

Amadeu Blasco Muria

**OPTIMITZACIÓ D'UNA COLUMNA DE DESTIL·LACIÓ
D'UNA PLANTA DE PEAD AMB ASPEN HYSYS**

TREBALL DE FI DE GRAU

dirigit pel Dr. Jaume Massons

Grau de Química



UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI

**Tarragona
2014**

TAULA DE CONTINGUTS

1.	Abstract.....	6
2.	Objectiu.....	7
3.	Introducció a la destil·lació	7
3.1.	Tipus de columnes de destil·lació	8
3.1.1.	Estructura de plats	8
3.1.2.	Estructura empaquetada	10
3.2.	Operacions de destil·lació contínua.....	13
4.	Fonaments termodinàmics de la destil·lació	15
4.1.	Volatilitat relativa i valors K	15
4.2.	Mètode de Fenske-Underwood-Gilliland (FUG)	17
4.2.1.	Mínim nombre d'etapes (Fenske).....	17
4.2.2.	Mínim reflux (Underwood)	18
4.2.3.	Correlació de Gilliland	19
5.	Part experimental	20
5.1.	Bases de disseny	20
5.2.	Càlcul mitjançant el mètode FUG	21
5.2.1.	Fenske: mínim nombre d'etapes d'equilibri	21
5.2.2.	Underwood: mínim reflux.....	23
5.2.3.	Correlació de Gilliland	25
5.2.4.	Localització de l'etapa d'alimentació.....	27
5.3.	Aplicació dels resultats del mètode FUG a Aspen HYSYS.....	28
5.4.	Simulació amb Aspen HYSYS.....	33
5.4.1.	Unitat de recuperació d'isobutà (URIB)	33
5.4.2.	Aplicació del mètode FUG a l'URIB	35
5.4.3.	Balanç econòmic i optimització de l'URIB.....	40
6.	Resultats i discussió	46
7.	Conclusions	47
8.	Bibliografia	48

ÍNDIX DE TAULES

Taula 1. Dades de la corrent “Feed” .	21
Taula 2. Valors K i volatilitats relatives.	22
Taula 3. Balanç de matèria plantejat.	22
Taula 4. Dades i resultats d’aplicar el mètode Underwood de reflux mínim..	24
Taula 5. Dades per aplicar l’operació d’etapa d’alimentació òptima	28
Taula 6. Valors fixats i estimats per HYSYS.	31
Taula 7. Composicions de les corrents “Feed” “Distillate” i “Bottoms” obtingudes amb HYSYS.	31
Taula 8. Resultats obtinguts del mètode FUG aplicats a HYSYS.	36
Taula 9. Cabals màssics de la columna actual i la columna FUG.	39
Taula 10. Preus estimats dels serveis necessaris de l’URIB i de l’isobutà.	40
Taula 11. Despeses econòmiques diàries actuals de l’URIB..	40
Taula 12. Despeses econòmiques a diferents temperatures	42
Taula 13. Despeses econòmiques a diferents pressions.	45
Taula 14. Despeses actuals i optimitzades de l’URIB.	46

ÍNDIX DE FIGURES

Figura 1. Esquema d'interns de columna de plats de campana	9
Figura 2. Exemple real de plat de campanes	9
Figura 4. Exemple real de plat de vàlvules.....	10
Figura 3. Exemple real de plat perforat	10
Figura 5. Diferents tipus d'empaquetaments de columna	11
Figura 6. Esquema de columna empaquetada	12
Figura 7. Esquema d'un sistema de destil·lació contínua	14
Figura 8. Nomograma de DePriester	16
Figura 9. Correlació de Gilliland reflux-etapes.....	19
Figura 10. Llistat de components químics i tria del paquet termodinàmic a l'entorn HYSYS.....	29
Figura 11. Entorn de simulació de HYSYS.....	30
Figura 12. PFD (<i>Process Flow Diagram</i>) de l'unitat de recuperació d'i-butà (URIB) de la planta PEAD.	34
Figura 13. PFD actual de l'URIB.....	36
Figura 14 A Pestanya de disseny de HYSYS.....	37
Figura 15. Fluxos màssics d'etilè i i-butà obtinguts del simulador.	38
Figura 16. PFD de URIB amb extracció lateral d'i-butà.	38

ÍNDIX D'EQUACIONS

$$K_i = \frac{\text{Fracció molar del component } i \text{ a la fase vapor}}{\text{Fracció molar del component } i \text{ a la fase líquida}} = \frac{y_i}{x_i} \quad 15$$

$$\alpha_{1,2} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{y_1}{x_1} \cdot \frac{x_2}{y_2} \quad 15$$

$$N_{\min} = \frac{\ln S}{\ln(\alpha_{LK, HK})_{av}} \quad 17$$

$$\sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j z_j}{\alpha_j - \theta} = 1 - q \quad 18$$

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} + 1 = \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j \cdot x_{Dj}}{\alpha_j - \theta} \quad 18$$

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad 19$$

$$Y = \frac{N - N_{\min}}{N + 1} \quad 19$$

$$q = - \frac{C_{p,F} \cdot (T_F - T_{RF})}{\lambda_F} \quad 23$$

$$Y = 0.75 \cdot (1 - X^{0.5668}) \quad 26$$

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\frac{Z_{HK}}{Z_{LK}} \cdot \left(\frac{X_{B,LK}}{X_{D,HK}} \right)^2 \cdot \frac{B}{D} \right]^{0.206} \quad 27$$

1. Abstract

The need of new products as well as a new culture of the environmental care, of the saving and optimization of energy, the use rationalized of fuels, etc. makes necessary that the chemical engineering looks for economic and feasible alternatives for the solution of these new challenges. The process simulation is an effective tool for the analysis and the process optimization, which helps to propose the different alternatives for solving these modern challenges.

The simulation of chemical processes is a tool that has become indispensable for the suitable solution of the process problems. It allows to effect the analysis of chemical plants in operation or for the design of new plants or equipments.

The scope of this project is the simulation of a distillation column operating nowadays in a high density polyethylene manufacturing utility. The aim of this column is the separation of a group of components useful for feeding other units conforming the entire plant and reducing the costs of production. HYSYS is an advance process simulation environment for the process industries developed by Hyprotech and it allows engineers to develop a single process model, optimize production and enhance decision-making.

In order to optimize a column it was decided to introduce reader in how HYSYS runs a simulation and the way a distillation column works, this includes what kind of devices installed inside, the parameters we need to modify for improve the production or minimize energy consumption and give a global view to reader about the thermodynamics laws that governs this type of unitary operation.

2. Objectiu

L'objectiu principal d'aquest treball és simular una columna de destil·lació fraccionada amb el programa Aspen HYSYS. Es tracta d'una columna real que està operant actualment amb l'objectiu de recuperar isobutà d'una mescla d'hidrocarburs per tal de reutilitzar-lo.

L'isobutà actua com a dissolvent de la mescla de reacció per a la producció de polietilè d'alta densitat (en endavant PEAD). Tot i que la planta opera amb aquesta columna, el projecte en mà pretén estudiar, fent ús de la simulació informàtica, com millorar la recuperació d'isobutà i com reduir l'impacte mediambiental de la columna com també l'impacte econòmic d'aquesta optimitzant un conjunt de consums com poden ser el consum de vapor del reboiler o el propà d'un bescanviador de calor. Les conclusions pertinents es podrien aplicar a la realitat modificant aquests paràmetres en cas favorable. En cas desfavorable es pot dissenyar una nova columna que satisfagi les mateixes condicions. Com a objectiu secundari i relacionat amb aquest últim apunt, es demostra la ineficàcia del mètode Fenske-Underwood-Gilliland per al disseny de columnes amb extraccions laterals i les significatives diferències dels resultats entre el càlcul mitjançant un mètode abreviat i un mètode rigurós com el que fa HYSYS.

