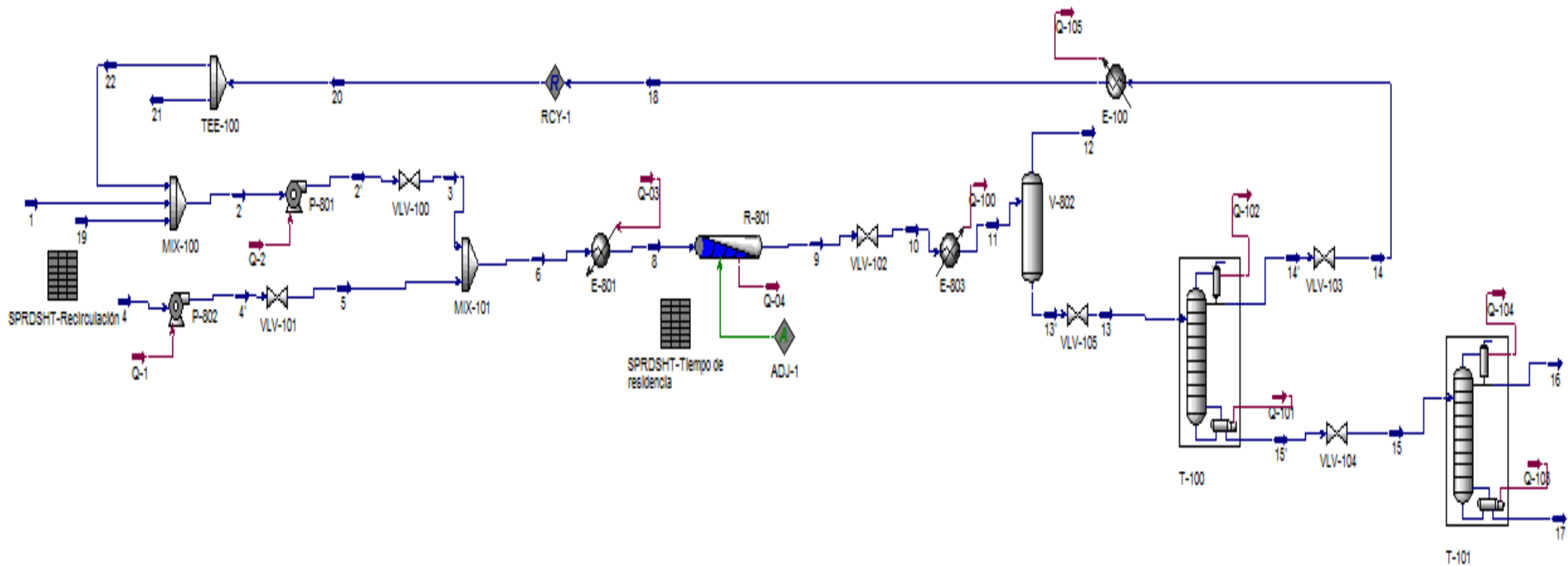


Figura 6. Simulación régimen estacionario proceso completo producción cumeno.



MATERIAL STREAMS														
	Unit	1	4	2	2'	4'	5	3	6	8	9	10	11	12
Vapour Fraction		0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	1,0	1,0	0,0	1,0
Temperature	C	25,0	25,0	39,1	40,3	27,3	27,3	40,3	38,7	350,0	343,7	323,8	65,0	65,0
Pressure	bar	1,3	12,0	1,3	31,5	31,5	31,5	31,5	31,5	30,8	30,8	2,3	2,0	2,0
Molar Flow	kgmole/h	135,0	160,0	653,1	653,1	160,0	160,0	653,1	813,1	813,1	666,1	666,1	666,1	17,2
Mass Flow	kg/h	10544,9	6749,0	49729,6	49729,6	6749,0	6749,0	49729,6	56478,6	56478,6	56479,1	56479,1	56479,1	891,5
Liquid Volume Flow	m3/h	12,0	13,0	57,7	57,7	13,0	13,0	57,7	70,7	70,7	66,2	66,2	66,2	1,5
Heat Flow	kcal/h	1595938,7	-55058,7	6948341,1	6998630,7	-46774,4	-46774,4	6998630,7	6951856,3	19224056,1	15522885,2	15522885,2	4342665,8	-77072,0
	Unit	13'	13	14'	15'	14	15	16	17	18	20	21	22	19
Vapour Fraction		0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Temperature	C	65,0	65,0	41,8	181,7	41,8	181,7	169,0	219,9	40,0	40,0	40,0	40,0	39,6
Pressure	bar	2,0	2,0	1,7	2,0	1,7	2,0	1,5	1,8	1,4	1,4	1,4	1,4	1,3
Molar Flow	kgmole/h	648,9	648,9	502,2	146,7	502,2	146,7	146,2	0,5	502,2	502,1	0,0	502,1	16,0
Mass Flow	kg/h	55587,6	55587,6	37946,4	17641,2	37946,4	17641,2	17558,1	83,0	37946,4	37933,9	0,0	37933,9	1250,9
Liquid Volume Flow	m3/h	64,7	64,7	44,3	20,4	44,3	20,4	20,3	0,1	44,3	44,3	0,0	44,3	1,4
Heat Flow	kcal/h	4419737,8	4419737,8	5137359,5	-85288,4	5137359,5	-85288,4	-198344,8	-7497,5	5152551,5	5156034,1	0,0	5156034,1	196368,3

COMPOSITIONS


STREAMS	1	4	2	2'	4'	5	3	6	8	9	10	11	12
Comp Mole Frac (Propane)	0,0000	0,0500	0,0336	0,0336	0,0500	0,0500	0,0336	0,0368	0,0368	0,0449	0,0449	0,0449	0,4556
Comp Mole Frac (Propene)	0,0000	0,9500	0,0229	0,0229	0,9500	0,9500	0,0229	0,2053	0,2053	0,0300	0,0300	0,0300	0,3035
Comp Mole Frac (Benzene)	1,0000	0,0000	0,9434	0,9434	0,0000	0,0000	0,9434	0,7578	0,7578	0,7050	0,7050	0,7050	0,2342
Comp Mole Frac (Cumene)	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,2194	0,2194	0,2194	0,0067
Comp Mole Frac (13-iP-BZ)	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0007	0,0007	0,0007	0,0000
STREAMS	13'	13	14'	15'	14	15	16	17	18	20	21	22	19
Comp Mole Frac (Propane)	0,0341	0,0341	0,0440	0,0000	0,0440	0,0000	0,0000	0,0000	0,0440	0,0437	0,0437	0,0437	0,0000
Comp Mole Frac (Propene)	0,0227	0,0227	0,0294	0,0000	0,0294	0,0000	0,0000	0,0000	0,0294	0,0298	0,0298	0,0298	0,0000
Comp Mole Frac (Benzene)	0,7175	0,7175	0,9265	0,0020	0,9265	0,0020	0,0020	0,0000	0,9265	0,9264	0,9264	0,9264	1,0000
Comp Mole Frac (Cumene)	0,2250	0,2250	0,0001	0,9948	0,0001	0,9948	0,9980	0,0999	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000
Comp Mole Frac (13-iP-BZ)	0,0007	0,0007	0,0000	0,0032	0,0000	0,0032	0,0000	0,9001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

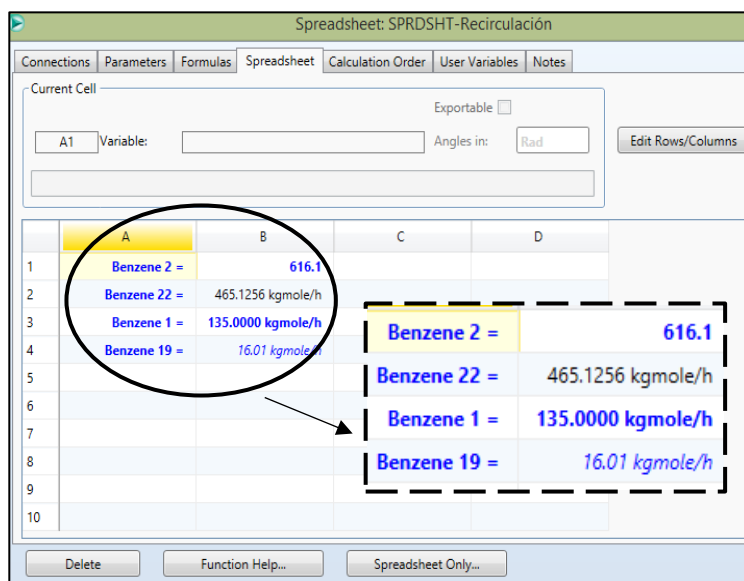
ENERGY STREAMS

	Unit	Q-2	Q-1	Q-03	Q-04	Q-100	Q-101	Q-102	Q-103	Q-104	Q-105
	Equipment	P-801	P-802	E-801	R-801	E-803	Reboiler T-100	Condenser T-100	Reboiler T-101	Condenser T-101	E-100
Heat Flow	kcal/h	5,03E+04	8,28E+03	1,23E+07	3,70E+06	1,12E+07	5,85E+06	5,22E+06	2,04E+06	2,16E+06	-1,52E+04

Figura 7. Datos corrientes calculados en la simulación régimen estacionario proceso completo producción cumeno.

El procedimiento seguido para construir el sistema anterior ha sido el siguiente:

- Corrientes de alimentación: en primer lugar se definen las corrientes de alimentación del sistema mediante el comando indicando:  temperatura, presión, flujo y composición de las mismas. Estas corrientes son:
- **Corriente N°4**: alimentación propileno y propano.
 - **Corriente N°1**: corriente benceno puro.
 - **Corriente N°22**: corriente benceno recirculado del proceso (1ª torre de destilación T-100).
 - **Corriente N° 19**: corriente utilizada inicialmente como simulación de la recirculación de benceno antes de que ésta existiera, definida con las mismas características. Se ha seguido este procedimiento debido a que la recirculación es el último paso a llevar a cabo en la simulación, cuando el proceso ya está dibujado y resuelto. De esta manera se consiguen los valores calculados buscados y que el sistema funcione correctamente. En un principio, la intención era eliminar dicha corriente y dejar operativa como recirculación únicamente la procedente del proceso (22). Sin embargo, se produce un error que afecta a todo el sistema si dicha corriente desaparece. Para solucionar este problema, la acción llevada a cabo es disminuir el flujo de esta corriente 19 de manera que sea insignificante con respecto al resto pero sin llegar a eliminar la corriente evitando que el sistema se descontrole. Se ha utilizado un operador lógico de cálculo de Hysys denominado “SPRDSHT”, con el que se calcula el flujo de esta corriente asegurando que la corriente N°2 resultante de su mezcla mantenga la cantidad de benceno establecida en el problema inicial de la siguiente forma:



The screenshot shows a spreadsheet titled "Spreadsheet: SPRDSHT-Recirculación". The spreadsheet has columns A, B, C, and D. The data is as follows:

	A	B	C	D
1	Benzene 2 =	616.1		
2	Benzene 22 =	465.1256 kgmole/h		
3	Benzene 1 =	135.0000 kgmole/h		
4	Benzene 19 =	16.01 kgmole/h		
5			Benzene 2 =	616.1
6			Benzene 22 =	465.1256 kgmole/h
7			Benzene 1 =	135.0000 kgmole/h
8			Benzene 19 =	16.01 kgmole/h

Benzene 2: Valor de la cantidad de benceno fijado en la corriente N°2 de mezcla.

Composición benceno importada de las corrientes:

- Benzene 22: recirculación del proceso.
- Benzene 1: benceno puro

Composición de benceno de la corriente N° 19 calculada como:

$$\text{Benzene 19} = \text{Benzene 2} - \text{Benzene 22} - \text{Benzene 1}$$

Es resultado de esta operación es exportado a la corriente 19 del proceso.

- Las corrientes de benceno indicadas se juntan mediante un **mezclador (MIX-100)** como se indica en la figura 8. Para definir este equipo, tras seleccionarlo en la paleta de Hysys, simplemente se unen al mismo las corrientes de entrada a mezclar, obteniendo una única corriente de salida N°2, siendo sus características calculadas por el dispositivo en función de las entradas.

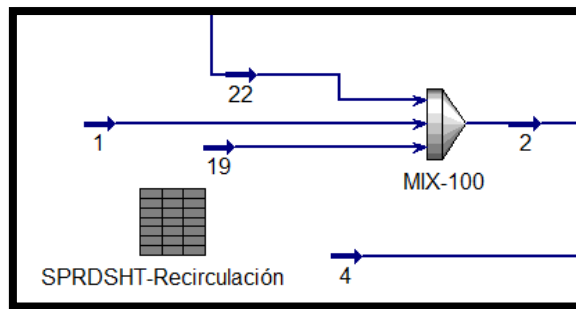





Figura 8. Alimentación sistema producción cumeno.

- **Bombas de impulsión** corrientes de entrada: se añaden al proceso dos bombas de impulsión, P-801 y P82 a las corrientes N° 2 y 4 de alimentación respectivamente, según muestra la figura 9. Estos equipos se incluyen con el comando  de la paleta, quedando definida al indicarle corrientes de entrada y salida de materia, corriente de energía, % de eficiencia y Delta de P mediante la introducción del dato de Presión en la corriente de salida.
- **Elementos finales de control** → **válvulas**: a lo largo del proceso se han instalado las siguientes válvulas:
 - **VLV-100**: control corriente N°3 de benceno a mezclar con la corriente de propileno N°5.
 - **VLV-101**: control corriente N°5 de propileno.
 - **VLV-102**: despresurización corriente N° 9 tras la salida del reactor R-801 (pasando de 30.75 a 2.25 bares).
 - **VLV-105**: control corriente líquida N°13 de salida del equipo Flash V-802, rica en benceno y cumeno.
 - **VLV-103**: control corriente N°14 de salida por cabezas de la primera Torre de destilación T-100, rica en benceno para ser recirculada al proceso.
 - **VLV-104**: control corriente N°15 de salida por colas de la primera Torre de destilación T-100 y entrada a la segunda Torre T-101.

Estos actuadores se establecen mediante el comando  de la paleta, indicando las conexiones con las corrientes de entrada y salida, así como un valor de Delta de P, el cual puede indicarse directamente en la pantalla de parámetros de diseño del aparato o bien dando valor de presión a la corriente de salida del mismo.

- Acondicionamiento corriente de entrada al reactor: en primer lugar, las corrientes de benceno y propileno se mezclan en el mezclador MIX-101, obteniendo la corriente N° 6. Dicha corriente se encuentra a una temperatura de 38.68 °C, de forma que debe ser calentada hasta 350 °C antes de entrar al reactor, ya que la reacción tiene lugar altas temperaturas (300-400°C). Para ello, se utiliza un calentador o “heater” E-801 mediante el  comando . Éste se resuelve definiendo corrientes de entrada (N°6 ya definida) y salida de materia (N°8 indicando T^a y P), corriente de energía (Q-03), que calcula el equipo con los datos introducidos en la corriente de salida. Este calentador agrupa el precalentamiento del equipo E-801 y del horno H-801 correspondientes a la Fig.1.

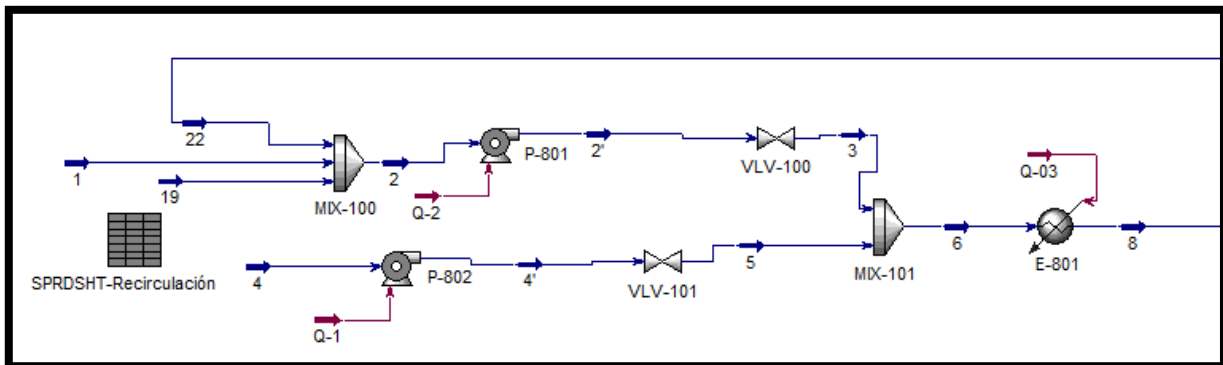


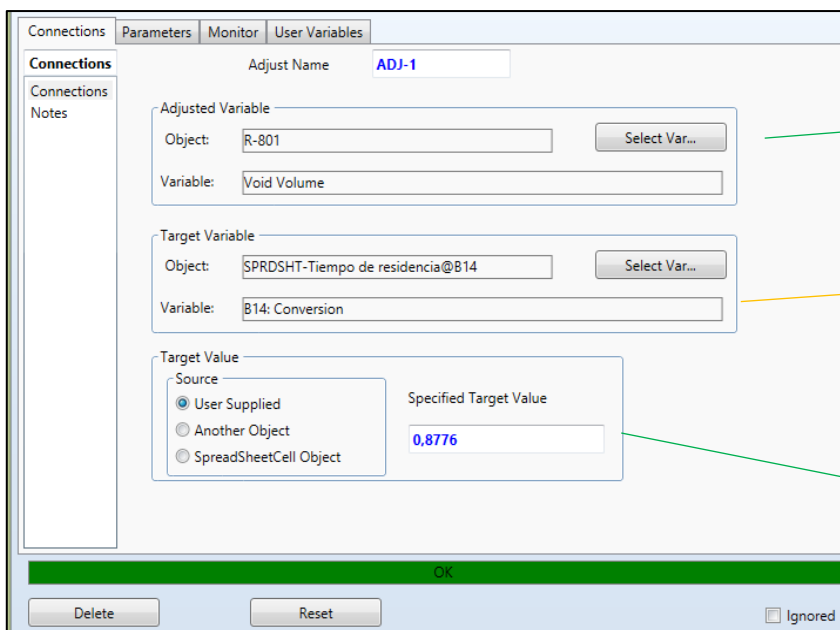


Figura 9. Acondicionamiento corrientes de alimentación previo al reactor.