3. Introducció a la destil·lació

La destil·lació es defineix com el procés en el qual una mescla de dos o més components es separa en fraccions d'una puresa desitjada per l'aplicació de calor. La destil·lació està basada en el fet que el vapor d'una mescla escalfada serà més ric en components amb punts d'ebullició més baixos. Quan aquest vapor és condensat, aquest contindrà més components volàtils. Al mateix temps, la mescla original contindrà més components de baix punt d'ebullició.

Les columnes de destil·lació es dissenyen per aconseguir que aquesta separació sigui eficient. Aquest procés és el mètode de separació més comú i consumeix grans quantitats d'energia que poden arribar a suposar un 50% dels costos d'operació d'una planta química. [1]

3.1. Tipus de columnes de destil·lació

Una columna de destil·lació és una estructura tancada en la qual es realitza la separació física d'un fluid en dos o més fraccions. Aquesta separació s'aconsegueix sometent al fluid a condicions de pressió i temperatura apropiades al llarg de la columna, de manera que les fraccions que es busquen separar es trobin en dos estats diferents. La fracció més pesada (en estat líquid) baixa per gravetat mentre que la lleugera (en estat gasós) puja i es condensa a les parts superiors de la columna produïnt-se així una transferència de massa i energia entre ambdues fases, que circulen continuadament a contracorrent al llarg de la columna. Aquest mecanisme de transferència s'optimitza al maximitzar la superfície de contacte entre ambdues fases. En les columnes de destil·lació això es realitza mitjançant dos tipus d'estructures:

- Estructures de plats (*tray column*)
- Estructura empaquetada (*packed column*)

3.1.1. Estructura de plats

Tal i com s'aprecia a la **Figura 1**, les baixants (*downcomer*) dels plats van alternant-se a un costat i a l'altre de la columna successivament obligant al líquid a recórrer un camí en ziga-zaga fins la part inferior de la torre. El gas es desplaça en direcció contrària, és a dir cap a dalt, i passa al plat superior a través d'uns forats ubicats a la part activa de cada plat, que comprèn la superfície que hi ha entre la baixant del plat superior i la baixant del mateix, doncs aquestes sempre estàn ocupades pel líquid que circula per la columna i no es produeix contacte íntim líquid-gas. Segons el mecanisme de contacte a través dels forats tenim els següents tipus de plats:

- Plats de campana (*bubble cap trays*): són els més utilitzats al llarg de la història i per tant n'hi ha de moltes formes i mides. Les campanes estan disposades damunt d'uns conductes de pujada per on circula el gas de manera que reparteixen aquest horitzontalment pel líquid situat al plat afavorint un major contacte líquid-gas. [2] A més a més disposen d'un sistema segellant que evita el drenatge del líquid en cas de que el flux de gas sigui baix [3].
- Plats perforats (*sieve trays*): són simplement plats amb forats. El vapor passa per aquests i a través del líquid contingut al plat. El nombre i mida de forats són paràmetres de disseny. [1] Si disminueix el flux de gas el líquid pot drenar-se per aquestes perforacions [3].
- Plats de vàlvules (*valve trays*): és un model que es troba entre els dos tipus anteriors. La seva construcció consisteix en un forat on damunt hi ha una vàlvula la qual s'eleva amb el pas del corrent gasós evitant així que en cas de que disminueixi el flux de gas el líquid es dreni, variant així l'àrea total i mantenint un balanç dinàmic de pressió al plat. És molt similar al de campana. [2], [3]

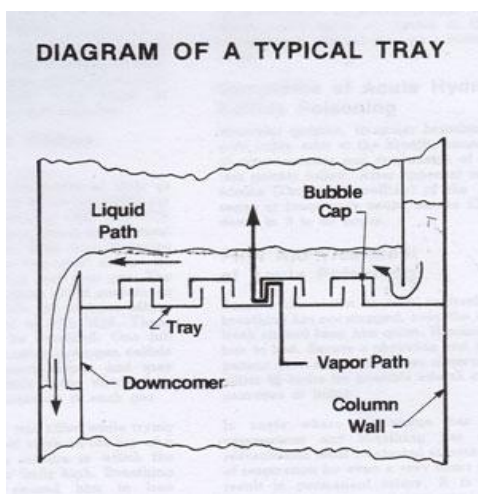


Figura 2. Esquema d'interns de columna de plats de campana



Figura 1. Exemple real de plat de campanes



Figura 4. Exemple real de plat perforat



Figura 3. Exemple real de plat de vàlvules

3.1.2. Estructura empaquetada

Una zona empaquetada està composta per un conjunt d'elements d'empaquetat que poden ser metàl·lics, ceràmics o plàstics i que s'acumulen en una regió de la columna on compleixen amb la funció de maximitzar el contacte entre el líquid i el gas. Aquesta acumulació de les petites estructures a la zona d'empaquetat pot ser ordenada o desordenada depenent de la funció que ha de complir. [3]

Els elements que componen aquestes zones estan dissenyats per incrementar l'àrea d'interfase per al contacte líquid-vapor. La **Figura 5** mostra diferents tipus d'empaquetat.

Aquestes peces amb formes estranyes, tot i afavorir el contacte, poden causar excessives pèrdues de càrrega¹ que es tradueixen en un increment d'energia necessari per conduir el vapor cap dalt de la columna. [1]

¹ La pèrdua de càrrega és la pèrdua de pressió en un fluïd degut a la fricció de les partícules del fluïd entre sí i contra les parets de la tuberia que les condueix. Les pèrdues poden ser contínues, al llarg de conducte regulars, o accidentals o localitzades, degut a circumstàncies particulars, com un estretament, un canvi de direcció, la presència d'una vàlvula, etc.

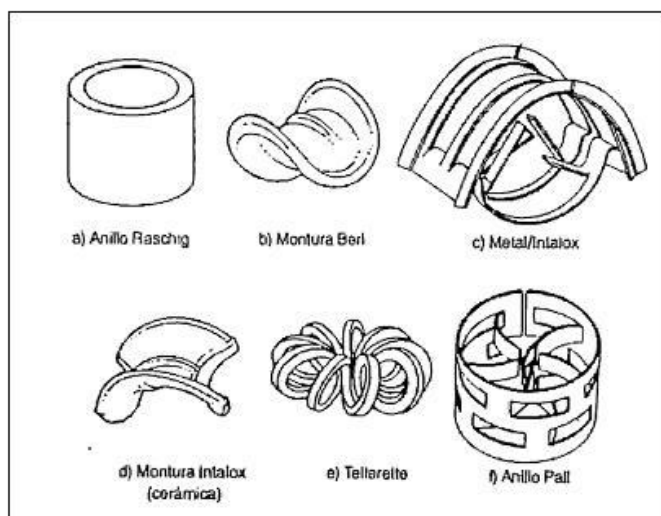


Figura 5. Diferents tipus d'empaquetaments de columna

Les columnes empaquetades s'especifiquen normalment quan els dispositius de plats no són factibles, degut a característiques indesitjables del fluid o algun requisit especial de disseny. Les condicions que afavoreixen les columnes empaquetades són:

- Els àcids i altres materials corrosius es poden manipular en columnes empaquetades, ja que la construcció pot ser de ceràmica o altres materials resistents.
- Els líquids amb tendència a l'espumació es poden manipular amb més facilitat en columnes empaquetades, degut al grau relativament baix d'agitació del líquid pel gas.
- La retenció del líquid pot ser més baixa en columnes empaquetades, el qual constitueix un avantatge quan el líquid és tèrmicament sensible.

Les condicions desfavorables per a les columnes empaquetades són:

- Si hi ha sòlids en el líquid o el gas, les columnes de plats es poden dissenyar per permetre la neteja amb més facilitat.
- Alguns materials d'empaquetat es trenquen amb facilitat durant la inserció a la columna com a resultat de la dilatació i la contracció tèrmica.
- Amb freqüència, els fluxos elevats de líquid es poden manipular de forma més econòmica en columnes de plats que en les empaquetades.
- Les columnes empaquetades tenen intervals d'operació més estrets que les de plats.

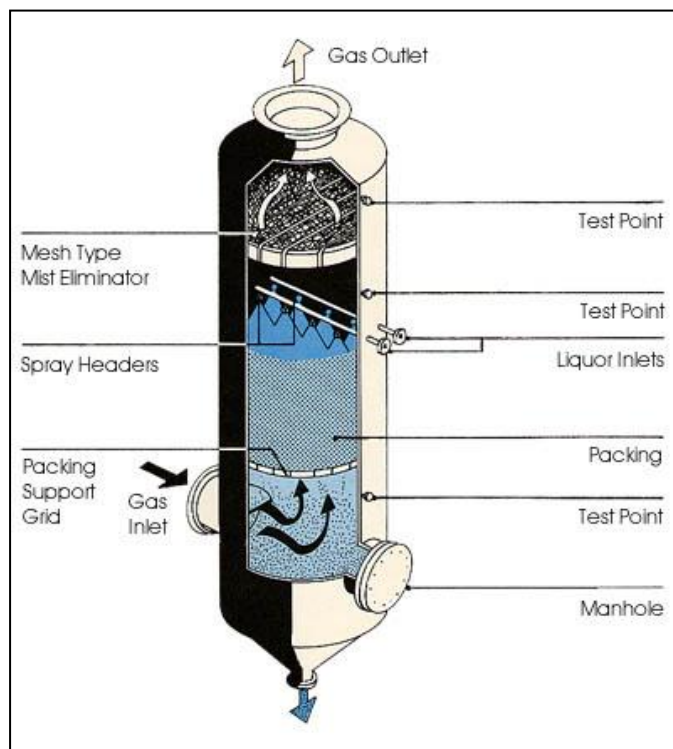


Figura 6. Esquema de columna empaquetada

3.2. Operacions de destil·lació contínua

El material d'alimentació que s'ha de separar en fraccions s'introdueix a un o més punts al llarg del cos de la columna. Com s'ha dit anteriorment, degut a la diferència de gravetat entre la fase líquida i la fase gas, el líquid corre cap baix de la columna, caient en cascada de plat a plat, mentre que el vapor ascendeix per la columna, per entrar en contacte amb el líquid en cadascun dels plats.

Com que el procés consisteix en posar en contacte ambdues fases i a la columna no li entra més que l'alimentació, el líquid que arriba al fons de la columna (baix contingut en components lleugers) es vaporitza parcialment en un reboiler (o caldera) per proporcionar vapor mentre que la resta de líquid es retira com a producte de fons. A la vegada, el vapor que arriba a la part superior de la columna (ric en components lleugers) es refreda i condensa com a líquid al condensador superior i part d'aquest líquid es retorna a la columna, per proporcionar un vessament líquid, i la resta es retira com a producte destil·lat o superior. [4] A la relació del líquid que torna a la columna i el destil·lat que s'agafa com a producte se l'anomena *relació de reflux*, i és un paràmetre de disseny molt important. A la **Figura 7** es pot observar un esquema simplificat de l'estructura d'un sistema de destil·lació contínua.

No és possible aconseguir que les corrents de gas i líquid que surten de cada etapa d'equilibri estiguin en equilibri al 100%, d'aquí que es parli d'eficiència dels plats. Al mesclar-se íntimament, el vapor tendeix a posar-se en equilibri amb el líquid, condensant-se part del component menys volàtil i evaporant-se el més volàtil. Mitjançant la repetició d'aquests contactes a contracorrent, el vapor s'anirà enriquint i el líquid empobrint (en el component més volàtil) fins arribar a les composicions del destil·lat i del residu, respectivament.

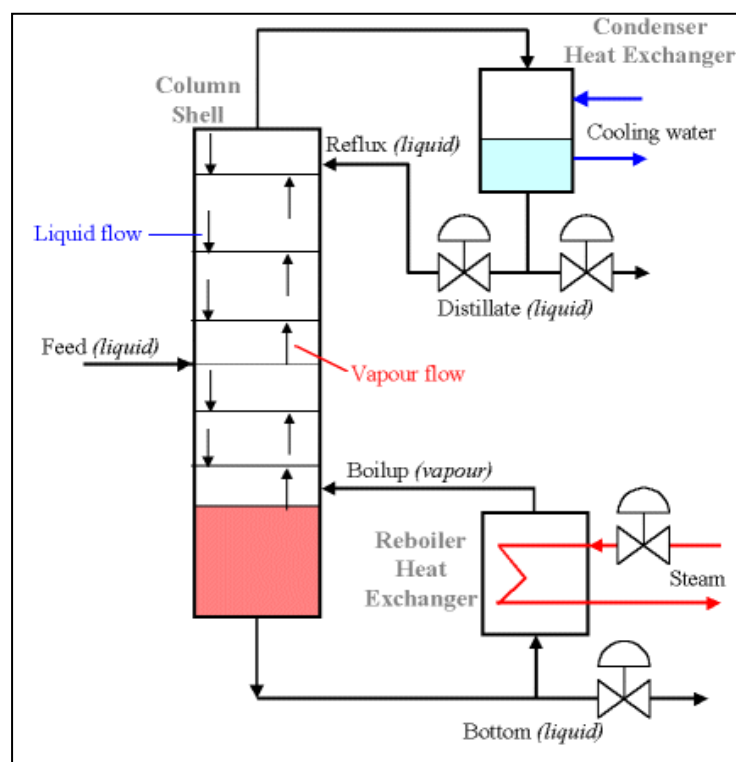


Figura 7. Esquema d'un sistema de destil·lació contínua

Si l'alimentació s'introdueix en un punt situat al llarg del cos de la columna, aquesta es dividirà en una secció superior, que habitualment se l'anomena de *rectificació*, i un altra d'inferior que se la sol anomenar d'*esgotament*.

Aquests termes es tornen bastant indefinits en columnes amb alimentacions múltiples i en columnes en les quals es retira una corrent lateral de producte en algun punt al llarg de la columna, además de les dos corrents de producte dels extrems [4] com és el cas de la columna que s'estudia en aquest projecte, on hi ha una corrent d'alimentació lateral provinent d'un recicla a part de l'alimentació original i una corrent d'extracció lateral rica en isobutà, a part de la corrent de fons i de destil·lat.

4. Fonaments termodinàmics de la destil·lació

Per abordar la problemàtica que es planteja en aquest projecte cal conèixer la termodinàmica que governa aquest tipus d'operació unitària. Així doncs, s'introduïràn alguns conceptes bàsics per tal d'entendre els càlculs que es desenvoluparàn en apartats posteriors.