- Reactor R-801: el reactor utilizado es de tipo flujo pistón “Plug Flow Reactor” cuyo icono es  . Los pasos a seguir en las distintas pestañas de la pantalla para activar este equipo se describen a continuación:
 - **Pestaña “Design”**: en este apartado se indican el nombre del reactor, las corrientes de entrada (N° 8) y salida (N°9) así como la de energía (Q-04), el Delta de P dentro del reactor, el cual se da valor cero.
 - **Pestaña “Reactions”**: se añade el set de reacciones (Set-1) descrito al inicio de la simulación.

- **Pestaña "Rating"**: corresponde a los datos para el dimensionamiento del reactor: fijando volumen total (12.19 m^3), longitud (4m) y número de tubos (1), calculando el diámetro (1.97 m) y espesor pared (0.005 m).
- **Pestaña "Worksheet"**: para definir completamente el reactor, éste necesita conocer el aporte de energía que necesita la reacción. Por ello se fija el dato de temperatura de la corriente de salida, de manera que es el propio reactor el que calcula la energía necesaria. En este caso, se trata de una reacción exotérmica, por lo que la aportación de energía se dedica al enfriamiento del reactor para mantener la temperatura de reacción.

Con el fin de asegurar la conversión de las reacciones que tienen lugar en el reactor, se añade un operador lógico de ajuste que ofrece Hysys denominado "Adjust" y que se presenta con el icono  en la paleta. Este comando se utiliza para variar el valor del volumen vacío o "void volumen" del reactor para cumplir con la especificación de conversión. El volumen vacío se refiere al volumen de poros o espacio entre partículas de catalizador ocupado por el fluido. La conversión es calculada mediante una hoja de cálculo "SPRDSHT-tiempo de residencia". A continuación se muestra la imagen de la pantalla para definir este operador:




Apartado de selección de la variable a ajustar → void volumen del reactor R-801


Apartado de selección de la variable fijada a relacionar con la variable a ajustar → conversión calculada con "SPRDSHT-tiempo de residencia".

Se debe fijar el valor de la conversión manualmente para que el bloque adjust se resuelva.

Figura 10. Operador lógico de ajuste conversión del reactor.

- **Enfriamiento corrientes salida reactor N°10**: se debe disminuir la temperatura de corriente de salida del reactor (de 323.8 a $65 \text{ }^\circ\text{C}$) antes de su entrada en el destilador flash para separar el propileno y propano en forma gas. Con este fin, se añade un enfriador o "cooler" E-803 mediante el comando  de Hysys.

El procedimiento para su definición es idéntico al seguido para el calentador encargado de acondicionar la corriente de entrada al reactor.

- Destilador Flash V-802: este equipo se incluye mediante el icono  de la paleta. Los datos precisados para especificar este aparato son simplemente las corrientes de entrada (Nº11) y salida (Nº12 y 13), él mismo realiza el cálculo de las corrientes de salida.

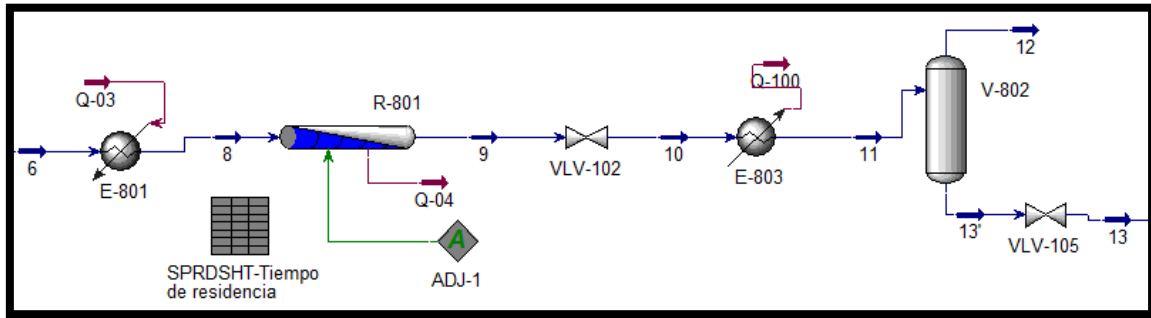



Figura 11. Esquema reactor y separador flash.

- Torre de destilación de benceno T-100: el comando para utilizar este equipo es . Los datos de entrada y procedimiento necesarios para que la torre funcione correctamente son los explicados a continuación:

- **Número de platos** o “stages”: $n=32$.
- **Conexiones**:
 - **Corriente de entrada** Nº13 entra a la columna por el plato 17 (comenzando la numeración de platos desde la parte superior de la torre).
 - **Corrientes de salida** por cabezas y colas: Nº14 y 15 respectivamente. La primera en su mayoría compuesta por benceno que es recirculada al proceso, mientras que la segunda contiene el producto de la reacción principal (cumeno) y el subproducto (DIPB) que pasa a ser la corriente de entrada de la segunda torre de destilación T-101 para ser separados.
 - **Corrientes de energía**: Q-101 para el calderín y Q-102 en el caso del condensador.
- **Presiones del condensador y calderín**: 1.7 y 2 bar respectivamente.
- **Tipo de condensador**: en este caso el condensador es total.

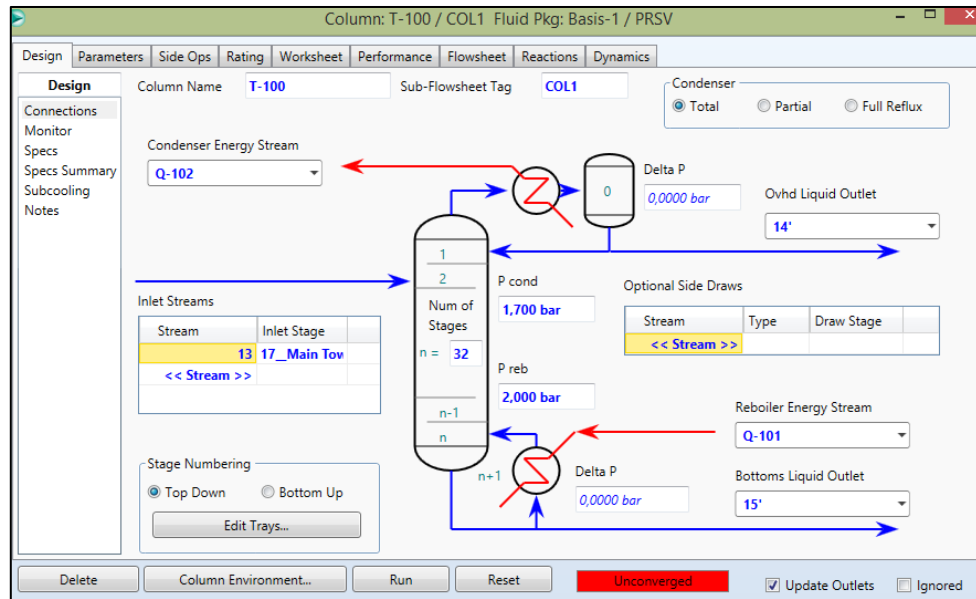


Figura 12. Pantalla introducción datos torre destilación T-100 “connections”.

Estos datos aún son insuficientes para que la torre realice el cálculo y pueda converger como se muestra en la figura 12 (“unconverged”). Para ello, en la pestaña “monitor” se añaden dos especificaciones más: composición de cumeno en la corriente de salida por cabezas y composición de benceno de la corriente de salida por colas, siendo en ambos casos valores muy pequeños para asegurar una separación efectiva. Antes de iniciar el cálculo (botón “Run”) para que la torre converja, se ha de verificar que los grados de libertad para el mismo son cero.

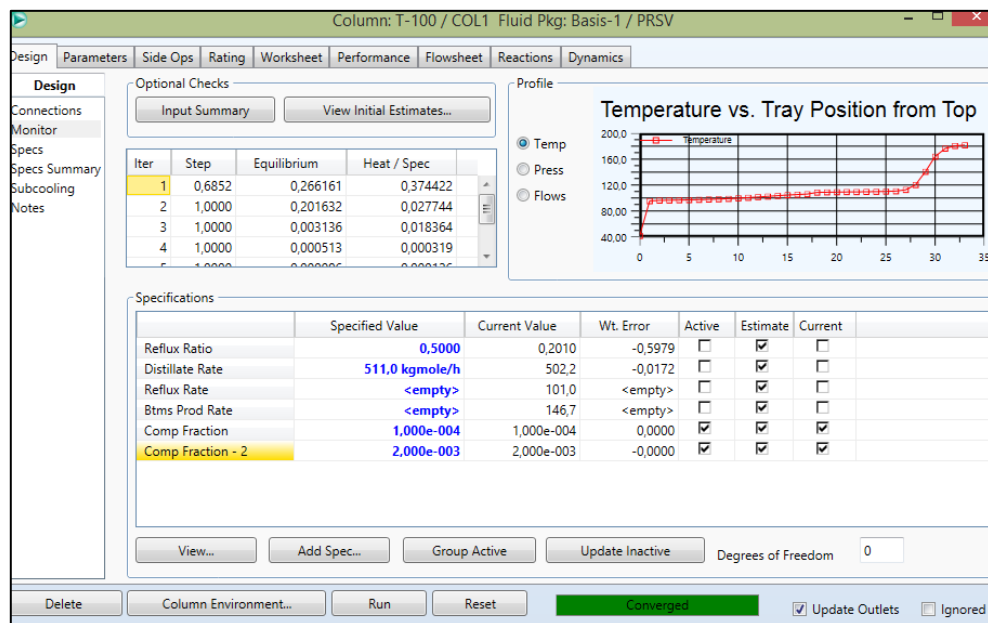


Figura 13. Pantalla de cálculo en la torre destilación T-100 “monitor”.

- Torre de destilación de cumeno T-101: para definir esta segunda torre de destilación, los pasos a seguir son los mismos que los completados en la anterior torre, variando los datos de entrada como se observa en las siguientes imágenes:

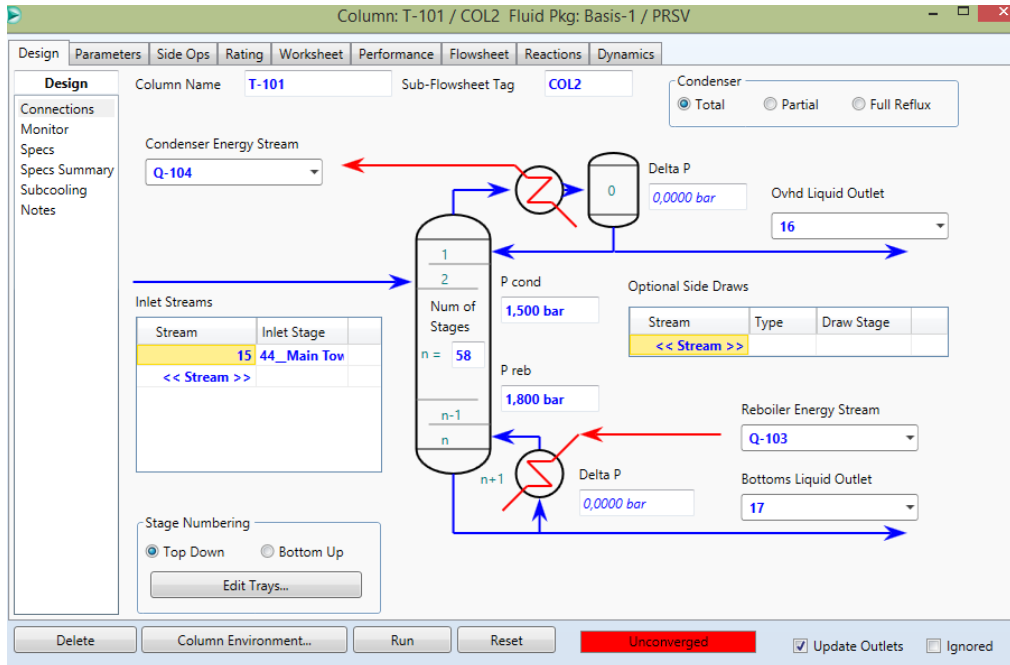


Figura 14. Pantalla introducción datos torre destilación T-101 “connections”.

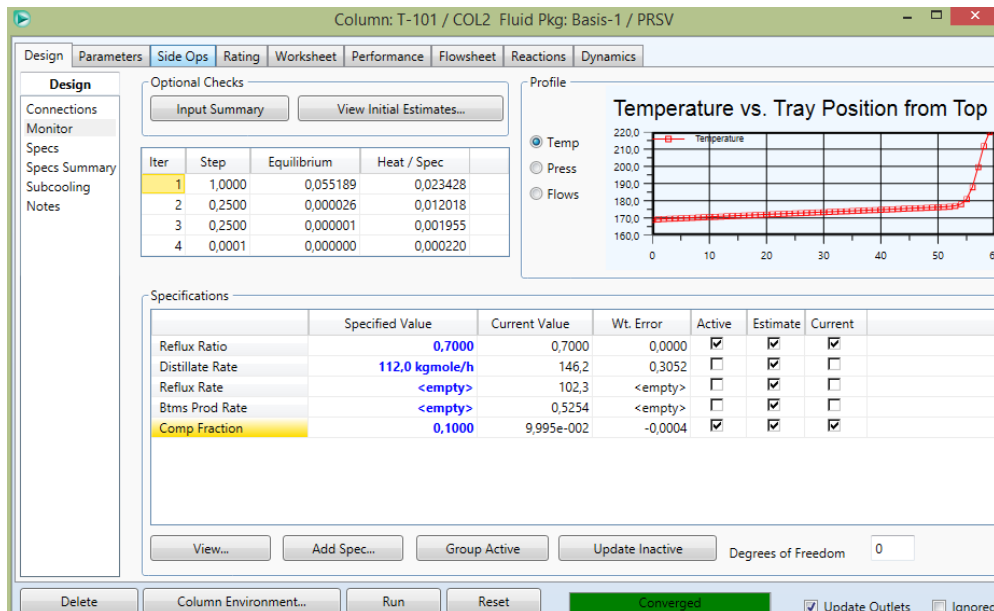





Figura 15. Pantalla de cálculo en la torre destilación T-101 “monitor”.

- Recirculación corriente N°14 benceno: primeramente, esta corriente es acondicionada mediante un enfriador E- 100 para disminuir su temperatura a 40°C. Hysys permite incluir recirculaciones de corrientes en el proceso mediante un operador lógico con el icono  . Para definirlo, simplemente se han de indicar las corrientes de entrada y salida del mismo. Sin embargo, el programa no permite incluir directamente la corriente de salida N°20 de este comando (RCY-1) en el mezclador MIX-100 de corrientes de benceno, ya que se produce un error de cálculo. La acción tomada para solucionar el problema ha sido incluir un fraccionador de corrientes TEE-100 mediante el icono  . Con este comando la corriente N°20 es dividida en 2 corrientes diferentes: N°21 y 22, cuyo flujo depende del ratio que el usuario indique. Inicialmente, en este trabajo se ha dividido a la mitad (ratio para cada corriente 0.5) . Una de estas corrientes (N° 22) es la añadida al equipo MIX-100. Paulatinamente se va aumentando el ratio del flujo de corriente N°22 hasta que la corriente N°21 sea inexistente.

2.2. RÉGIMEN DINÁMICO

La simulación en régimen estacionario suele tener como principales funciones la de optimizar la topología, dimensiones de equipo y valores de las variables de diseño en régimen estacionario, minimizando costes y maximizando la producción del proceso. Sin embargo, para estudiar el comportamiento del sistema frente a una perturbación o bien para proceder a estudio de su puesta en marcha, es necesario encontrarse en **estado dinámico**. Además, en dicho régimen también se incluyen funciones como optimizar el diseño de controladores o confirmar la seguridad y operabilidad de la planta simulada. El régimen dinámico en Hysys utiliza los mismos paquetes de propiedades, cálculo de equilibrio térmico y comportamiento reactivo que el régimen estacionario, aunque las ecuaciones de conservación (materia, energía y componentes) son distintas al presentar término de acumulación en el tiempo, por lo que requieren ser integradas.

Para simular el proceso en dinámico se parte de la simulación en régimen estacionario utilizando el asistente incluido en la barra de herramientas de Hysys cuyo icono es  el cual realiza los cambios necesarios para trabajar en este estado.

Los cambios realizados con respecto al régimen estacionario son los siguientes:

- **Añadición de válvulas:** todas las corrientes que no conecten dos equipos que relacionen el flujo de presiones de las mismas deben presentar este elemento final de control. Las válvulas añadidas son, según muestra la figura 20:
 - Corrientes de alimentación de benceno N° 19 (VLV-107) y 1 (VLV-106).
 - Corriente de salida separador TEE- 100 N°21(VLV-21) procedente de la corriente de recirculación del benceno.

- Corriente N° 12 (VLV-108) salida de vapor del destilador flash.
- Corrientes N° 16 (VLV-109) y 17 (VLV-110) de salida de la segunda torre de destilación T-101, siendo ricas en cumeno y subproducto DIPB respectivamente.
- **Modificación de especificaciones de determinados equipos:**
 - *Válvulas:* en lugar de indicar directamente un valor cero de Delta de P en la válvula, se cambia este valor por su cálculo mediante métodos de dimensionamiento de la válvula, de manera que se da un valor de Cv, con el que se calcula la caída de presión. Hysys recomienda que este valor se encuentre entre 15 y 30 KPa.
 - *Mezcladores o Mixers:* se debe seleccionar la opción “equalize all” de la ventana de parámetros de dicho equipo para que mantenga las presiones de todas las corrientes de entrada y salida con el mismo valor.
 - *Eliminación de operadores lógicos:* se elimina el operador lógico de ajuste de la conversión del reactor “ADJ-1”, ya que en régimen dinámico este operador es ignorado.
 - *Bombas:* en estos equipos se han introducido los valores de las curvas características más ajustadas al caudal que han de impulsar, para un correcto funcionamiento en régimen dinámico.