4.1. Volatilitat relativa i valors K

Per aquelles mescles en les que no es pot suposar la idealitat o per al càlcul de mescles multicomponents com és el cas de l'alimentació de la columna en qüestió, es sol utilitzar l'anomenat *coeficient de distribució* o *valor K* definit per:

$$K_i = \frac{\text{Fracció molar del component } i \text{ a la fase vapor}}{\text{Fracció molar del component } i \text{ a la fase líquida}} = \frac{y_i}{x_i} \quad (1)$$

El *valor K* és una mesura de la tendència del component *i* per vaporitzar-se. Si el valor *K* és gran, el component tendeix a concentrar-se a la fase gas, mentre que si és baix tendeix a concentrar-se a la fase líquida. El valor *K* és funció de dos d'aquestes tres variables: temperatura, pressió i composició de la mescla.

La volatilitat relativa és una mesura de la facilitat de la separació i per conveni, el valor *K* del component més volàtil va al numerador i el del component menys volàtil va al denominador. Com més gran sigui la volatilitat relativa més fàcil serà separar els dos components. A mesura que la relació tendeix a 1 aquesta separació es fa més difícil. [5]

$$\alpha_{1,2} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{y_1}{x_1} \cdot \frac{x_2}{y_2} \quad (2)$$

Calcular els valors K és una tasca complicada i sovint es fa ús del càlcul amb ordinador. Es disposa de varies correlacions gràfiques importants dels valors K pels sistemes d'hidrocarburs lleugers. Les més fàcils d'utilitzar són els nomogrames de DePriester, que cobreixen 12 hidrocarburs (metà, etilè,età, propilè, propà, isobutà, isobutilè, n-butà, isopentà, n-pentà, n-hexà i n-heptà) i que es pot observar a la **Figura 8**.

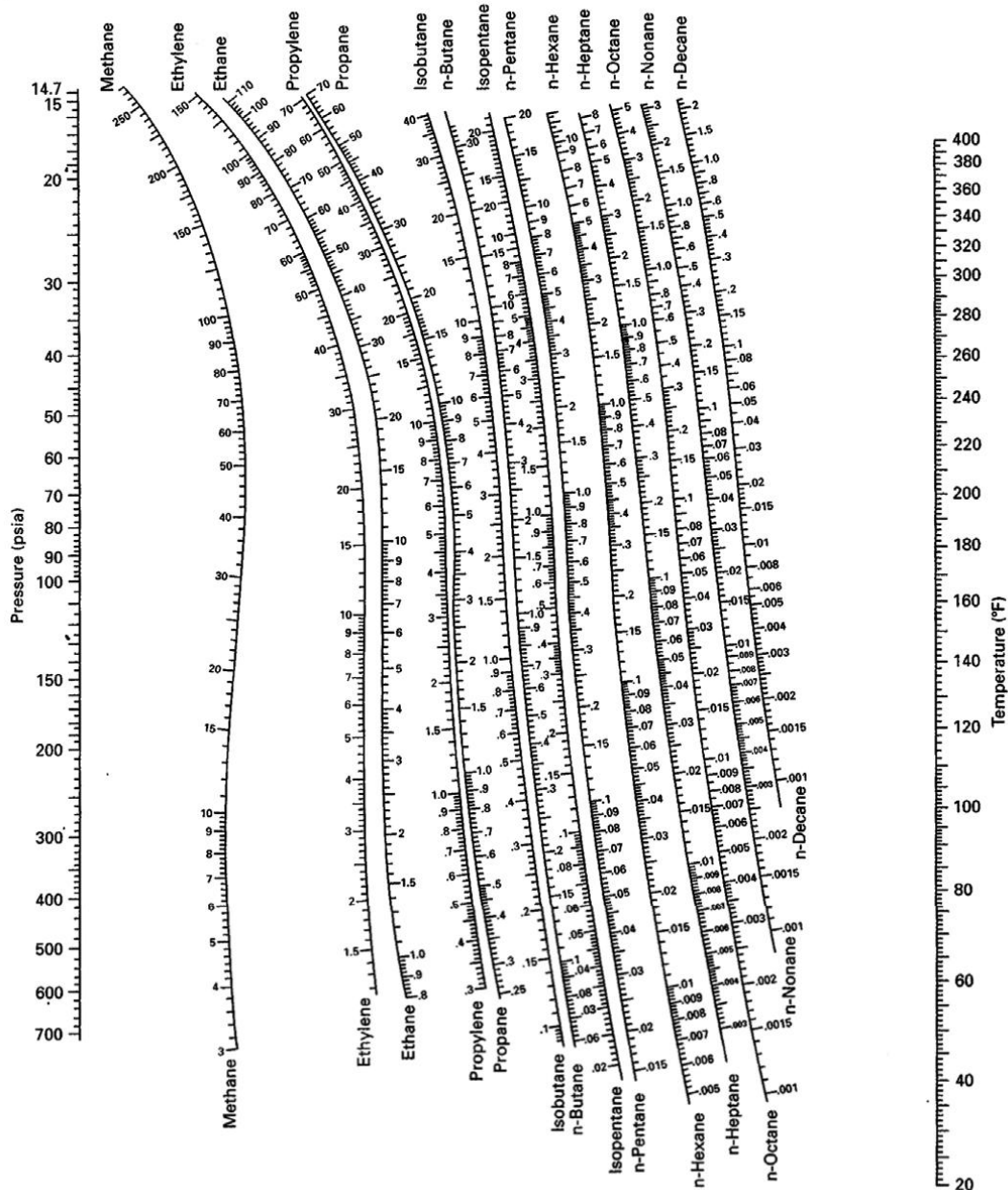


Figura 8. Nomograma de DePriester: valors K en sistemes d'hidrocarburs lleugers (Perry, Green, & Maloney, 1992)

4.2. Mètode de Fenske-Underwood-Gilliland (FUG)

El mètode de Fenske-Underwood-Gilliland (FUG) és un mètode abreviat de càlcul per calcular el nombre d'etapes mínimes d'equilibri (N_m) que es requereixen per realitzar una separació específica a reflux total. Les equacions de Underwood s'utilitzen per estimar la relació de reflux mínim R_m i la correlació empírica de Gilliland relaciona diferents valors de reflux amb número d'etapes reals (N) per cada R especificat o R per cada número d'etapes reals especificat. [3]

Existeixen mètodes rigurosos de càlcul que donen resultats molt més fiables, però si no es disposa d'ordinador, el dissenyador ha de dependre exclusivament del mètode abreviat, perquè *“el temps que es requereix per la resolució manual per un mètode rigorós sol ser prohibitiu”* [3]

En aquest apartat es fa menció de les equacions que s'utilitzaran més endavant per al càlcul del problema, els resultats dels quals s'empraràn per començar la simulació i observar-ne les diferències que s'obtenen, doncs els resultats obtinguts amb Aspen HYSYS sorgeixen de càlculs rigurosos que òbviament es deixaràn a càrrec de la computadora.

4.2.1. Mínim nombre d'etapes (Fenske)

El mínim nombre d'etapes està donat per l'equació de Fenske:

$$N_{\min} = \frac{\ln S}{\ln(\alpha_{LK, HK})_{av}} \quad (3)$$

$S = \left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}}\right)_D \cdot \left(\frac{x_{HK}}{x_{LK}}\right)_B$, és el factor de separació fixat. Els subíndex LK i HV signifiquen component clau lleuger i component clau pesat (*light key and heavy key*), respectivament. D i B corresponen al destil·lat i al producte de fons (*distillate and bottoms*).

La volatilitat relativa mitjana $\alpha_{LK, HK}$ s'obté sovint desde qualsevol de les següents aproximacions:

a) Evaluant α_{av} a la $T_{av} = (T_{Top} + T_{bot}) / 2$

b) $\alpha_{av} = (\alpha_{top} + \alpha_{bot})/2$

c) $\alpha_{av} = \alpha$ a la temperatura del plat d'alimentació

d) $\alpha_{av} = \sqrt{\alpha_{top} \cdot \alpha_{bot}}$

e) $\alpha_{av} = \sqrt[3]{\alpha_{top} \cdot \alpha_{mid} \cdot \alpha_{bot}}$

4.2.2. Mínim reflux (Underwood)

Aquest mètode resol una equació que relaciona la composició d'alimentació (z_j), la condició tèrmica de l'alimentació (q) i les volatilitats relatives a la temperatura mitjana de la columna per a un factor θ que està numèricament entre les volatilitats relatives dels components clau. El mètode Underwood és tradicionalment el més popular per la determinació del reflux mínim [5] Es procedeix de la següent forma:

- 1) Trobar θ (que ha d'estar comprès entre les volatilitats relatives dels components clau) per prova i error, amb la següent expressió:

$$\sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j z_j}{\alpha_j - \theta} = 1 - q \quad (4)$$

- 2) Substituir θ a la següent equació per calcular $(L/D)_{min}$, o el que és el mateix, R_{min} :

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{min} + 1 = \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j \cdot x_{Dj}}{\alpha_j - \theta} \quad (5)$$

Per obtenir les volatilitats relatives es pren el component pesat com a referència, amb que

$\alpha_{HK} = 1$. Per tots els altres components j queda: $\alpha_j = K_j/K_{HK}$

4.2.3. Correlació de Gilliland

Una de les relacions reflux-etapes més coneguda va ser descrita per Gilliland, tot i que n'hi ha d'altres com la de Erbar i Maddox. [5] La gràfica de Gilliland correlaciona el reflux i les etapes de la següent forma i està representada a la **Figura 9**.

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad (6)$$

$$Y = \frac{N - N_{\min}}{N + 1} \quad (7)$$

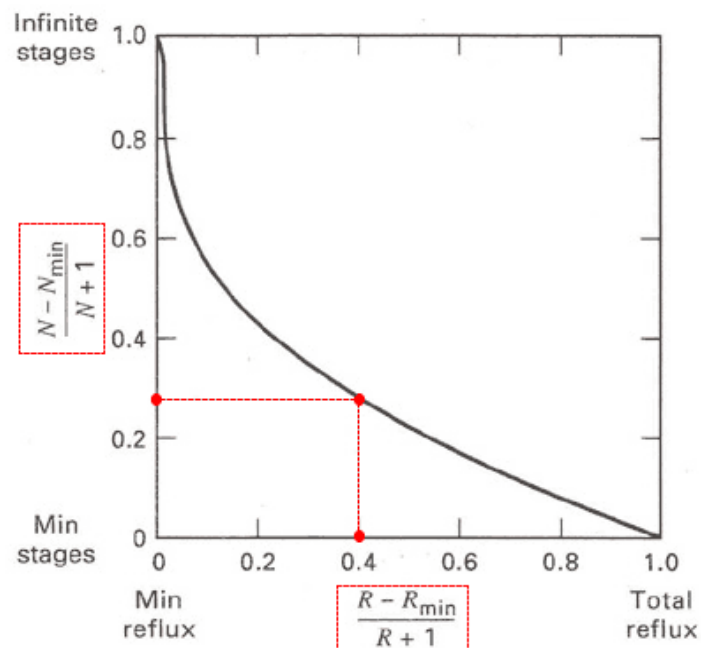


Figura 9. Correlació de Gilliland reflux-etapes

5. Part experimental

5.1. Bases de disseny

Es coneix que la columna és alimentada per una corrent, que anomenarem *Feed*, les dades de la qual es poden observar a la **Taula 1**. Val a dir que al cabal màssic d'aquesta se li han sumat els cabals de dos altres corrents existents (Veure *Tanc separador1* a la **Figura 12**), doncs els càlculs per aquest mètode han de contemplar aquest excès màssic perquè no serveix de res aplicar el mètode FUG per a una columna que futurament estarà alimentada per més matèria. La columna disposa d'una corrent de sortida lateral d'isobutà de recicla la qual no pot contenir més de 10 ppm en pes d'etilè, ja que l'isobutà s'utilitza com a diluent del catalitzador i aquesta mesura es pren per tal de que no es produeixi polimerització de l'etilè abans d'arribar al reactor i activar el catalitzador abans d'hora.

Tot i això, el càlcul pel mètode FUG es farà sense contemplar aquesta extracció lateral, ja que el mètode està dissenyat per només una alimentació i dos corrents de producte: destil·lat i producte de fons.

Els resultats obtinguts de l'aplicació del mètode abreviat s'introduiran al simulador i s'observaran les diferències entre ambdós mètodes. En els següents apartats s'observaran en detall els càlculs i resultats d'aplicar el mètode FUG per a aquesta columna.

Taula 1. Dades de la corrent "Feed". El cabal màssic que es mostra és la suma dels cabals de les corrents que acabaran influint a la columna de destil·lació. La T i P es manté per la corrent d'alimentació original per ser la més restrictiva en quant a elevada temperatura i pressió.

COMPONENT	Pes molecular	Cabal màssic (kg/h)	Kmols	% molar	Fracció molar (Z_i)
Hidrogen	2.02	0.11	0.06	0.01	0.0001
Nitrogen	28.01	226.46	8.09	2.02	0.0202
Oxigen	32.00	0.00	0.00	0.00	0.0000
Metà	16.04	0.01	0.00	0.00	0.0000
Etilè	28.05	1202.04	42.85	10.72	0.1072
Età	30.07	0.61	0.02	0.01	0.0001
Propilè	42.08	0.38	0.01	0.00	0.0000
Propà	44.10	5.14	0.12	0.03	0.0003
i-Butà	58.12	17407.56	299.51	74.93	0.7493
n-butà	58.12	870.19	14.97	3.75	0.0375
i-pentà	72.15	1811.47	25.11	6.28	0.0628
1-hexè	84.16	671.71	7.98	2.00	0.0200
Hexà	86.18	88.55	1.03	0.26	0.0026
Heptà	92.13	0	0	0	0
Octà	114.23	0	0	0	0
Aigua	18.02	0	0	0	0
Metanol	32.04	0	0	0	0
TOTAL		22284.23	399.74	100	1

Temperatura (°C)	109.71
Pressió (kg/cm ² _g)	14.50

5.2. Càlcul mitjançant el mètode FUG

5.2.1. Fenske: mínim nombre d'etapes d'equilibri

El càlcul es fa en base a una separació de propà com a component clau lleuger (p.eb. -42 °C) i isobutà com a component clau pesat (p.eb. -12 °C). A la **Taula 2** apareixen els valors de K extrets del nomograma de DePriester a les temperatures del cap de columna (TOP), a mitja alçada (MIDDLE) i al fons (BOTTOMS) i les consegüents volatilitats relatives.