Tras realizar estos cambios, se utiliza el asistente dinámico indicado anteriormente como ayuda para continuar llevando a cabo los cambios necesarios, apareciendo el siguiente error:

The Dynamics Assistant window displays a list of items for consideration. The following table represents the data shown in the screenshot:

Item	Make changes
Disable stream pressure specifications	✓
Disable stream flow specifications	✓
Enable stream pressure specifications	✓
Append new valves and streams	✓
Valves not sized	✓
Enable pressure flow equations not pressure drop	✓
Enable internal stream flow specifications	✓
Miscellaneous specification changes	✓
Volumes not known	✓
Pressure flow k values not known	✓
Unit operations not supported in dynamics	✗
Tray section pressure profile needs attention	✓
Stream pressures differ from attached stages	✗

The error message in the right screenshot states: "These stream pressures do not match the attached stage pressures:"

No.	Name	Stream P	Stage P
0	13 @COL1	2,000	1,855
1	15 @COL2	2,000	1,726

Annotations in the image explain the errors:

- The error "Unit operations not supported in dynamics" is highlighted in orange and explained as referring to the "adjust" command of the reactor, which should be suppressed.
- The error "Stream pressures differ from attached stages" is highlighted in green and explained as referring to a pressure difference between the inlet stream of each distillation tray and the pressure calculated by the tray.

Figura 16. Pantalla Dynamics Assistant.

Con el fin de eliminar el error indicado por el asistente dinámico referente a la diferencia de presiones entre las corrientes de entrada de las torres (Nº 13 y 15) con sus respectivos platos de entrada (números 17 y 44), se cambia manualmente el valor de estas corrientes de entrada por el valor de presión calculado en el plato, obteniéndolo a partir de la gráfica de presiones por cada fase que ofrece Hysys:

- **Torre destilación T-100 benceno (corriente entrada Nº13):** en la siguiente imagen se encuentra indicada la presión plato de entrada Nº17 y además se puede observar la gráfica con el perfil de presiones de la torre en cada plato.

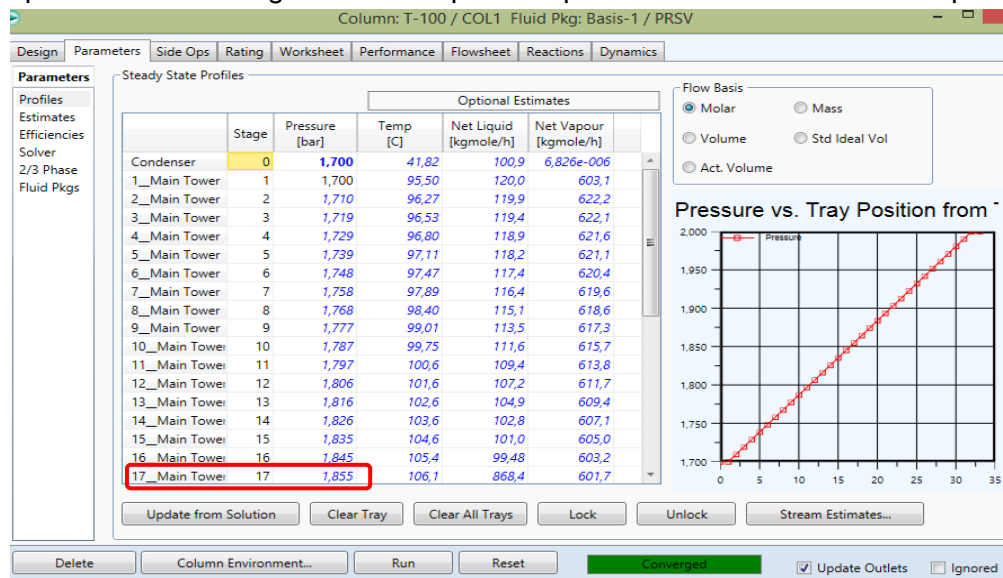


Figura 17. Parámetros calculados por Torre destilación T-100.

- **Torre destilación T-101 cumeno (corriente de entrada Nº15):** en la siguiente figura se encuentra indicada la presión plato de entrada Nº44 y la gráfica con el perfil de presiones de la torre en cada plato.

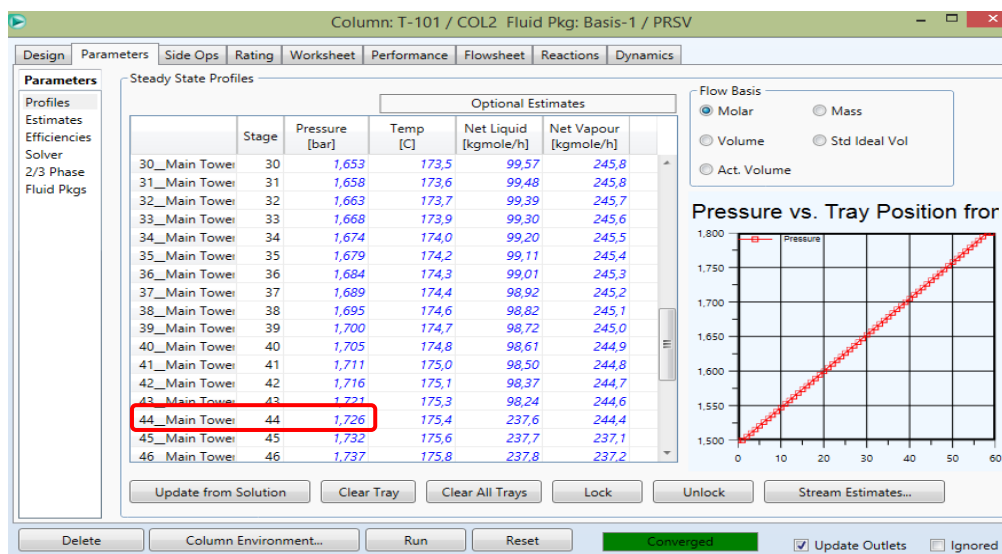


Figura 18. Parámetros calculados por Torre destilación T-101.

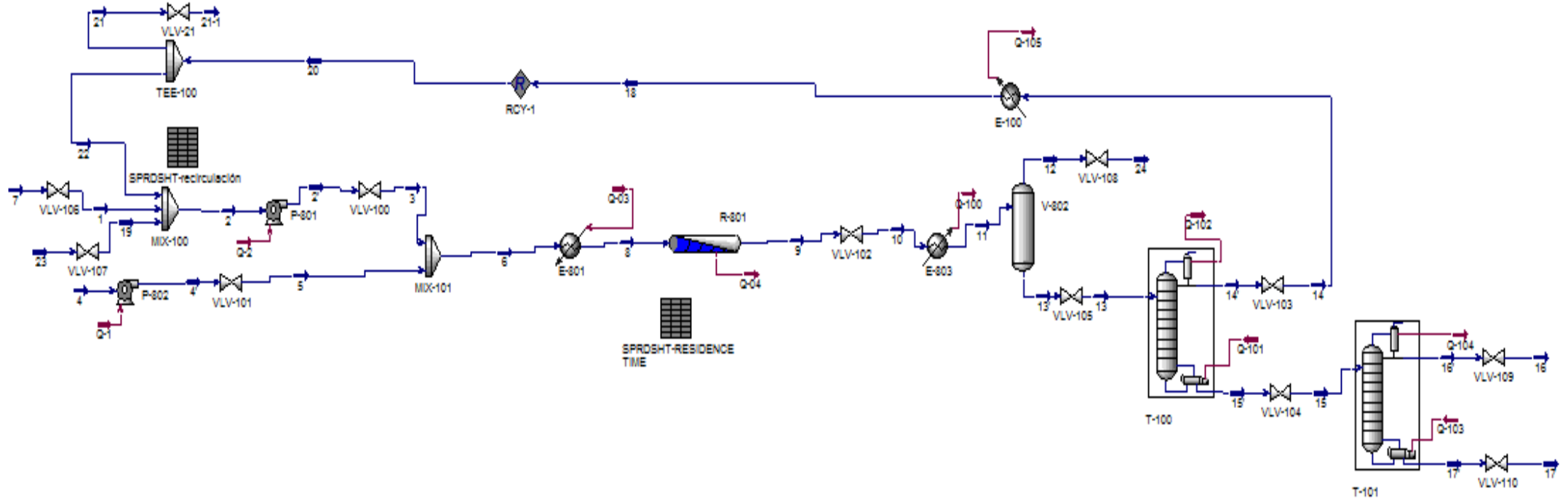


Figura 19 . Simulación régimen dinámico proceso completo producción cumeno.

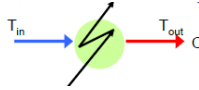
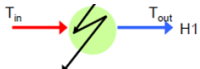
3. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA DEL PROCESO

3.1. TECNOLOGÍA PINCH

La tecnología pinch o de pinzamiento se puede definir como una herramienta ingenieril con la que se busca minimizar el requerimiento energético de una planta de proceso mediante la organización del sistema en una red de intercambiadores. El objetivo de esta red es aprovechar al máximo todas las posibilidades de calentamiento y enfriamiento entre las propias corrientes, disminuyendo así la necesidad de utilizar fuentes externas de energía.

Con esta herramienta se consigue entender la existencia en el sistema de corrientes con suficiente carga energética y otras con requerimiento de la misma.

Para proponer la red de intercambiadores integrada, la tecnología pinch normalmente presenta las siguientes etapas:

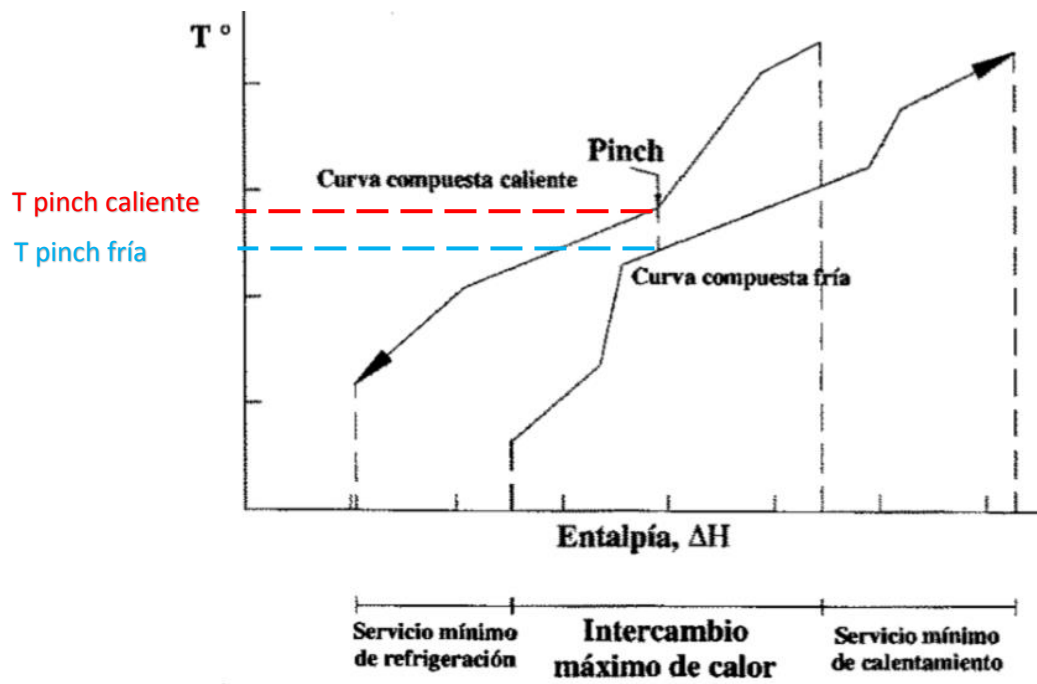
- **Definición del problema**, identificación de las corrientes del sistema. En este trabajo, a partir de la simulación en estado estacionario del sistema en Hysys se identifican las siguientes corrientes frías y calientes, entendiéndose como las mismas:
 - **Corrientes frías (C, cold)**: aquellas que precisan calor para aumentar su temperatura ($T_{in} < T_{out}$). 
 - **Corrientes calientes (H, hot)**: aquellas corrientes que deben ser enfriadas ($T_{in} > T_{out}$). 

Localización	Corrientes	T1 (°c)	T2 (°c)	dh (kw)	mCp (Kw/°C)
Proceso	C1	38,68	350	14770,1	47,44
	H2	323,8	65	-13723,4	53,03
	H3	41,82	40	-17,7	9,71
Torre destilación T-100	H4	95	41,8	-6047,6	113,68
	C5	180,5	181,5	6745,4	6745,40
Torre destilación T-101	H6	169,3	169	-2510,9	8369,72
	C7	211,8	219,9	2371,4	292,76

Los datos de entalpía son proporcionados por la simulación del proceso en estado estacionario. El valor de las capacidades caloríficas (mC_p) de cada corriente se obtiene a partir de la siguiente expresión:

$$dH = mcp * \Delta T_{\text{intervalo}}$$

- **Determinación del punto Pinch:** este análisis se presenta en la construcción de curvas compuestas consistentes en diagramas de temperatura (T) contra entalpía (H). El Pinch se trata de aquel valor de entalpía en dicho diagrama donde la diferencia de temperaturas entre las curvas compuestas caliente y fría es mínima. No se trata de una temperatura únicamente, sino dos valores de la misma: uno correspondiente a la curva caliente y otro a la fría. [6 y 7]



En el presente trabajo, no se van a tener en cuenta todas las corrientes del sistema, ya que no se pretende encontrar la integración energética completa del proceso, sino estudiar el diferente comportamiento del sistema cuando se intercambia calor entre alguna de las corrientes del mismo.

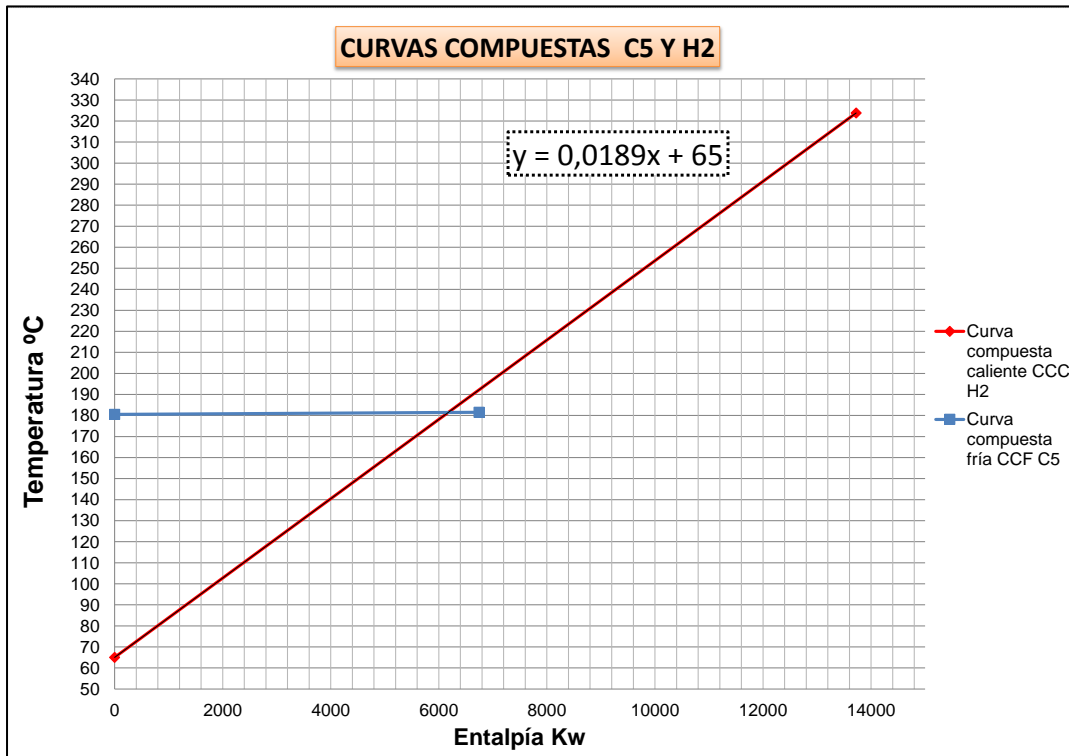
Con este fin, se proponen dos opciones de intercambio de energía entre dos corrientes del proceso (una fría y otra caliente):

- Integración energética opción 1

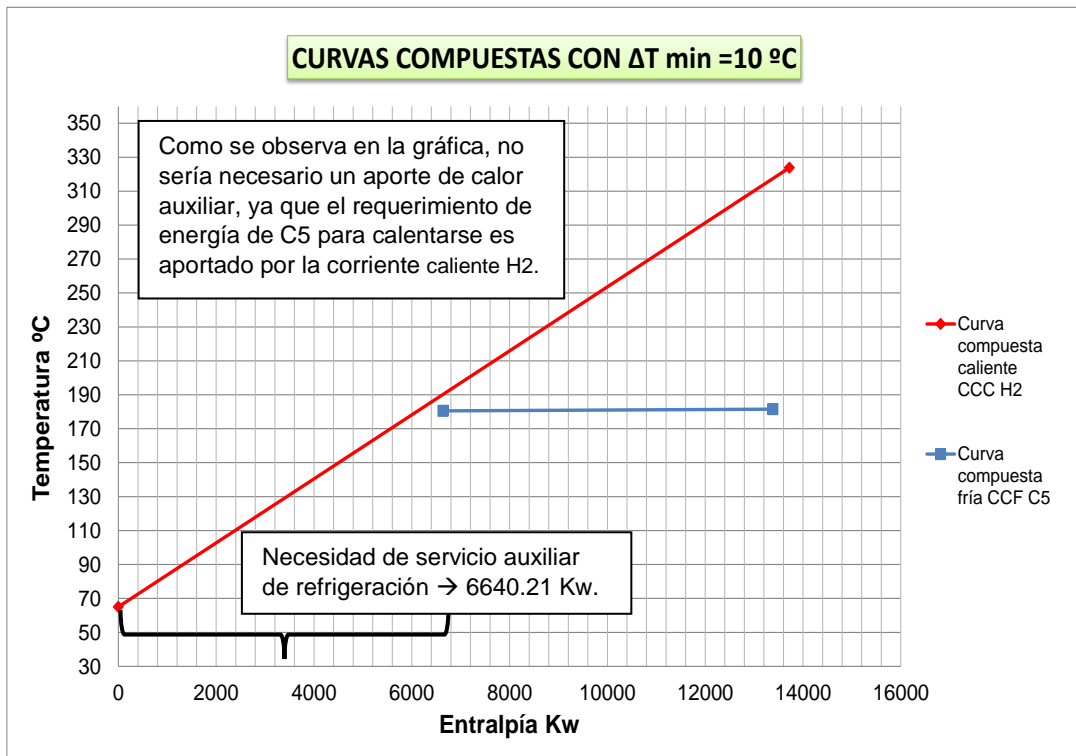
Las corrientes seleccionadas para intercambiar calor son H2 (Corriente caliente tras salida reactor) y C5 (corriente fría procedente del calderín de la primera torre de destilación T-100).