A la **Taula 3** es mostra el balanç de matèria adequat al plantejament de l'exercici en qüestió. Es suposa un 98% de recuperació d'isobutà pel fons de columna i un 95% de propà pel cap.

Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD

Taula 2. Valors K i volatilitats relatives. Els valors K s'han obtingut del nomograma de DePriester (Figura 8) a les temperatures: TOP: 171.43 °F (77.46 °C) MIDDLE: 229.5 °F (109.71 °C) BOTTOMS: 298.76 °F (148.2 °C). La pressió es suposa constant en tota la columna: 15.50 kg/cm² abs (220.462 psia). Les temperatures del cap i fons corresponen a la T^a on la mescla és 100% gas i 100% líquid respectivament, i la temperatura a mitja alçada es suposa la d'alimentació (109.71 °C).

	TOP	MIDDLE	BOTTOMS
K _{LK} (propà)	1.8	2.7	3.9
K _{HK} (i-butà)	0.9	1.5	2.4
α	2	1.8	1.63

Taula 3. Balanç de matèria plantejat. Es suposen recuperacions del 98% d'i-butà en fons i 95% de propà al cap.

COMPONENT	Pes molecular	Cabal màssic (kg/h)	Kmols	% molar	Fracció molar (Z _i)	Cabal màssic destil·lat	Cabal màssic fons	X _D	X _B
Hidrogen	2.02	0.11	0.06	0.01	0.0001	0.11	0	0.0010	0
Nitrogen	28.01	226.46	8.09	2.02	0.0202	226.46	0	0.1415	0
Oxigen	32.00	0.00	0.00	0.00	0.0000	0.00	0	0.0000	0
Metà	16.04	0.01	0.00	0.00	0.0000	0.01	0	0.0000	0
Etilè	28.05	1202.04	42.85	10.72	0.1072	1202.04	0	0.7502	0
Età	30.07	0.61	0.02	0.01	0.0001	0.61	0	0.0004	0
Propilè	42.08	0.38	0.01	0.00	0.0000	0.38	0	0.0002	0
Propà (LK)	44.10	5.14	0.12	0.03	0.0003	4.88	0.26	0.0019	1.7 · 10 ⁻⁵
i-Butà (HK)	58.12	17407.56	299.51	74.93	0.7493	348.15	17059.41	0.1049	0.8567
n-butà	58.12	870.19	14.97	3.75	0.0375	0	870.19	0	0.0437
i-pentà	72.15	1811.47	25.11	6.28	0.0628	0	1811.47	0	0.0733
1-hexè	84.16	671.71	7.98	2.00	0.0200	0	671.71	0	0.0233
Hexà	86.18	88.55	1.03	0.26	0.0026	0	88.55	0	0.003
Heptà	92.13	0	0	0	0	0	0	0	0
Octà	114.23	0	0	0	0	0	0	0	0
Aigua	18.02	0	0	0	0	0	0	0	0
Metanol	32.04	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL		22284.23	399.7382	100	1	1782.64	20501.59	1	1
Temperatura (°C)	109.71								
Pressió (kg/cm ² _g)	14.50								

Es calcula el factor de separació segons l'equació següent amb les dades de la **Taula 3**.

$$S = \left(\frac{X_{LK}}{X_{HK}} \right)_D \cdot \left(\frac{X_{HK}}{X_{LK}} \right)_B$$

$$S = \left(\frac{0.0019}{0.1049} \right)_D \cdot \left(\frac{0.8567}{1.7 \cdot 10^{-5}} \right)_B = 931 *$$

* Considerant tots els decimals de la fulla de càlcul Excel.

Es calcula la volatilitat relativa mitjana utilitzant l'aproximació **(e)** i les dades de la **Taula 2**.

$$\alpha_{av} = \sqrt[3]{\alpha_{top} \cdot \alpha_{mid} \cdot \alpha_{bot}}$$

$$\alpha_{av} = \sqrt[3]{2 \cdot 1.8 \cdot 1.63} = 1.80$$

Finalment s'aplica l'equació de Fenske **(3)** per trobar el valor mínim d'etapes d'equilibri.

$$N_{min} = \frac{\ln S}{\ln(\alpha_{LK, HK})_{av}}$$

$$N_{min} = \frac{\ln 931}{\ln 1.80} = 11.63$$

5.2.2. Underwood: mínim reflux

A la **Taula 4** es presenten els valors K de tots els components de l'alimentació, les volatilitats relatives de cada component respecte el component clau pesat (i-butà), les fraccions molars de l'alimentació (Z_i), els resultats obtinguts d'aplicar l'equació **(4)** i **(5)** i el valor de θ .

El valor de θ es busca iterant, de manera que el resultat de l'equació **(4)** sigui $1-q$. El valor q és la condició tèrmica d'alimentació i es pot calcular mitjançant la següent fórmula:

$$q = - \frac{C_{p,F} \cdot (T_F - T_{RF})}{\lambda_F} \quad (8)$$

$C_{p,F}$ = capacitat calorífica de l'alimentació a la T^a d'alimentació

$T_F = T^a$ de la corrent d'alimentació

$T_{RF} = T^a$ de rosada de la corrent d'alimentació

λ_F = Calor latent de vaporització de la corrent d'alimentació

$$q = - \frac{125.0 \frac{kJ}{kmol \cdot ^\circ C} \cdot (109.71 ^\circ C - 89.35 ^\circ C)}{2.635 \cdot 10^4 \frac{kJ}{kmol}} = -0.0966$$

Per tant, el factor $1-q \rightarrow 1-(-0.0966) = 1.0966$

Així doncs, l'equació (4) :

$$\sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j z_j}{\alpha_j - \theta} = 1 - q \rightarrow \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j z_j}{\alpha_j - \theta} = 1.0966$$

Taula 4. Dades i resultats d'aplicar el mètode Underwood de reflux mínim. S'han suprimit aquells components el cabal màssic a l'alimentació dels quals era zero. El valor en vermell correspon al factor de condició tèrmica ($1-q$). El valor en verd correspon al sumatori de l'equació (5). Les volatilitats relatives de H_2 , N_2 i O_2 s'igualen a la més alta (metà) ja que no hi ha dades existents dels valors K per a aquests compostos.

COMPONENT	Valors K	α_j	z_j	$\alpha_j z_j / \alpha_j - \theta$	θ	$\alpha \cdot X_d / \alpha - \theta$
Hidrogen	16.80	11.20	0.0001	0.000162309	1.799724195	0.0011358
Nitrogen	16.80	11.20	0.0202	0.024097954		0.16863157
Oxigen	16.80	11.20	0.0000	0		0
Metà	16.80	11.20	0.0000	1.85822E-06		1.30034E-05
Etilè	7.95	5.30	0.1072	0.162324472		1.135906856
Età	5.6	3.73	0.0001	9.79826E-05		0.000685658
Propilè	2.95	1.97	0.0000	0.000266131		0.001862322
Propà	2.7	1.80	0.0003	1.902916258		12.65033433
i-Butà	1.5	1.00	0.7493	-0.936906822		-0.131124884
n-butà	1.28	0.85	0.0375	-0.033772328		-
i-pentà	0.63	0.42	0.0628	-0.019119484		-
1-hexè	0.37	0.25	0.0200	-0.003171198		-
Hexà	0.28	0.19	0.0026	-0.000297456		-
SUMA			1	1.096599677		13.82744466

Un cop trobat el valor de θ , es procedeix a resoldre el sumatori que és part de l'equació (5), el resultat del qual es mostra en verd a la **Taula 4**. Així doncs es té:

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} + 1 = \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j \cdot x_{Dj}}{\alpha_j - \theta} \rightarrow \left(\frac{L}{D}\right)_{\min} + 1 = 13.83$$

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 12.83$$

5.2.3. Correlació de Gilliland

A partir del valor de reflux mínim i el d'etapes mínimes d'equilibri, mitjançant la correlació de Gilliland, es pot determinar un nombre d'etapes d'equilibri reals aplicant l'equació (6) i (7).