En primer lugar se representan dichas corrientes en el diagrama T y H indicado anteriormente:

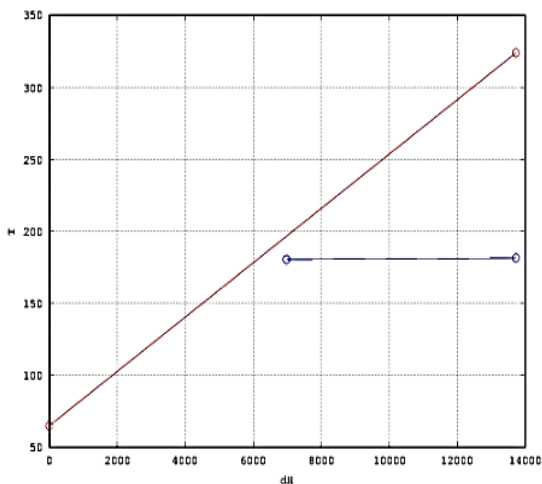
Localización corrientes	DATOS				
	Corrientes	T1 (°c)	T2 (°c)	dh (kw)	mCp (Kw/°c)
Corriente salida de reactor	H2	323,8	65	-13723	53,03
Calderín torre Destilación 100	C5	180,5	181,5	6745,4	6745,40



La diferencia de temperatura mínima (ΔT_{min}) seleccionada como punto pinch entre ambas corrientes es de 10 °C. Como se observa en la gráfica, la corriente fría se ha de desplazar hacia la derecha para mantener esta diferencia de temperatura. Dicha cantidad de entalpía para conseguir el valor de ΔT_{min} establecido, es calculada inicialmente a partir de la ecuación de la línea de tendencia de CCC que aparece en la gráfica. La obtención del valor de H para el cual $\Delta T_{min}=10$ °C entre el punto 180.5 °C de C5 y la curva CCC, se realiza sustituyendo el valor 190.5 en la "y" de la ecuación. El punto "x" obtenido es de 6640,21 Kw, siendo las necesidades de refrigeración auxiliar que tendría el sistema.



Para verificar el valor exacto de necesidades auxiliares de refrigeración obtenidas mediante la aproximación gráfica, se utiliza el programa de cálculo para el análisis de integración de calor proporcionado por el departamento de IQ de la UVA, cuyo enlace es "<http://hix.eii.uva.es/hix/fb.pl>" (Junio 2016). El resultado obtenido es:



El resultado obtenido para un $\Delta T_{min} = 10\text{ }^{\circ}\text{C}$ es similar a la aproximación gráfica anterior:

- No existe la necesidad de servicios auxiliares de calefacción.
- Cantidad de energía auxiliar de refrigeración: **6978 Kw**, ligeramente superior al valor calculado en la aproximación gráfica. Este es el valor utilizado posteriormente en la simulación del proceso integrado.

Problem Table:

Hot composite:				Cold composite:	
T1	T2	dH	mCp	T1	dH
323.8	65.0	-13723.40	53.0270	65.0	0.00
180.5	181.5	6745.40	6745.4000	323.8	13723.40

Cold composite:	
T1	dH
180.5	6978.00
181.5	13723.40

$\Delta T_{min} = 10.00$
 minHeating = 0.0
 minCooling = 6978.0

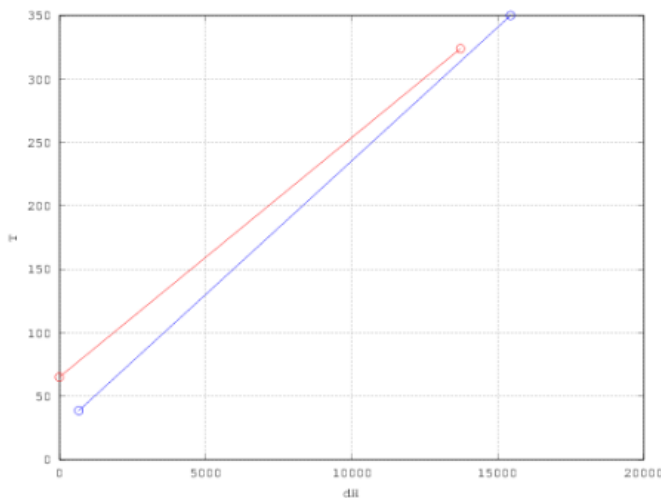
- Integración energética opción 2.

En este caso, las corrientes elegidas para intercambiar calor son C1 (corriente de entrada al reactor) y H2 (Corriente caliente tras salida reactor). Para conocer los servicios auxiliares de energía, se ha procedido a su cálculo directo con la herramienta informática de análisis de integración energética de la UVA indicado anteriormente.

Localización corrientes	DATOS				
	Corrientes	T1 (°c)	T2 (°c)	dH (kw)	mCp (Kw/°C)
Corriente salida de reactor	H2	323,8	65	-13723,4	53,03
Corriente entrada de reactor	C1	38,68	350	14770,1	47,44

Como se observa en la tabla de datos, estas corrientes presentan unos gradientes de temperatura mayores que en la anterior integración, siendo las dos corrientes del proceso que requieren más energía para ser enfriada y calentada respectivamente. Por esta razón, a primera vista se puede indicar que sería la parte del proceso donde se produciría un mayor aprovechamiento energético.

El resultado del cálculo del punto Pinch es:



En este caso, como se observa también gráficamente, el sistema precisa servicios auxiliares tanto de calefacción como de refrigeración, siendo sus valores:

- Servicio mínimo de calefacción: **1717.5 Kw.**
- Servicio mínimo de refrigeración: **670.8 Kw.**

Problem Table:

T1	T2	dH	mCp
323.8	65.0	-13723.40	53.0270
38.7	350.0	14770.10	47.4435

Hot composite:

T1	dH
65.0	0.00
323.8	13723.40

Cold composite:

T1	dH
38.7	670.75
350.0	15440.85

$\Delta T_{min} = 10.00$
 minHeating = 1717.5
 minCooling = 670.8

4. SIMULACIÓN DE LOS PROCESOS INTEGRADOS EN HYSYS

La simulación de las dos opciones de integración energética descritas previamente se ha realizado mediante un operador lógico de cálculo, utilizando el comando “SPRDSHT” en lugar de incluir un equipo de intercambio, con el fin de simplificar el sistema y estudiar el comportamiento del mismo en dinámico sin la posible interferencia de alguna variable de diseño del intercambiador.

El comando lógico se encarga de intercambiar entre las corrientes implicadas el calor necesario según los cálculos previos del punto “pinch” descritos anteriormente. A continuación se describe detalladamente el procedimiento seguido.

4.1. INTEGRACIÓN OPCIÓN 1

En primer lugar, se realiza la simulación en régimen estacionario del proceso integrado. Para ello, se parte del fichero de la simulación en este régimen del sistema original.

Se añade el comando “SPRDSHT-Integración”, en el cual se indica que realice el intercambio del valor del calor entre el enfriador E-803 (Q-100) y el calderín de la torre de destilación de benceno T-100 (Q-109).

El valor de energía a intercambiar que se ha de indicar en este operador, se obtiene restando del calor total en estado estacionario que necesita el enfriador ($1,118 \cdot 10^7$ Kcal/h) la cantidad correspondiente de servicios auxiliares de refrigeración calculados en el estudio pinch ($6978 \text{ Kw} = 6 \cdot 10^6$ Kcal/h), los cuales serán añadidos con un segundo equipo de refrigeración (E-101) situado tras el enfriador inicial (E-803) . El resultado de esta diferencia es $5,18 \cdot 10^6$ Kcal/h. Este dato es introducido en el “SPRDSHT” y Hysys realiza de nuevo el cálculo en las torres destilación, al afectar el cambio a una de ellas directamente. Para que la columna converja, el valor de calor utilizado para el intercambio es ligeramente diferente al introducido inicialmente ($5,431 \cdot 10^6$ Kcal/h).

	A	B	C
1			
2	Q-100 cooler	5.431e+006 kcal/h	
3			
4	Calor reboiler T100	5.431e+006 kcal/h	
5			
6			
7			

Cantidad de calor en Kcal/h que debe ceder el enfriador E-803 (Q-100) importado del valor dado por HYSYS. Para obtener este dato, se indica la Tª de la corriente de salida, la cual es previamente simulada en función del calor calculado de intercambio .

La misma cantidad de calor es exportada a la corriente de energía Q-109 del calderín de la torre de destilación T-100.

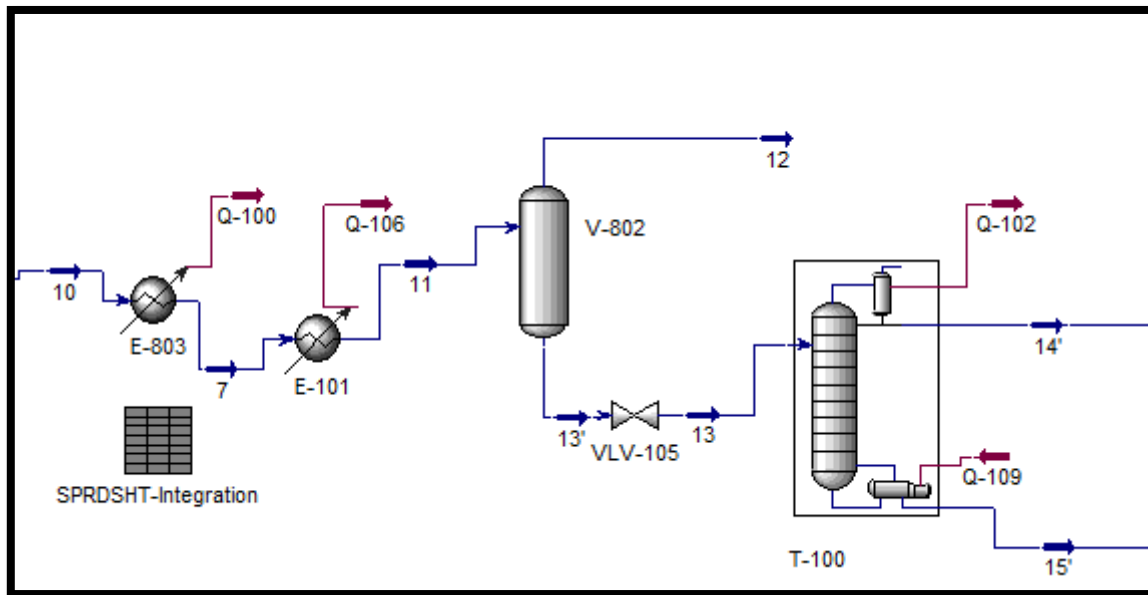


Figura 20. Simulación en estacionario proceso integrado opción 1.

4.2. INTEGRACIÓN OPCIÓN 2

El procedimiento a seguir en esta simulación es similar al descrito en el anterior apartado, variando el valor introducido en el comando lógico en función de los resultados del cálculo del punto pinch.

En este caso, se precisan servicios auxiliares tanto de refrigeración como de calefacción por lo que se han de añadir un enfriador (E-102) y un calentador (E-101) que aporten dicha energía tras los respectivos equipos (E-801 y E-803), como se muestra en la figura 23.

El calor a intercambiar indicado en el comando "SPRDSHT-integración" se calcula de la misma forma que en el apartado anterior:

- Servicios auxiliares:
 - Calefacción: $1717,5 \text{ Kw} = 1,476 \cdot 10^6 \text{ Kcal/h.}$
 - Refrigeración: $670.8 \text{ Kw} = 5,767 \cdot 10^5 \text{ Kcal/h.}$
- Energía necesaria en cada corriente:
 - Q-03 (Calentador E-801): $1,227 \cdot 10^7 \text{ Kcal/h.}$
 - Q-100 (Enfriador E-803): $1,118 \cdot 10^7 \text{ Kcal/h.}$
- Cantidad a intercambiar: $1,227 \cdot 10^7 - 1.476 \cdot 10^6 = \mathbf{1,079 \cdot 10^7 \text{ Kcal/h.}}$

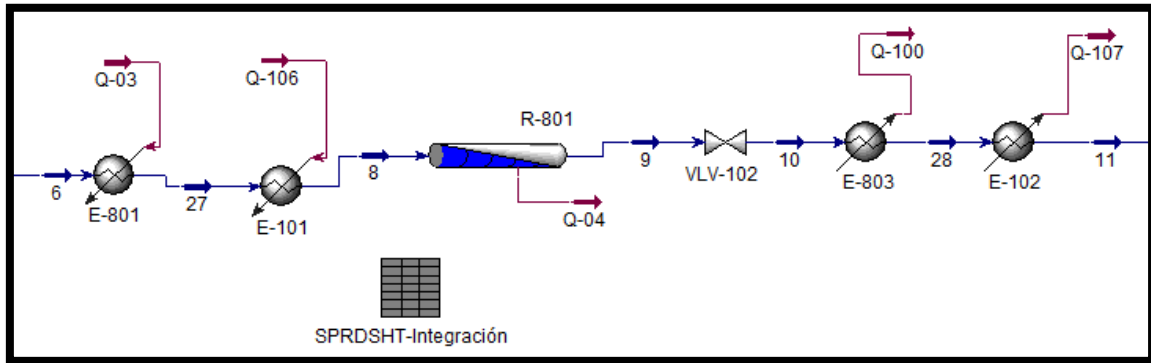
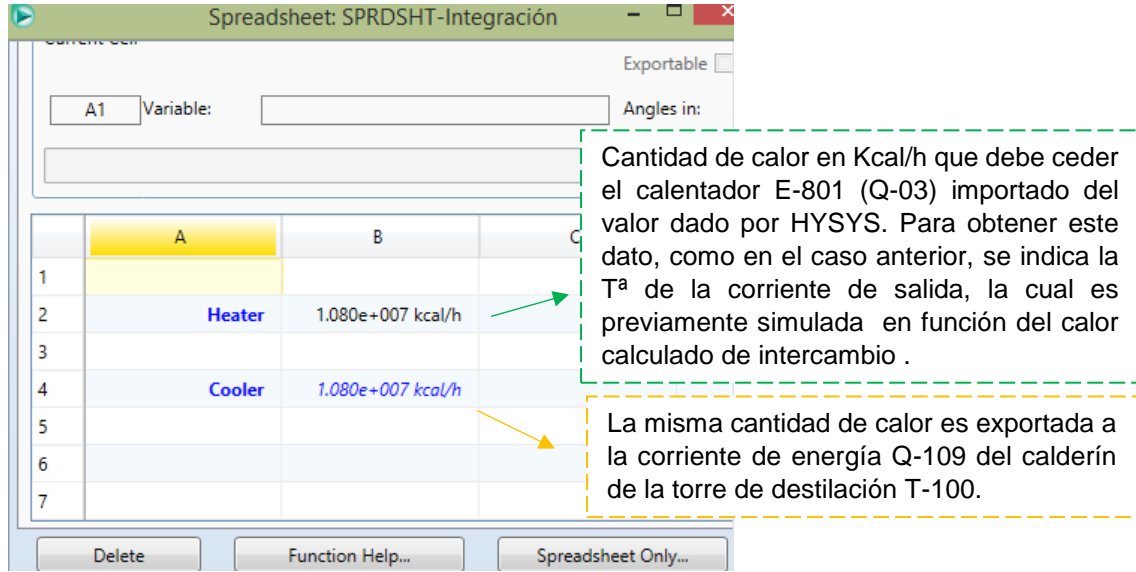


Figura 21. Simulación en estacionario proceso integrado opción 2.

5. AHORRO ENERGÉTICO

Tras la realización de las integraciones energéticas, se procede a comparar las ganancias de energía en régimen estacionario que se obtienen con ambas opciones respecto al sistema original.

A continuación, se muestran en detalle los datos energéticos referentes al consumo de calefacción y refrigeración para cada uno de los sistemas:

PROCESO ORIGINAL PRODUCCIÓN CUMENO										
REFRIGERACIÓN						CALEFACCIÓN				
Denominación	Q-04	Q-100	Q-102	Q-104	Q-105	Total	Q-103	Q-03	Q-101	Total
Equipo	R-801	E-803	Condenser T-100	Condenser T-101	E-100		Reboiler T-101	E-801	Reboiler T-100	
kcal/h	3,70E+06	1,12E+07	5,22E+06	2,16E+06	1,52E+04	2,23E+07	2,04E+06	1,23E+07	5,85E+06	2,02E+07



PROCESO PRODUCCIÓN CUMENO INTEGRADO OPCIÓN 1											
REFRIGERACIÓN							CALEFACCIÓN				
Denominación	Q-04	Q-100	Q-102	Q-104	Q-105	Q-106	Total	Q-103	Q-03	Q-109	Total
Equipo	R-801	E-803	Condenser T-100	Condenser T-101	E-100	E-101		Reboiler T-101	E-801	Reboiler T-100	
kcal/h	3,69E+06	5,47E+06	4,84E+06	2,15E+06	2,13E+03	6,00E+06	1,67E+07	2,03E+06	1,26E+07	5,47E+06	1,46E+07

PROCESO PRODUCCIÓN CUMENO INTEGRADO OPCIÓN 2												
REFRIGERACIÓN							CALEFACCIÓN					
Denominación	Q-04	Q-100	Q-102	Q-104	Q-105	Q-107	Total	Q-103	Q-03	Q-101	Q-106	Total
Equipo	R-801	E-803	Condenser T-100	Condenser T-101	E-100	E-102		Reboiler T-101	E-801	Reboiler T-100	E-101	
kcal/h	3,70E+06	1,08E+07	5,21E+06	2,16E+06	1,52E+04	3,84E+05	1,15E+07	2,07E+06	1,08E+07	5,81E+06	1,48E+06	9,35E+06

Los valores de energía indicados en color amarillo corresponden a los intercambiados en ambos procesos. Éstos no son añadidos al sumatorio final con el fin de comparar el ahorro o ganancia energética de cada opción con el sistema de origen. En el caso de los valores resaltados en azul (Q-106 opc. 1 y Q107 opc. 2), representan los servicios auxiliares de refrigeración, mientras que en color rojo (Q-106 opc.2) se encuentran los de calefacción.

El ahorro energético global obtenido con cada una de las opciones con respecto al requerimiento inicial se muestra en las siguientes tablas explicativas:

REFRIGERACIÓN		
Ganancias	Opción 1	Opción 2
kcal/h	5,591E+06	1,080E+07
%	21,5 %	48,5 %

CALEFACCIÓN		
Ganancias	Opción 1	Opción 2
kcal/h	5,550E+06	1,081E+07
%	27,5 %	53,6 %


Analizando este resultado, se puede concluir que la integración correspondiente a la opción 2 es, tanto en ahorro de refrigeración como calefacción, beneficiosa en mayor medida que la opción 1, ya que, para una misma cantidad y pureza de producto cumeno a la salida del proceso, se ahorra prácticamente el doble de la ganancia conseguida en la integración de la opción 1.

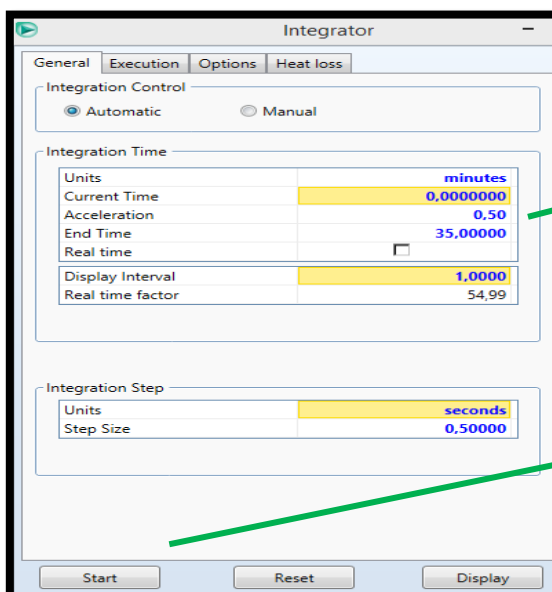
De esta manera se confirma y cuantifica la hipótesis inicial de mayor beneficio energético con la elección de las corrientes a integrar en la opción 2, debido a su elevado gradiente de temperaturas y necesidades energéticas similares.

6. COMPARATIVA COMPORTAMIENTO PROCESOS

En este apartado del trabajo, se va a proceder a realizar un estudio comparativo entre el comportamiento en régimen dinámico del proceso original y las dos opciones de integración energética propuestas, así como de la respuesta de dichos sistemas frente a una perturbación en las condiciones de una de sus corrientes de entrada. La metodología seguida ha sido realizar un estudio, en primer lugar del comportamiento dinámico del sistema sin ningún tipo de control. Esto es debido a que no se puede asegurar que ninguna topología de control implementada sea la óptima para cada una de las opciones, y en todo caso no se puede asegurar que el conjunto de los parámetros de ajuste de los sistemas de control sea óptimo. Esta forma de proceder permite analizar el comportamiento del sistema en función de su naturaleza dinámica sin intervención. De esta manera, la estabilidad proveniente de la simulación permitirá estimar cuál de las opciones sería susceptible de un control más fácilmente operable.

Este estudio se ha llevado a cabo en dos etapas sucesivas, tanto para el sistema sin integrar como para las dos opciones integradas. En una primera etapa se ha seguido el comportamiento de algunas de las variables claves del sistema partiendo de un estado estacionario y dejando evolucionar libremente al proceso en el tiempo. En una segunda etapa, se ha repetido este estudio pero introduciendo diferentes perturbaciones en una de las corrientes de entrada del sistema.

Con este fin, se parte de la simulación en estado dinámico de los tres procesos descritos y, mediante la herramienta dinámica “Integrator”  de Hysys, se inicia la integración en el tiempo de los sistemas, indicándoles una aceleración y duración determinadas:



Valor de aceleración: 0,5 min

Tiempo total de integración: 35 min, elegido tras varias integraciones como tiempo suficiente para realizar el análisis propuesto en todos los procesos.

Estos valores se mantienen para todas las integraciones realizadas en este trabajo, de manera que se comparen los resultados en las mismas condiciones y eliminando posibles variables que afecten a los mismos.

Una vez indicados estos dos valores, se inicializa la integración pulsando el botón “start”.

Para ayudar a observar el comportamiento de los sistemas al ser integrados en el tiempo, HYSYS ofrece la posibilidad de producir unas gráficas (“Strip Charts”) donde se reflejen las variaciones en el tiempo de las variables y en las corrientes o equipos que el usuario desee y elija. En este caso, se ha decidido tomar como variable de estudio el producto del proceso cumeno, al ser el compuesto de mayor importancia ya que su cantidad y calidad definen la productividad del sistema.

Seguidamente, se muestran las gráficas del comportamiento en dinámico de los tres sistemas donde se representan el flujo, la temperatura y la composición de cumeno en la corriente N° 16 de salida por cabezas de la torre de destilación T-101, rica en cumeno.

6.1. SIN PERTURBACIÓN

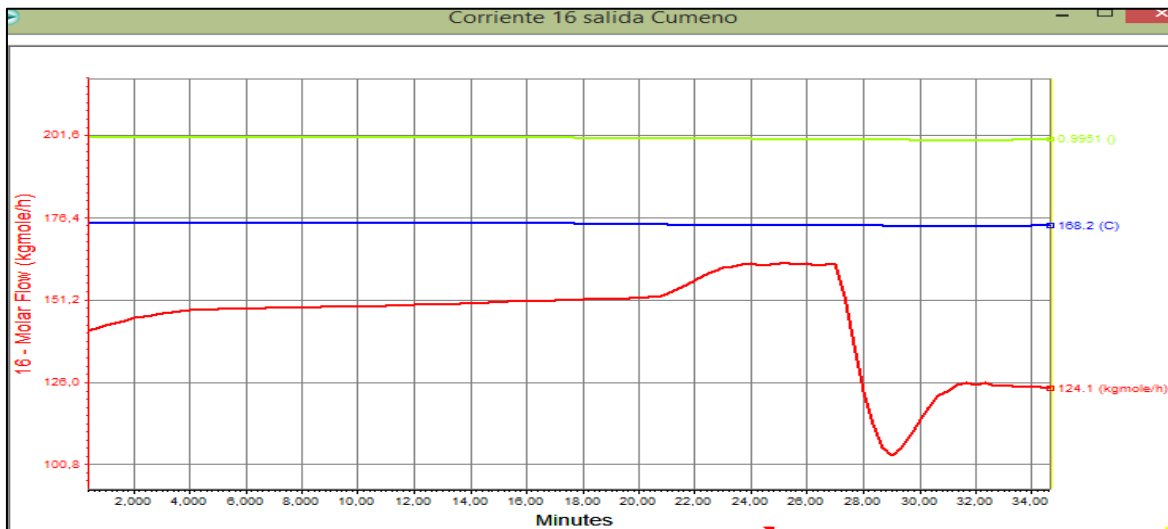


Figura 22. Proceso original: Corriente N° 16 salida cumeno

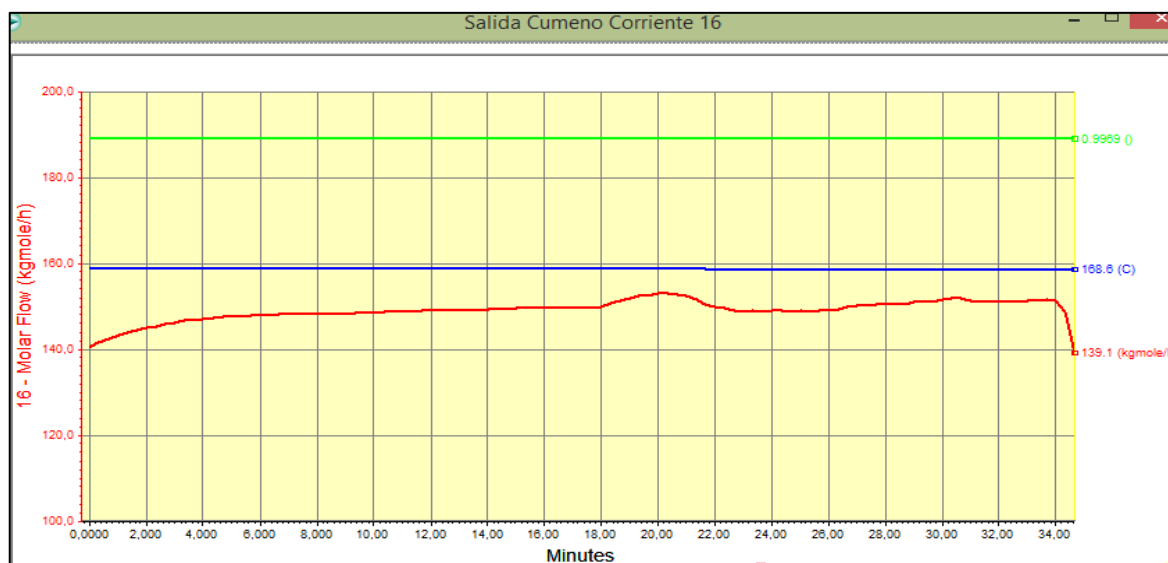


Figura 23. Integración Opción 1: Corriente N° 16 salida cumeno

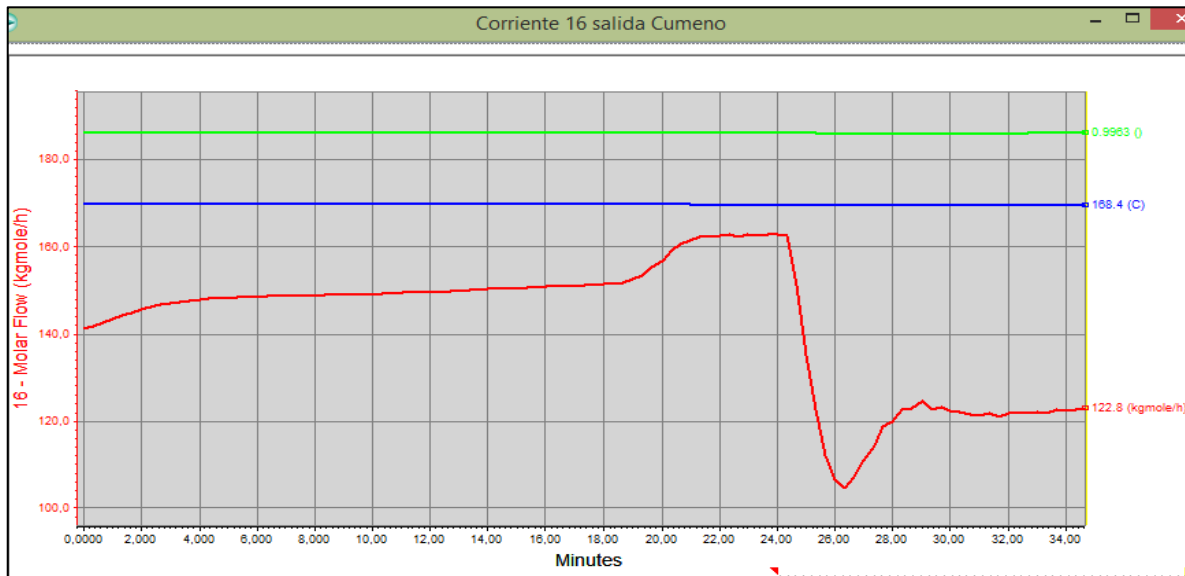


Figura 24. Integración Opción 1: Corriente N° 16 salida cumeno

Como se observa en las figuras 22, 23 y 24, los valores de temperatura y composición de cumeno en la corriente de salida N°16 son prácticamente constantes a lo largo de la integración y de valores similares entre cada uno de los sistemas. Sin embargo, en el caso de la variable flujo molar, se puede indicar que existen variaciones del mismo a lo largo del tiempo, siendo más acusadas y de mayor magnitud en los sistemas original e integrado según la opción 2. Se debe destacar que estos dos últimos sistemas tienen un comportamiento en régimen dinámico prácticamente idéntico, según se aprecia en la curva del caudal. Éste experimenta en ambos casos un ligero aumento (presente en primer lugar en el sistema integrado) y un posterior descenso drástico hasta volver a aumentar y estabilizarse. En la integración opción 1, esta variable presenta cambios en su comportamiento menos marcados que en los otros dos casos, sufriendo una disminución brusca al llegar prácticamente al final de la integración en el tiempo. Este comportamiento de reducción de flujo puede decirse que es similar en los tres sistemas, con la diferencia de que, en el integrado 1, se manifiesta en un tiempo más avanzado de la integración. Si se recuerda que se está dejando evolucionar libremente al sistema, es decir, sin ejercer acciones de control sobre él, esta diferencia vendría a indicar una mayor estabilidad intrínseca del proceso integrado 1.

Con el fin de intentar comprender y explicar estas similitudes y diferencias de comportamiento dinámico entre los sistemas, así como poder identificar el origen de las variaciones en los mismos, se procede a estudiar, siguiendo el método anterior, la corriente de entrada a la segunda torre de destilación N°15, considerada clave para las condiciones de salida del cumeno:

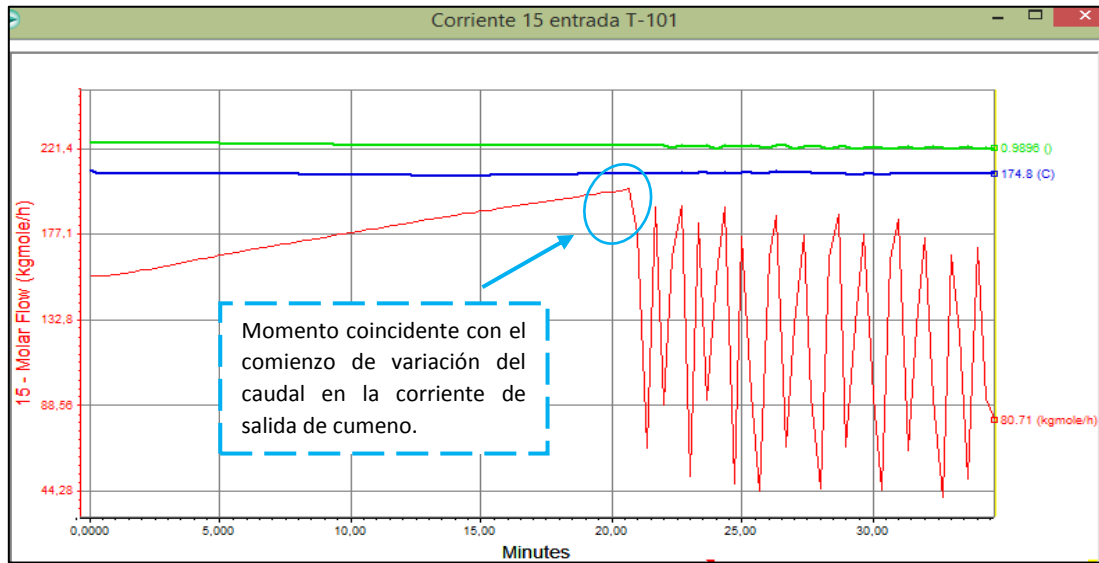


Figura 25. *Proceso original: Corriente Nº 15 entrada Torre destilación.*

Analizando la fig. 25, se observa que, a partir de los 20 minutos de integración, el flujo de la corriente de entrada a la torre comienza a oscilar bruscamente tras un aumento constante. Este comportamiento puede explicar que la curva de caudal correspondiente a la salida de cumeno de dicha torre en el mismo tiempo (a los 20 minutos) comience a variar tras un período de valor estable.