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1}$$

En general, el reflux operacional R és aproximadament 1.1 a 1.5 vegades el valor de reflux mínim segons la dificultat de la separació [3], així doncs s'assumeix que $R = 1.5 \cdot R_{\min}$

$$X = \frac{(1.5 \cdot 12.83) - 12.83}{(1.5 \cdot 12.83) + 1} = 0.32$$

Si aquest valor de X s'aplica a la gràfica de la **Figura 9** es troba que $Y = 0.36$ i coneixent el valor de $N_{\min}$ es pot aïllar el valor de N de l'equació (7).

$$Y = \frac{N - N_{\min}}{N + 1}$$

$$0.36 = \frac{N - 11.63}{N + 1}$$

$$N = 18.70$$

Com el valor de X està comprès entre $0.01 < X < 1$, es pot aplicar l'equació de Eduljee **(9)** [5] que sol ser més precisa que obtenir el valor de la correlació de Gilliland.

$$Y = 0.75 \cdot (1 - X^{0.5668}) \quad \textbf{(9)}$$

$$Y = 0.75 \cdot (1 - 0.32^{0.5668})$$

$$Y = 0.3568 \sim 36, \text{ i substituïnt a eq. } \textbf{(7)}$$

$$N = 18.70$$

En aquest cas, el valor obtingut de la gràfica i de l'equació d'Eduljee són gairebé idèntics al reduir els decimals a les xifres significatives.

5.2.4. Localització de l'etapa d'alimentació

El lloc *òptim* per la localització de l'etapa d'alimentació és el lloc que, amb un conjunt donat d'altres especificacions operacionals, donarà com a resultat la major separació entre X_{LK} i X_{HK} amb un número d'etapes determinat, o bé si no s'especifica aquest, el lloc *òptim* d'alimentació que requereix el número més baix d'etapes per aconseguir la separació desitjada. [3]

L'equació de Kirkbridge (10), entre d'altres, permeten calcular aquesta localització òptima, tot i que només són aproximacions.

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\frac{Z_{HK}}{Z_{LK}} \cdot \left(\frac{X_{B,LK}}{X_{D,HK}} \right)^2 \cdot \frac{B}{D} \right]^{0.206} \quad (10)$$

N_R = nombre d'etapes per damunt de l'alimentació (secció de rectificació)

N_S = nombre d'etapes per baix de l'alimentació. (secció d'esgotament)

Z_{HK} i Z_{LK} = fracció molar del component clau pesat i del component clau lleuger a l'alimentació, respectivament.

$X_{B,LK}$ i $X_{D,HK}$ = fracció molar del component clau lleuger al producte de fons i del component clau pesat al destil·lat, respectivament.

B i D = Kmols de producte de fons per cada 100 kmols alimentats i Kmols de destil·lat per cada 100 kmols alimentats, respectivament.

A la **Taula 5** apareixen les dades necessàries per realitzar aquesta operació.

Taula 5. Fraccions molars d'alimentació, de producte de fons i de destil·lat dels components clau lleuger i pesat, i percentatges molars de producte de fons i de destil·lat respecte els kmols alimentats

Z_{HK} (i-butà)	Z_{LK} (propà)	$X_{B,LK}$ (propà)	$X_{D,HK}$ (i-butà)	B	D
0.7493	0.0003	$1.7 \cdot 10^{-5}$	0.1049	85.71	14.29

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\frac{Z_{HK}}{Z_{LK}} \cdot \left(\frac{X_{B,LK}}{X_{D,HK}} \right)^2 \cdot \frac{B}{D} \right]^{0.206}$$

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\frac{0.7493}{0.0003} \cdot \left(\frac{0.0000170}{0.1049} \right)^2 \cdot \frac{85.71}{14.29} \right]^{0.206} = 0.20$$

Es coneix que $N_R + N_S = 18.70 \approx 19$ i deixant de comptar el reboiler $N_R + N_S = 18$. Així doncs s'obté:

$$N_S = 15.014 \approx 15$$

$$N_R = 18 - 15 = 3$$

La localització òptima de l'alimentació, per tant, té 15 etapes d'equilibri per baix (secció d'esgotament) i 3 per dalt (secció de rectificació o enriquiment), sense comptar amb el reboiler.

5.3. Aplicació dels resultats del mètode FUG a Aspen HYSYS

Abans d'introduir els resultats a l'entorn virtual de HYSYS cal estimar el paquet termodinàmic que es desitja que utilitzi el *software*, ja que el programa haurà de calcular diferents propietats fisicoquímiques per resoldre els sistemes d'equacions que configuren el model.

HYSYS disposa de molts tipus de paquets termodinàmics, cadascun més adequat segons els compostos químics i les condicions d'operació amb que es treballa. La selecció dels paquets d'estimació de propietats podria basar-se en l'aplicació de procediments de decisió més o menys afortunats [6].

Segons (Cuevas Aranda, 2011), l'equació d'estat de *Peng-Robinson* (PR) és vàlida per estimar dades d'equilibri líquid-vapor en hidrocarburs. A diferència de l'equació de *Soave-Redlich-Kwong* (SRK), es podria aplicar tant a moderades com a altes pressions i temperatures, és per això que, en aquest projecte, s'utilitzarà el model de *Peng-Robinson* (veure **Figura 10**).

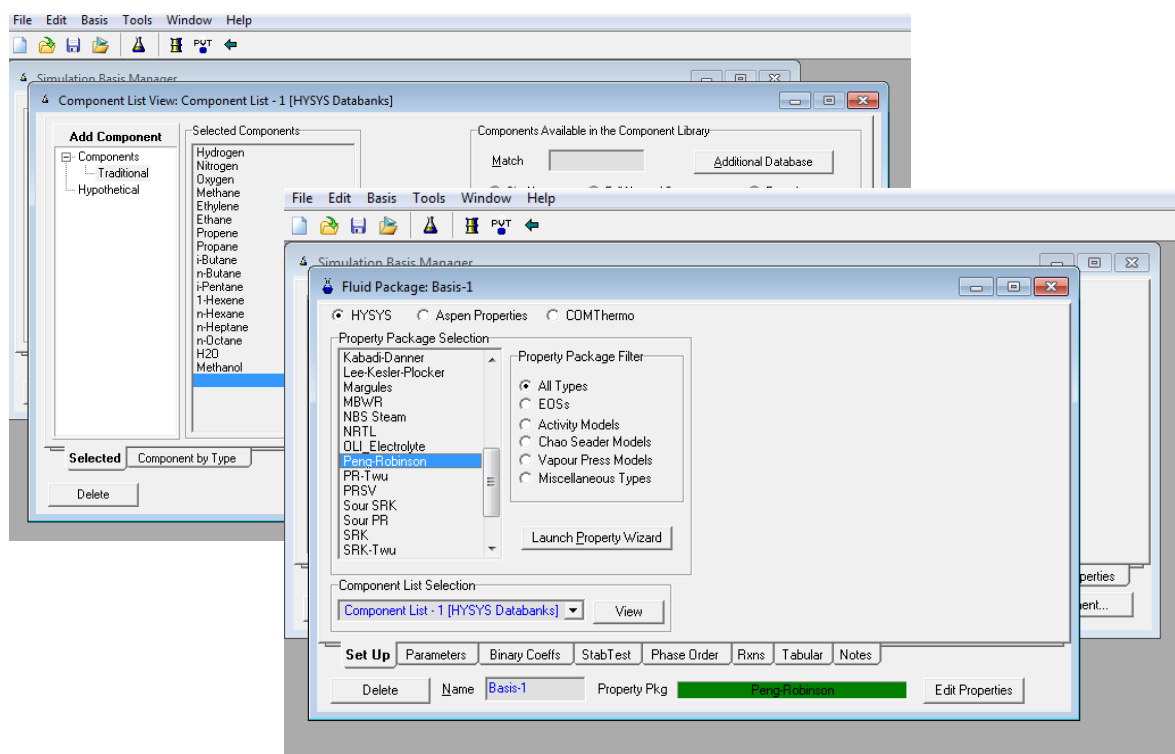
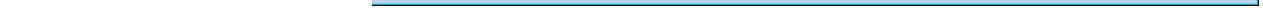