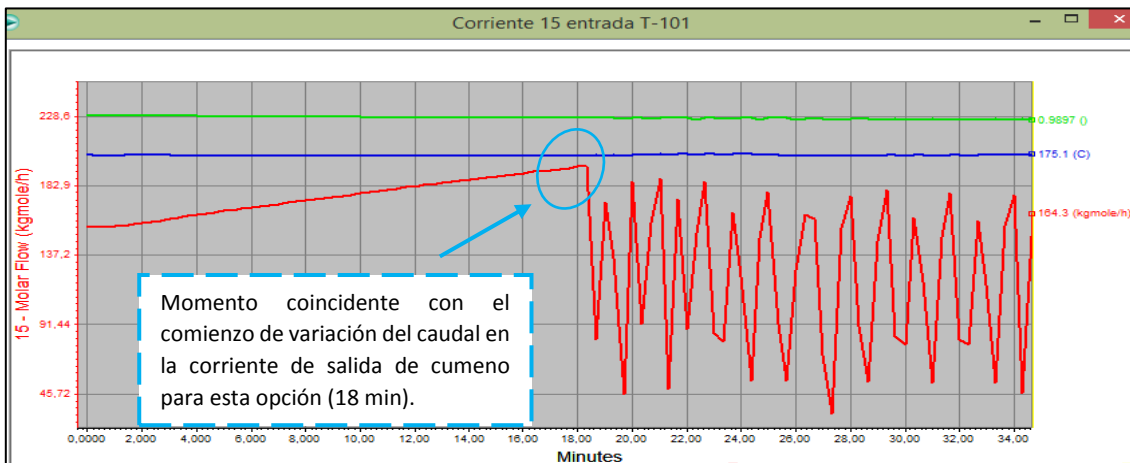


Figura 26. *Integración opción 2: Corriente Nº 15 entrada Torre destilación.*

Frente a este resultado, se confirma el idéntico comportamiento en la corriente de entrada a la torre T-101 del sistema integrado energéticamente según la opción 2 que el sistema original, como puede verse en la fig. 26.

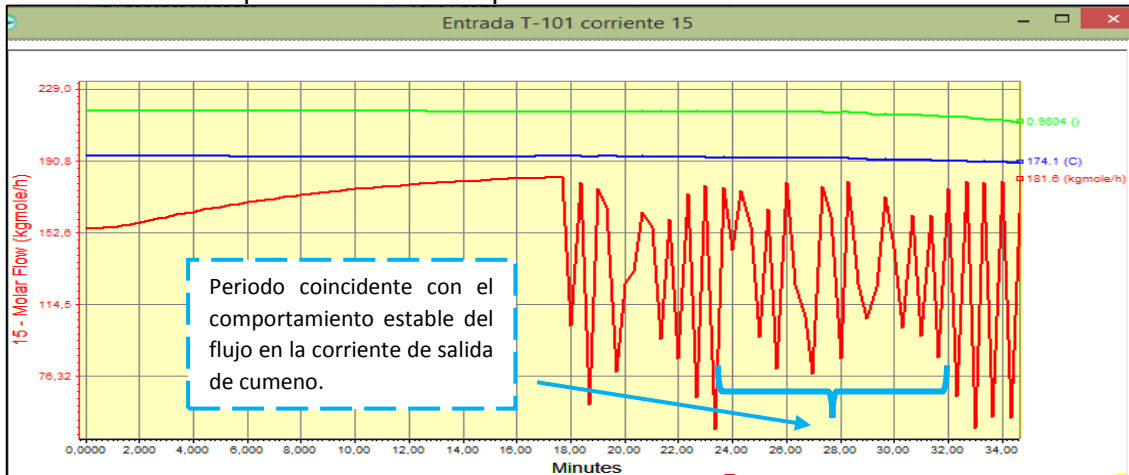


Figura 27. Integración opción 1: Corriente N° 15 entrada Torre destilación.

En la fig. 27 se observa el mismo comportamiento que en el caso original, con la diferencia de que la oscilación en el valor del flujo aparece con antelación (18 minutos), correspondiéndose de igual manera a la respuesta de esta curva en la salida de cumeno.

Según la gráfica de salida de cumeno para esta opción 1 estudiada anteriormente (fig 24), el flujo se mantenía más estable durante un periodo de 10 minutos que en los otros sistemas, hasta que finalmente se daba la disminución del mismo. La explicación a este comportamiento puede ser dada al observar que, en el mismo periodo de estabilidad de esta integración (entre los 24 y 32 minutos), la oscilación de la curva del caudal en la corriente de entrada de la torre es menor que en el resto de sistemas, coincidiendo su posterior incremento de variación con la caída de caudal señalada en la corriente de salida.

Estas oscilaciones de flujo obtenidas en un determinado punto de la integración en el tiempo se puede concluir que son influenciadas por el funcionamiento irregular e incontrolado de la torre de destilación T-100 previa a la segunda torre T-101, donde se separa el benceno recirculado al proceso. Se ha de tener en cuenta que pueden existir errores numéricos en el software de Hysys que provoquen dicho comportamiento inestable.

6.2. REGÍMENES PERTURBADOS

La corriente de entrada N°4 correspondiente al reactivo propileno es sometida a dos tipos de perturbaciones en sus condiciones iniciales. Estas perturbaciones consisten en la modificación, por separado, de los valores de presión y temperatura de dicha corriente. Se han elegido estas variables ya que, en primer lugar son las que habitualmente pueden sufrir más variaciones en un sistema real y, además, debido a que HYSYS únicamente permite cambiar dichos valores de las corrientes de entrada.

Todas las perturbaciones se incluyen en el sistema transcurrido 1 minuto del inicio de la integración en el tiempo, con el fin de analizar su comportamiento en las mismas condiciones.

6.2.1 AUMENTO DE TEMPERATURA

El objetivo de este apartado es someter al sistema a una perturbación de temperatura extrema con el fin de observar más claramente sus respuestas. El incremento de esta variable efectuado es un 60 % de la temperatura que presenta la corriente de entrada de propileno, adquiriendo el valor de 40°C.

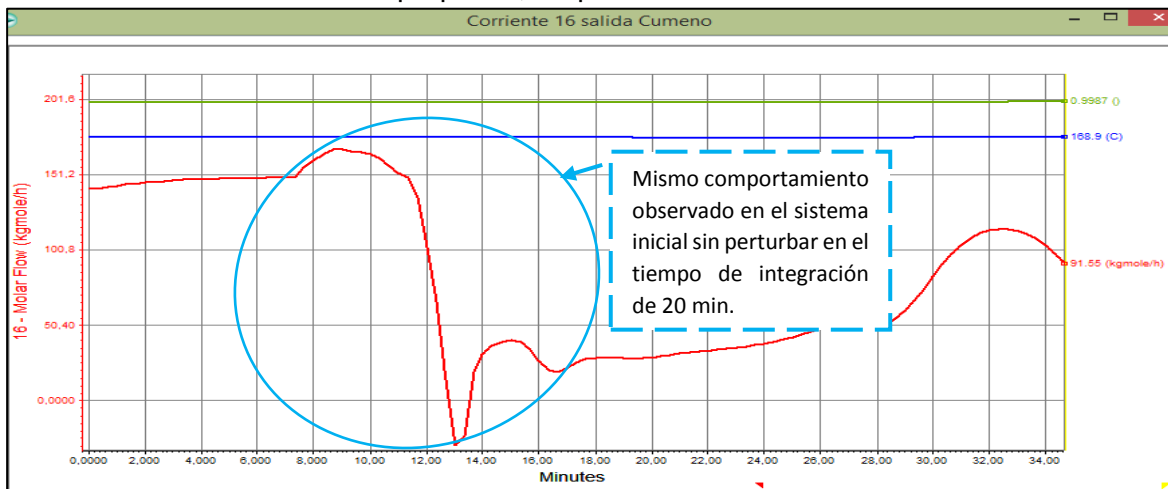


Figura 28. *Proceso original: Corriente 16 salida cumeno*

Comparando este resultado (fig. 28) con el obtenido sin ninguna perturbación (fig. 22), se observa que tanto la temperatura como la composición de cumeno a la salida se mantienen en valores similares sin verse afectados por la variación de temperatura. En el caso del flujo, se aprecia el mismo comportamiento que el sistema sin perturbar pero manifestado aproximadamente 12 minutos antes en el sistema perturbado.

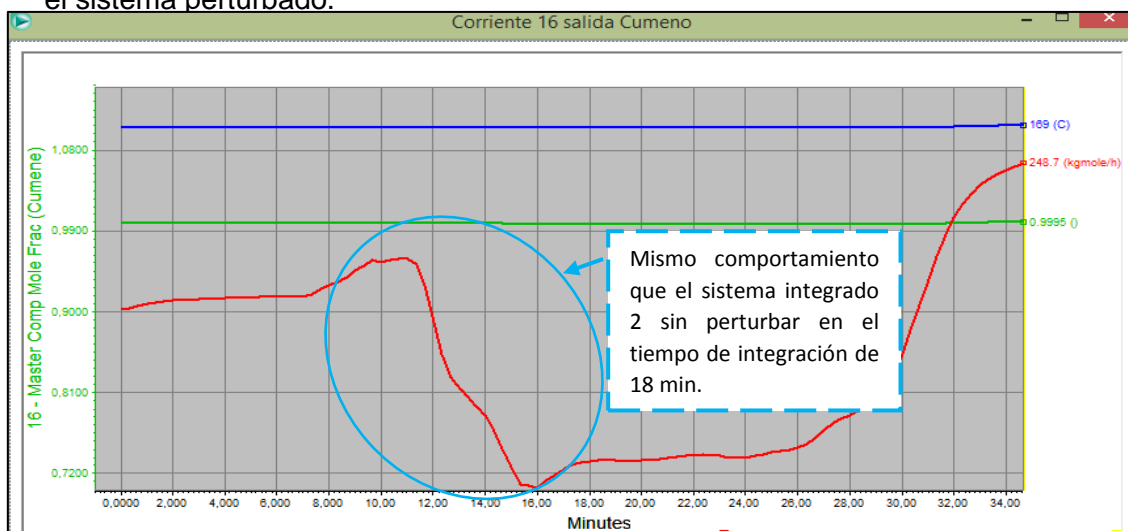


Figura 29. *Integración Opción 2: Corriente 16 salida cumeno*

Como ocurre con el proceso sin perturbar, este sistema integrado 2 se comporta de forma similar al recibir un incremento de temperatura de una de las corrientes de entrada que el sistema en condiciones normales. Sin embargo, en este caso la variación brusca del flujo se produce alrededor de 10 minutos antes que en el sistema sin perturbación.

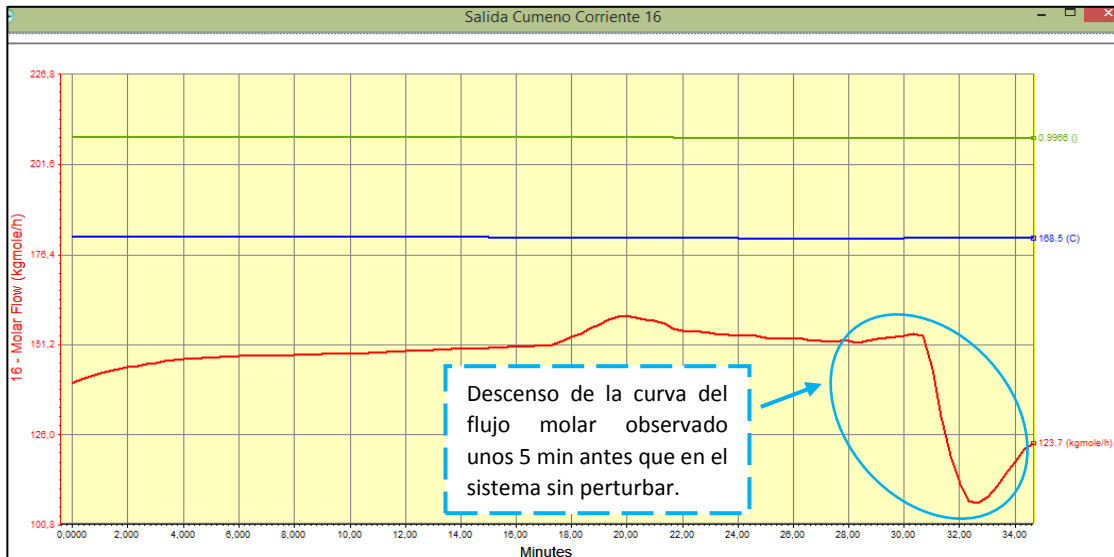


Figura 30. Integración opción 1: Corriente 16 salida cumeno.

En la comparativa del comportamiento reflejado en la Fig. 30 con el del sistema integrado 1 pero sin perturbación (Fig.23), ocurre un comportamiento similar al descrito en apartados anteriores. La variación de flujo observada sigue la misma tendencia en el sistema con y sin perturbación, difiriendo en la rapidez de aparición de la misma. En este caso, el descenso de caudal se produce unos 5 minutos antes que en el sistema sin perturbar, como respuesta al aumento de temperatura en la corriente de entrada.

Comparando las figuras 28, 29 y 30, se puede concluir que el sistema menos afectado, a nivel de flujo de salida de cumeno, por un aumento en la temperatura de una corriente de alimentación es el integrado energéticamente según la opción 1, debido a que la respuesta a la perturbación en el comportamiento del caudal aparece a los 30 minutos tras la entrada de la misma, mientras que los otros dos sistemas permanecen estables únicamente 8 minutos aproximadamente hasta exteriorizar las consecuencias de la perturbación.

El paralelismo en el comportamiento de los sistemas sometidos a perturbación en la temperatura, en comparación con los no perturbados vendría a reforzar la hipótesis de un comportamiento característico inherente a cada una de las tres topologías.

6.2.2 AUMENTO DE PRESIÓN

En este caso, el objetivo es estudiar la respuesta dinámica de los tres sistemas al elevar la presión de entrada de la corriente N° 4 de propileno en un 8%, quedando finalmente un valor fijado de 13 bar.

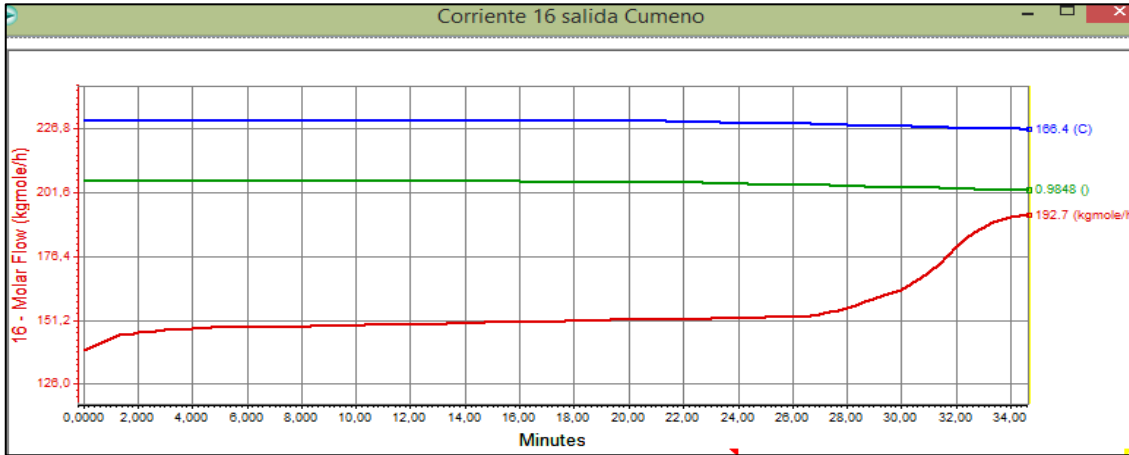


Figura 31. Proceso original: Corriente 16 salida cumeno.

Según se observa en la fig. 31, al incrementar la presión de la corriente de entrada N°4, se ven ligeramente influidas las variables de temperatura y composición de cumeno, de manera que se puede ver una leve disminución progresiva de sus curvas de tendencia a partir de los 26 minutos de integración aproximadamente. En el caso del flujo molar, dicha influencia es mucho mayor que en el resto de variables, traducida en un aumento del caudal aproximadamente en el mismo momento de integración en el que se observan las anteriores variaciones de temperatura y composición.

Para analizar la posible causa de este comportamiento, se procede a estudiar las gráficas correspondientes a las corrientes de salida del reactor y recirculación de benceno:

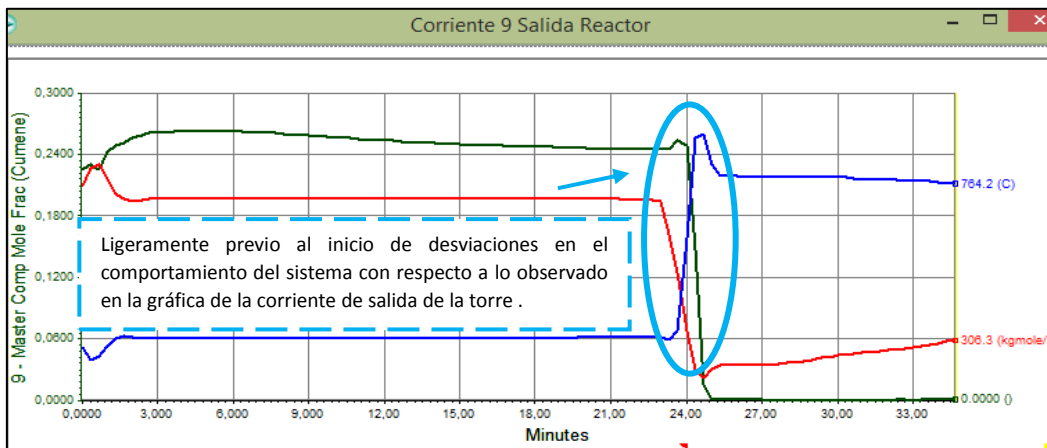


Figura 32. Corriente de salida reactor.

Como se observa en la fig. 32, claramente el reactor deja de funcionar a los 24 minutos de integración, donde coinciden un aumento brusco de temperatura (prácticamente el doble del valor en estacionario), pudiendo causar daños en el reactor, una disminución hasta el valor cero de la composición de cumeno, por lo que se ha parado la reacción y además, el flujo disminuye en dicho tiempo hasta la mitad de su valor. Se observa a su vez que este comportamiento tiene influencia en las variables representadas en la corriente de salida de cumeno (fig 31), al producirse su variación justo después de las desviaciones en el reactor.

Estos factores tienen una gran influencia en el resto de equipos tras el reactor, situación que afecta a la operación de las torres de destilación que incluyen el factor de recirculación de benceno, causante de devolver los errores al inicio del proceso.

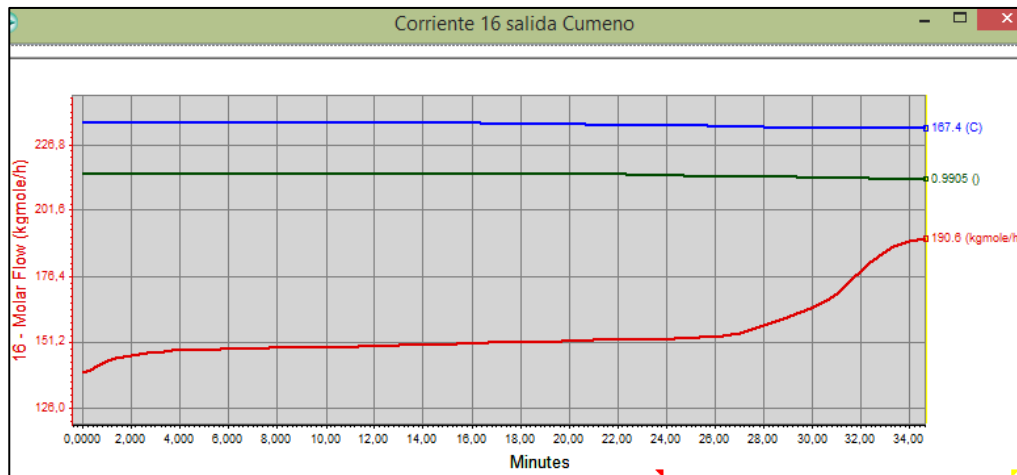


Figura 33. Integración Opción 2: Corriente 16 salida cumeno.

En la fig. 33, se aprecia el aumento de flujo molar a los 26 minutos de integración, comportamiento prácticamente idéntico al observado en el sistema original (fig 31). Con esto se reafirma el comportamiento similar de estos dos sistemas, original e integrado 2, que se ha estado observando a lo largo de estas comparativas.

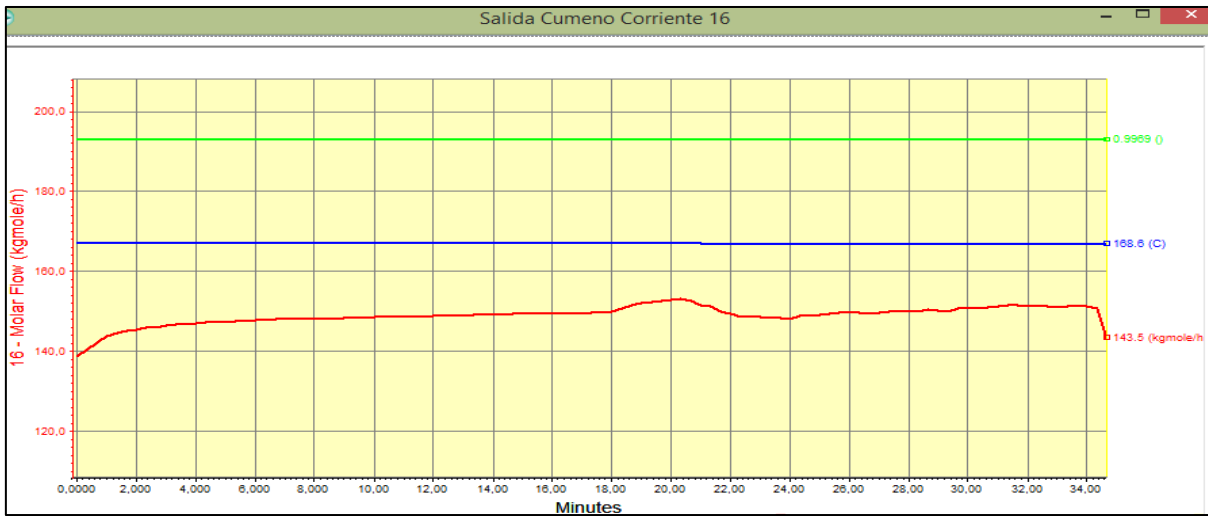


Figura 34. Integración Opción 1: Corriente 16 salida cumeno.

Los resultados obtenidos según la fig. 34 revelan que el incremento de presión en la corriente de entrada no presenta influencia en las condiciones de salida del cumeno, obteniéndose un comportamiento prácticamente idéntico al estudiado sin perturbación (fig. 23). Con el fin de intentar comprender este comportamiento indiferente a la perturbación de presión que presenta la integración 1, se ha procedido a estudiar el comportamiento del flujo molar, observada como variable más influenciada por una perturbación, en la corriente de recirculación del benceno para los sistemas sin integrar e integrado opción 1, ya que esta corriente conlleva devolver al proceso cualquier perturbación obtenida en el funcionamiento de la torre de destilación:

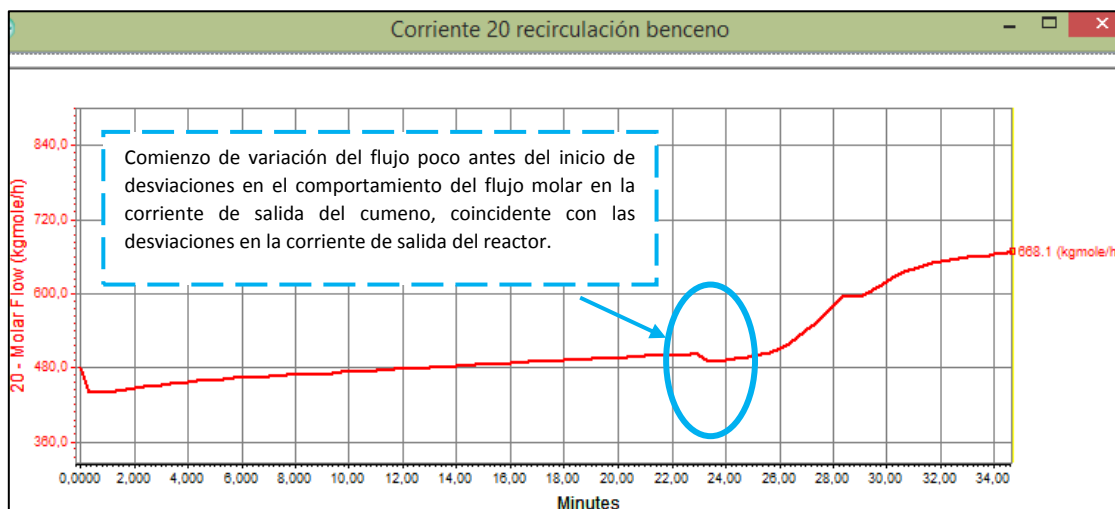


Figura 35. Proceso original: Corriente 20 recirculación benceno

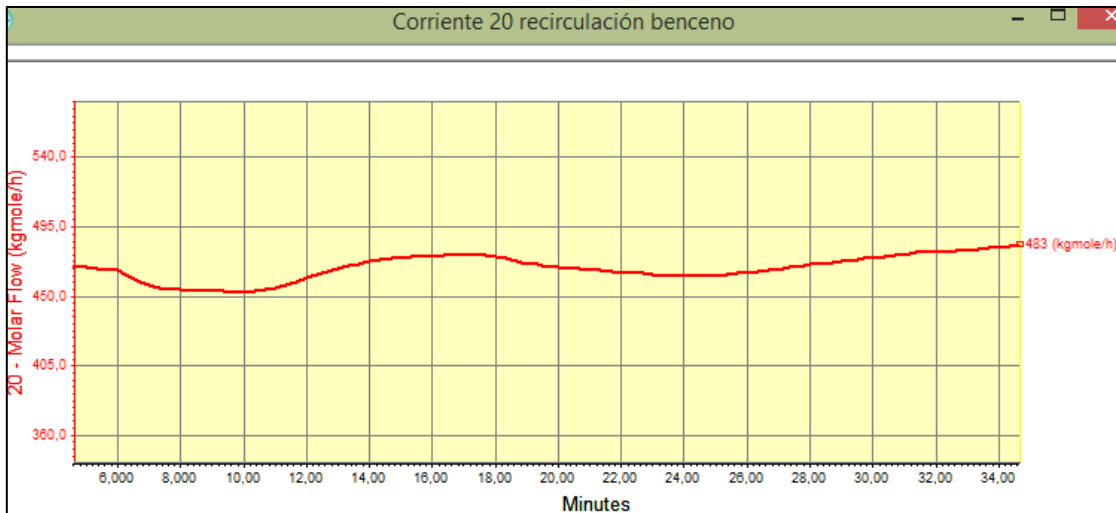


Figura 36. Integración opción 1: Corriente 20 recirculación benceno.

Comparando las fig. 35 y 36, se observa que el proceso integrado según la opción 1 presenta pequeñas variaciones en su flujo de recirculación, manteniéndose prácticamente constante, mientras que esta variable en el proceso original comienza a aumentar a los 23 minutos de integración aproximadamente. Esta variación coincide tanto con la desviación que se produce en la salida del reactor (fig. 32) como en la observada en la corriente de salida de cumeno (fig. 31). Por lo tanto, como conclusión se puede indicar que la perturbación de presión en la corriente de entrada afecta en mayor medida en el flujo de salida del cumeno, de manera que este experimenta un aumento en un determinado punto de la integración, exceptuando el sistema integrado 1, que no se ve perturbado con esta modificación con respecto al sistema sin perturbar.

7. PROPUESTA CONTROL PROCESO ORIGINAL

Todo proceso químico en funcionamiento debe ser controlado con el fin de conocer la magnitud de determinadas variables del proceso y mantener un valor de operación en algunas de ellas. Esto se lleva a cabo mediante una estrategia de control que asegure:

- La seguridad del proceso y la protección de las personas.
- La calidad, uniformidad y cantidad de la producción.
- Determinadas especificaciones y requerimientos medioambientales.
- Respetar las restricciones que presenten los equipos.

Además de las razones antes mencionadas, el sistema de control debe ser capaz de eliminar la influencia de posibles perturbaciones en alguna de las variables del proceso, ya sean externas o bien del mismo. Por otro lado, se asegura la estabilidad del proceso y permite la optimización de la operación.

En este trabajo, se presenta una propuesta de estrategia de control básica, en la que se presentan los controladores y variables a controlar mínimos que se han de implementar en el proceso de producción de cumeno estudiado, utilizando la herramienta informática de simulación Hysys.

A continuación se describe dicha propuesta de control dividiendo el proceso en secciones:

- ✓ **Control flujo de corrientes alimentación:** para controlar el flujo de entrada al proceso de las corrientes de benceno y propileno que se dirigen al mezclador, se utiliza un control de proporción de dicha variable. Esto se consigue mediante el controlador que ofrece Hysys llamado "Ratio Controller" de la paleta , el cual relaciona ambos flujos con la especificación de la proporción de mezcla que se ha de mantener. El controlador mide una de las corrientes (corriente de propileno N°5) que toma como referencia y actúa sobre la válvula VLV-100 que regula la corriente de benceno (corriente N°3) para mantener el valor del ratio fijado.

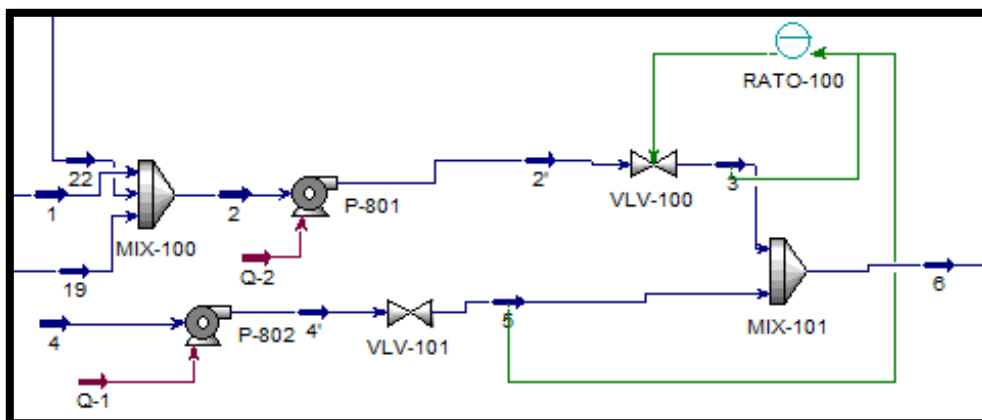


Figura 37. Esquema de control del flujo de las corrientes de entrada de Hysys.

- ✓ **Control de la Temperatura de las corrientes de salida de enfriadores y calentadores:** con el fin de mantener la temperatura deseada en las corrientes donde se precise calentar o enfriar, se han incluido controladores de temperatura de las mismas, de manera que éstos actúan sobre la energía de cada equipo correspondiente, aumentándola o disminuyéndola en función de la medida de temperatura de la corriente de salida del equipo. Como se ha indicado anteriormente, en este proceso existen dos refrigeradores (E-100 y E-803) y un calentador (E-801). Cada uno de ellos presenta un controlador de temperatura como muestra en las siguientes imágenes:

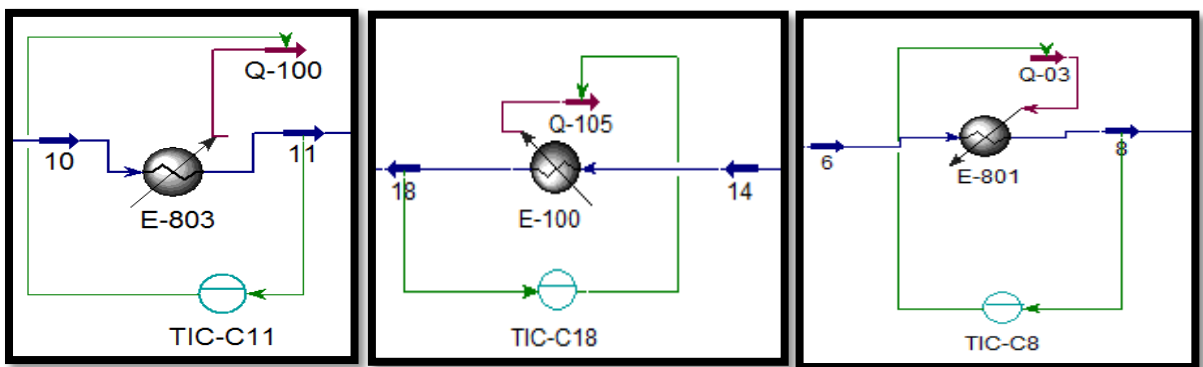


Figura38. Esquema de control de temperatura de las corrientes de salida de los equipos calentadores y enfriadores de Hysys.

- ✓ **Control del Reactor (R-801):** las variables de control básico que ha de presentar el reactor son las siguientes:
 - **Flujo de entrada de la corriente 8:** esta variable se encuentra ya controlada mediante el controlador de proporción de mezcla “Rato-100” descrito anteriormente.
 - **Temperatura de la corriente de entrada Nº 8:** como en el caso del flujo, esta variable es controlada por el equipo de calefacción E-801 previo al reactor, a través del controlador TIC-C8.
 - **Temperatura en el reactor:** para el control de esta variable, se ha añadido un controlador de temperatura TIC-C9 que actúa sobre el calor de refrigeración del reactor (Q-04) mediante la medición de la temperatura de la corriente de salida Nº 9. Normalmente, en reactores tubulares se suelen implementar varios transmisores de temperatura a lo largo de la longitud del mismo, ya que se pueden dar elevados gradientes de temperatura en las diferentes zonas del equipo, de manera que existe un contralor que actúa en función de la temperatura más alta que reciba de los transmisores implantados. En

este caso, no se ha utilizado este lazo de control ya que la diferencia de temperatura entre la corriente de entrada al reactor y la de salida en estado estacionario es muy pequeña (aproximadamente 6 °C).

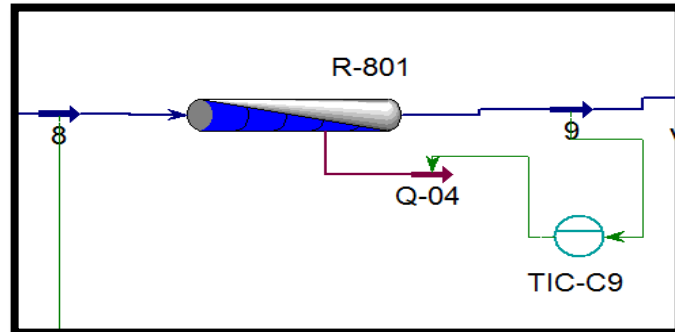


Figura 39. Esquema de control del Reactor en Hysys.

✓ **Control torres destilación:** en estos equipos (T-100 y T-101) se controlan las siguientes variables:

- **Flujo de entrada:** el flujo de entrada para cada columna se controla mediante un controlador de flujo (T-100: FIC-C13 y T-101:FIC-C15) que, al medir dicha variable, actúa sobre la válvula situada en la misma corriente (T-100: VLV-105 y T-101: VLV-104) con el fin de mantener el “set point” indicado.
- **Nivel del condensador:** se controla el nivel de líquido en el condensador de cada torre mediante la acción de las válvulas de la corriente de salida por cabezas de cada una de ellas (T-100: VLV-103; T-101: VLV-109).

Este controlador recibe el nombre LIC-100 en ambos casos. De esta manera, se asegura que siempre haya una cantidad mínima de líquido condensado a recircular.

- **Nivel del calderín:** en este caso, se procede al control de esta variable de manera similar que el procedimiento utilizado para el control del nivel en el condensador. El controlador LIC-101 en ambas torres actúa sobre la válvula implementada en la corriente de salida por colas de cada torre (T-100: VLV-104, T-101: VLV-110) en función de la medida del nivel en el calderín, para mantener una determinada cantidad.

- **Presión en el condensador:** para controlar esta variable se implementa un controlador de presión que mide la presión de la corriente de salida de la torre al condensador (“to condenser”), que presenta el mismo valor de presión que el obtenido en el primer plato de la torre, iniciando el orden de numeración desde la parte superior de la misma. Según esta medida, el controlador PIC-100 regula el flujo de calor del condensador (T-100: Q-102, T-101: Q-104), de manera que si la presión aumenta, éste aumenta dicho flujo para enfriar en mayor medida, producir más cantidad de líquido y disminuir la presión del vapor obtenido de la torre.
- **Temperatura de la columna:** esta variable es controlada mediante la acción de un controlador de temperatura TIC-100 sobre el flujo de calor del calderín de la torre (T-100: Q-101; T-101: Q-103) en función del valor medido en el plato de la torre donde se produzca una mayor variación de temperatura. Controlando esta variable, se encuentra incluido el aseguramiento de A continuación se muestran los perfiles de temperatura en régimen estacionario de cada uno de los platos correspondientes a las dos torres de destilación que aparecen en este proceso, indicando en cada una de ellas el plato de medida de temperatura para la actuación del controlador TIC-100:

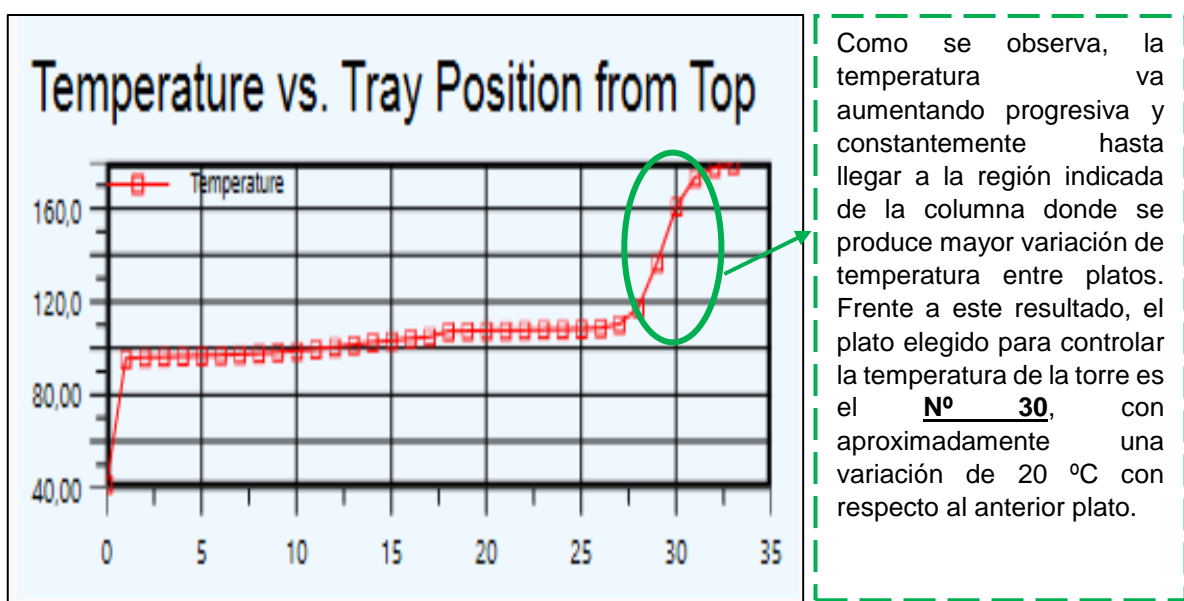
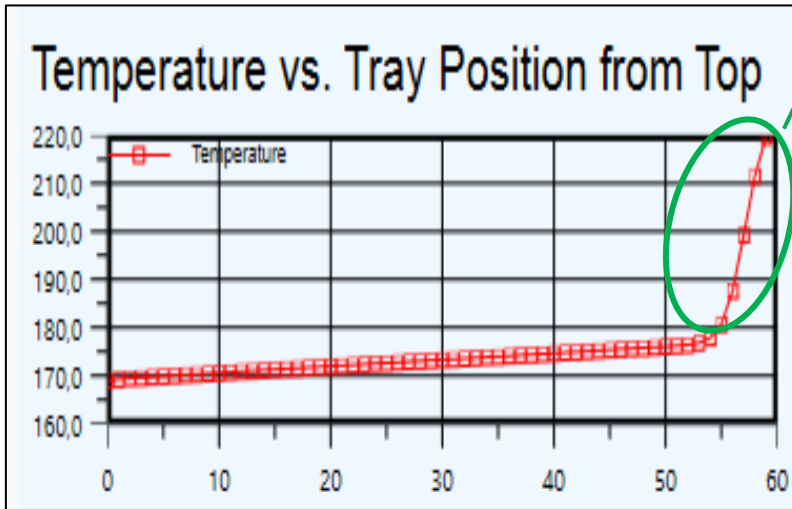


Figura 40. Perfil temperatura por platos de la columna de destilación T-100.



Como en el caso anterior, se observa la variación progresiva de la temperatura a lo largo de la columna hasta llegar a una región donde se produce mayor variación de temperatura entre platos. En este caso, el plato elegido para controlar la temperatura de la torre es el **Nº 58**, último plato de la torre, con una variación de 12°C aproximadamente.

Figura 41. Perfil temperatura por platos de la columna de destilación T-101.

- **Cantidad de reflujo:** el control del flujo de la corriente “reflux” que vuelve a la torre procedente del condensador, se realiza mediante el controlador FIC-100. Este controlador actúa sobre dicho flujo en función de la señal que le proporciona un transmisor de temperatura TIC-101, que mide la temperatura del primer plato de la torre, de manera que, si la temperatura de este plato aumenta, el controlador FIC-100 aumenta la cantidad de reflujo en la torre para regular dicha temperatura.

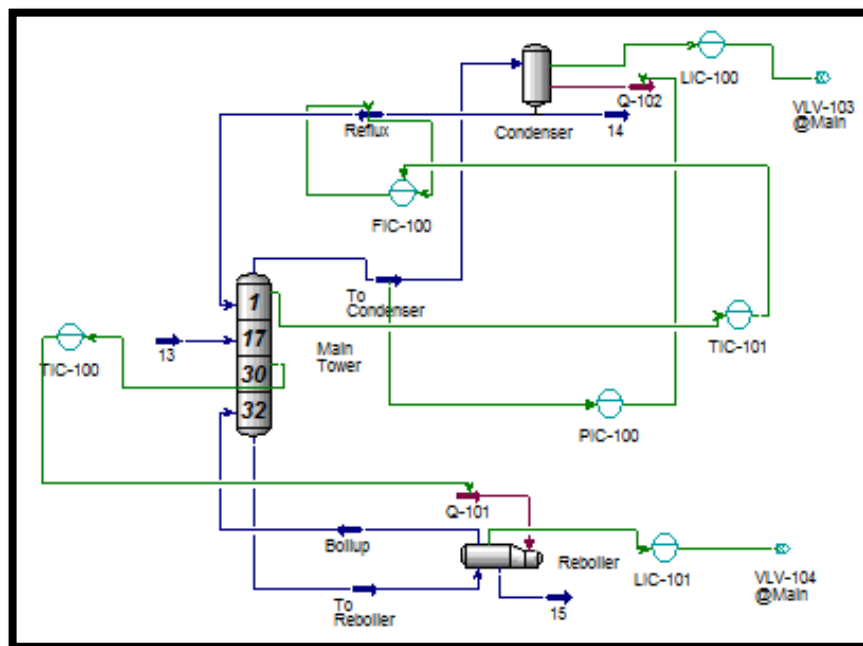


Figura 42. Sistema de control de la columna de destilación T-100.

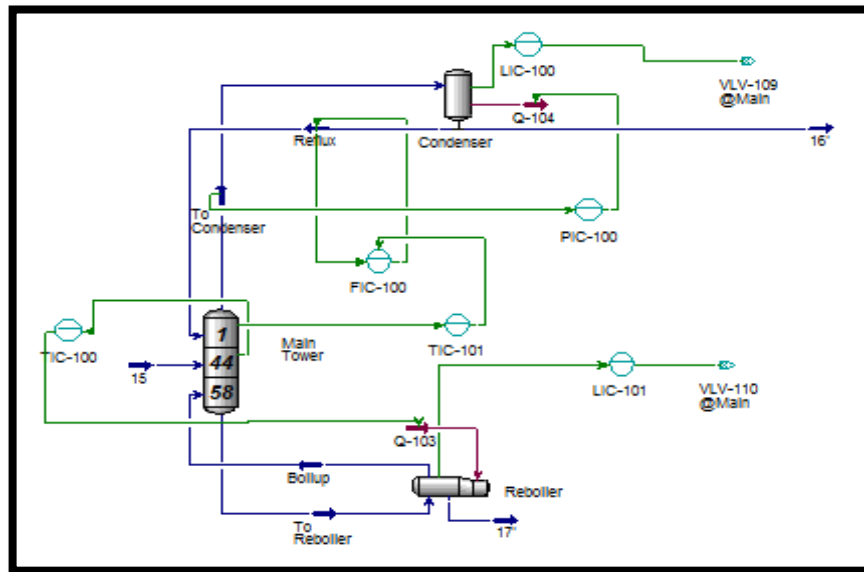


Figura 43. Sistema de control de la columna de destilación T-101.

✓ **Control del destilador Flash (V-802):** las variables a controlar en este equipo son:

- **Nivel del Flash:** se utiliza un controlador de nivel LIC-100 que, según la medida del nivel que exista dentro del destilador, actúa sobre la válvula de salida del líquido por su parte inferior (VLV-105), abriéndola o cerrándola.
- **Presión dentro del equipo:** esta variable es controlada mediante un controlador de presión PIC-100, encargado de mantener la preconización de presión dentro del equipo, variando la apertura de la válvula implantada en la corriente de salida del vapor VLV-108 en función de las variaciones de presión medida. Si ésta presión aumenta, la válvula se abriría para disminuirla.

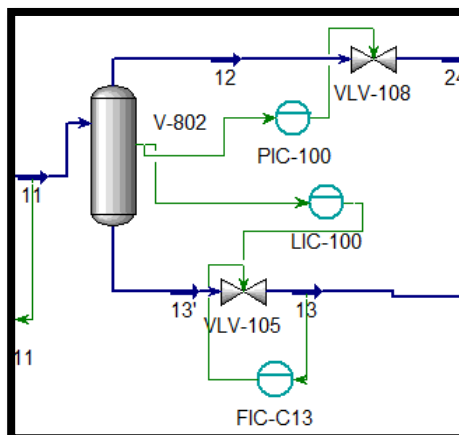


Figura 44. Sistema de control del destilador Flash V-802.



8. CONCLUSIONES

Previamente a realizar unas conclusiones finales de los resultados obtenidos en este trabajo, se ha de señalar la utilidad y, a su vez, la dificultad que presenta el uso de la herramienta informática Aspen HYSYS V8. Dicho programa constituye una gran ayuda para simular un proceso y así poder obtener una estimación de su modo de operación y comportamiento previos a una implantación real. Sin embargo, se ha de destacar que esta misma capacidad de representar con precisión la realidad conlleva la necesidad de determinar y cuantificar un elevado número de topologías y parámetros de operación y ajuste, resultando en la práctica un esfuerzo sustancial para conseguir una simulación coherente y con un funcionamiento correcto.

Tras los resultados de simulación de los diferentes sistemas propuestos con y sin integración energética en su comportamiento dinámico, una de las conclusiones alcanzadas es que, de las tres variables estudiadas (temperatura, composición cumeno y flujo de la corriente de salida de cumeno) para los tres sistemas, el flujo molar constituye la variable de operación menos estable en la naturaleza del sistema y que se ve influenciada en mayor medida por cualquier perturbación. Esta variable es la más sensible a una desviación ya que su respuesta dinámica a la misma es mucho más rápida que en el caso de la temperatura y de la composición de cumeno, los cuales variarían de una forma más progresiva y lenta frente a dicha perturbación. De esta manera, queda demostrada la necesidad de controlar estrechamente dicha variable en los tres sistemas estudiados.

Por otro lado, las tendencias en el tiempo de los sistemas estudiados en régimen dinámico con y en ausencia de perturbación en la corriente de entrada, han sorprendido al no comportarse como en un principio era esperado. Esto se debe a que se partía de la idea de que los sistemas integrados energéticamente presentarían alguna desviación en su comportamiento dinámico con respecto al sistema de origen, al conectar dos corrientes de energía procedentes de diferentes partes del proceso, de forma que dicha desviación observada serviría para estudiar la viabilidad de la integración en cuanto a controlabilidad de la planta. Sin embargo, como se puede observar en los resultados obtenidos, una de las opciones de integración (opción 2) tiene un comportamiento dinámico sin perturbación similar al sistema inicial, y demostrada posteriormente esta similitud en la respuesta a perturbaciones en la entrada tanto de temperatura como de presión. En el caso de la opción de integración 1, ésta presenta más estabilidad en el tiempo que el proceso original, tanto en su naturaleza dinámica sin perturbación como



en su respuesta a una modificación en sus condiciones de entrada. Como se ha estudiado previamente, este sistema es prácticamente inmune al aumento de presión realizado. Una hipótesis que explicaría este comportamiento es que el intercambio de corrientes de energía entre el enfriador situado tras el reactor y el calderín de la primera torre de destilación, aumenta la estabilidad del sistema frente a cualquier perturbación, ya que el enfriador absorbería en primer lugar las variaciones producidas por la perturbación, evitando o disminuyendo las consecuencias inmediatas de las mismas en el calderín de la torre. Este equipo constituye una parte muy importante e influyente en la operación de la columna, de manera que, al paliar la llegada de las variaciones al mismo, el flujo de vapor se mantiene constante durante un tiempo de integración mayor y la separación de la torre continúa siendo efectiva. Adicionalmente, se ha de tener en cuenta que la corriente de benceno recirculada al proceso procede de esta columna, contribuyendo a la estabilidad del proceso al disminuir así el factor de recirculación de perturbación e incremento de la misma en el inicio del proceso.

Ha de comentarse aquí también el paralelismo de los comportamientos de sistemas no perturbados y sometidos a perturbación (pág. 46) refuerzo del concepto de un comportamiento dinámico inherente que juega a favor de la metodología escogida, es decir, el análisis dinámico del sistema no sometido a control.

Frente a este estudio, se puede concluir que en cualquiera de las dos opciones de integración propuestas se obtiene un beneficio con respecto al sistema de origen. En el caso de la opción 1, al ahorro energético se suma la estabilidad del proceso traducida en una mayor facilidad de control y operabilidad del sistema. Para la opción 2, la mayor ganancia la proporcionaría el ahorro energético ya que, al seguir el comportamiento del proceso inicial, la controlabilidad del mismo sería probablemente comparable.

La continuación a este trabajo podría ser la de añadir los equipos de intercambio de calor en las simulaciones para estudiar la influencia de los mismos en el comportamiento en régimen dinámico de los sistemas. Tras esto, una posibilidad sería proponer la implementación de un sistema de control de los procesos para corregir las desviaciones observadas y llevar a cabo la simulación para un amplio conjunto de perturbaciones y variables de proceso, con el fin de determinar el comportamiento dinámico de los sistemas en mayor profundidad. Pero debe tenerse en cuenta la magnitud del trabajo asociado a estas propuestas.



9. BIBLIOGRAFÍA

Páginas web:

- 1) *Instituto nacional de seguridad e higiene en el trabajo (propiedades cumeno)*
http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/TextosOnline/Valores_Limite/Doc_Toxicologica/Ficheros/DLEP12.pdf. Consultado Marzo 2016.
- 2) *Química Orgánica Industrial (propiedades cumeno y benceno)*
<http://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-09.php>. Consultado Marzo 2016.
- 3) *Fichas internacionales de seguridad química (propiedades benceno, propileno, diisopropil benceno)*
<http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/0a100/nspn0015.pdf>. Consultado Marzo- Abril 2016.
- 4) *Simulación de procesos, Wiki Estudiantil.*
<https://simulacionprocesos.wikispaces.com/introducci%C3%B3n+Hysys>
Consultado Marzo-Mayo 2016.
- 5) *Aspen Process Engineering Webinar October 17, 2006*
<http://sites.poli.usp.br/d/pqi2408/BestPracticesOptimumSimulationsHYSYSPropertyPackages.pdf>. Consultado Marzo-Mayo 2016.

Revisión Sociedad Química

- 6) Título: "Análisis Pinch y su contribución a la integración de procesos". Perú 2004. Autor: Alfredo Palomino Infante

Monografías

- 7) Título: "Tecnología Pinch: Una Introducción a la Integración Energética": Departamento de Química e Ingeniería Química. Universidad de Matanzas "Camilo Cienfuegos. Autores: Agustín Benítez Hernández, Yamile Martínez Ochoa, Félix Juan Domínguez Alonso.

Libros

- 8) Título: "Métodos de la industrial química, esquemas de flujo en colores" parte 2ª Orgánica. Prof. Dr. Fernando Hortal Sánchez. Editorial Reverté S.A.
- 9) Título: "Distillation Design and Control Using Aspen Simulation". Wiley Interscience, Alche 2006. Autor: William L. Luyben.

Proyectos



Estudio y simulación de la influencia de la integración energética de un proceso en su comportamiento dinámico



10) Título: “ Planta de Producción de Cumeno”. Universitat Autònoma de Barcelona. Autor: ARROL.

Trabajos fin de grado

11) Título: “INTEGRACIÓN ENERGÉTICA DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CUMENO PARA LA PRODUCCIÓN DE 10000 Tn/año “. Escuela Universitaria de Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos y de Ingeniería de Mina. Universidad Politécnica de Cartagena. Departamento de Ingeniería Química y Ambiental. Autor: Miguel Antonio Muñoz Martínez. Octubre 2013.