Figura 10. Llistat de components químics i tria del paquet termodinàmic a l'entorn HYSYS.

Un cop introduïts els compostos que formen part de la simulació i escollit el paquet termodinàmic adequat, ja es pot accedir a l'entorn de simulació. El programa disposa d'una paleta d'objectes que conté corrents de matèria i energia, equips diversos i funcions lògiques. A la **Figura 11** es mostra l'entorn de simulació i la paleta d'objectes, on ja s'ha introduït la columna de destil·lació amb les corresponents corrents d'alimentació, producte i energia.



Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD

Taula 6. Valors fixats i estimats per HYSYS. No apareixen totes les combinacions. La columna de destil·lació té 2 graus de llibertat, amb que especificant-ne 2 és suficient per a que el simulador comenci a iterar: segons quins valors es fixen HYSYS torna uns resultats o uns altres.

<u>ESPECIFICACIÓ (i)</u>	<u>Valor fixat</u>	<u>Valor estimat</u>
Relació de reflux	-	18.2 (19.24)
Recup. propà	0.95	-
Recup. i-butà	0.98	-
$X_{\text{propà}}$ al destil·lat	-	0.00193 (0.0019)
$X_{\text{i-butà}}$ al producte de fons	-	0.8567 (0.857)
<u>ESPECIFICACIÓ (ii)</u>	<u>Valor fixat</u>	<u>Valor estimat</u>
Relació de reflux	-	17 (19.24)
Recup. propà	-	0.948 (0.95)
Recup. i-butà	-	0.977 (0.98)
$X_{\text{propà}}$ al destil·lat	0.0019	-
$X_{\text{i-butà}}$ al producte de fons	0.857	-
<u>ESPECIFICACIÓ (iii)</u>	<u>Valor fixat</u>	<u>Valor estimat</u>
Relació de reflux	19.24	-
Recup. propà	-	0.969 (0.95)
Recup. i-butà	-	0.977 (0.98)
$X_{\text{propà}}$ al destil·lat	-	0.00194 (0.0019)
$X_{\text{i-butà}}$ al producte de fons	0.8567	-

Escollim que les recuperacions de propà i i-butà siguin 95% i 98%, respectivament. La **Taula 7** mostra les composicions de totes les corrents de la columna. A continuació es calcularà si la corrent de producte de fons conté <10 ppm d'etilè tal i com s'ha dit anteriorment.

Taula 7. Composicions de les corrents "Feed" "Distillate" i "Bottoms" obtingudes amb HYSYS.

Component	Feed (kg/h)	Distillate (kg/h)	Bottoms (kg/h)
Hidrogen	0.11	0.11	0
Nitrogen	226.46	226.46	0
Oxigen	0	0	0
Metà	0.01	0.01	0
Etilè	1202.04	1202.04	$1 \cdot 10^{-6}$
Età	0.38	0.37	$9 \cdot 10^{-3}$
Propilè	0.61	0.61	0
Propà	5.14	4.88	0.26
i-Butà	17407.56	349.01	17058.55
n-butà	870.19	6.59	863.60
i-pentà	1811.47	0.83	1810.64
1-hexè	671.71	0.02	671.69
Hexà	88.55	0.00	88.55
TOTAL	22284.23	1790.94	20493.30

El cabal màssic d'etilè al producte de fons és de $1 \cdot 10^{-6}$ kg/h.

$$\frac{1 \text{ kg d'etilè}}{1,000,000 \text{ kg producte}} = 1 \text{ ppm, per tant: } \frac{1 \cdot 10^{-6} \text{ kg d'etilè}}{20493.295 \text{ kg producte fons}} = 4.9 \cdot 10^{-11}$$

$$\frac{\frac{4.9 \cdot 10^{-11}}{1}}{\frac{1}{1,000,000}} = 4.9 \cdot 10^{-5} \text{ ppm}$$

Es compleix la condició de <10 ppm d'etilè al producte de fons. Un cop comprovat que el mètode FUG és efectiu per fer un càlcul aproximat dels paràmetres de disseny d'una columna de destil·lació, és hora de simular la columna amb el seu entorn real.

5.4. Simulació amb Aspen HYSYS

5.4.1. Unitat de recuperació d'isobutà (URIB)

Durant el càlcul pel mètode FUG es pot comprovar que s'ha fixat separar el propà de l'isobutà. La corrent de destil·lat es condensa totalment i surt de la columna a una temperatura de -159.2°C . És lògic que la temperatura sigui tan baixa, doncs s'estan liquant gasos com l'hidrogen i el nitrogen, però industrialment això és molt difícil i el procés real de la planta de PEAD no contempla aquest tipus de procés.

Realment el que s'utilitza és una columna amb reboiler (*Columna de destil·lació*), i la corrent gasosa que surt d'aquesta (*Vapor*) es refreda amb dos aerorefrigeradors disposats en paral·lel (*Aero1* i *Aero2*) i un bescanviador de calor amb aigua com a agent refrigerant (*Bescanviador1*). Part dels gasos condensen, amb que la corrent es fa arribar a un tanc separador (*Tanc separador1*) juntament amb dos corrents alienes a l'unitat de recuperació que pertanyen igualment a la planta de PEAD (*Corrent externa* i *i-butà fresc*). En aquest tanc es separen el líquid i el gas. El primer (*Recicle*) retorna a la columna impulsat per una bomba que li proporciona al fluid la pressió d'entrada necessària i que actua com a reflux, mentre que el gas passa per una petita columna empaquetada que disposa d'un bescanviador amb gasos freds (*Bescanviador2*). Aquests gasos freds són els mateixos que surten de la columna empaquetada doncs hi ha un tercer bescanviador refrigerat amb propà (*Bescanviador3*) que intenta liquar la majoria dels gasos que arriben. Així doncs, en un segon tanc separador (*Tanc separador2*) es separen el líquid i el gas: el líquid (*L*) es retorna a la columna empaquetada mentre que la baixa temperatura dels gasos (*Gasos refrigerats*) s'aprofita per refrigerar al *Bescanviador2* i un cop fan aquesta funció s'envien a cremar a la torxa (*A TORXA*). Aquest procés és un clar exemple d'optimització energètica. (Veure **Figura 12**)

Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD

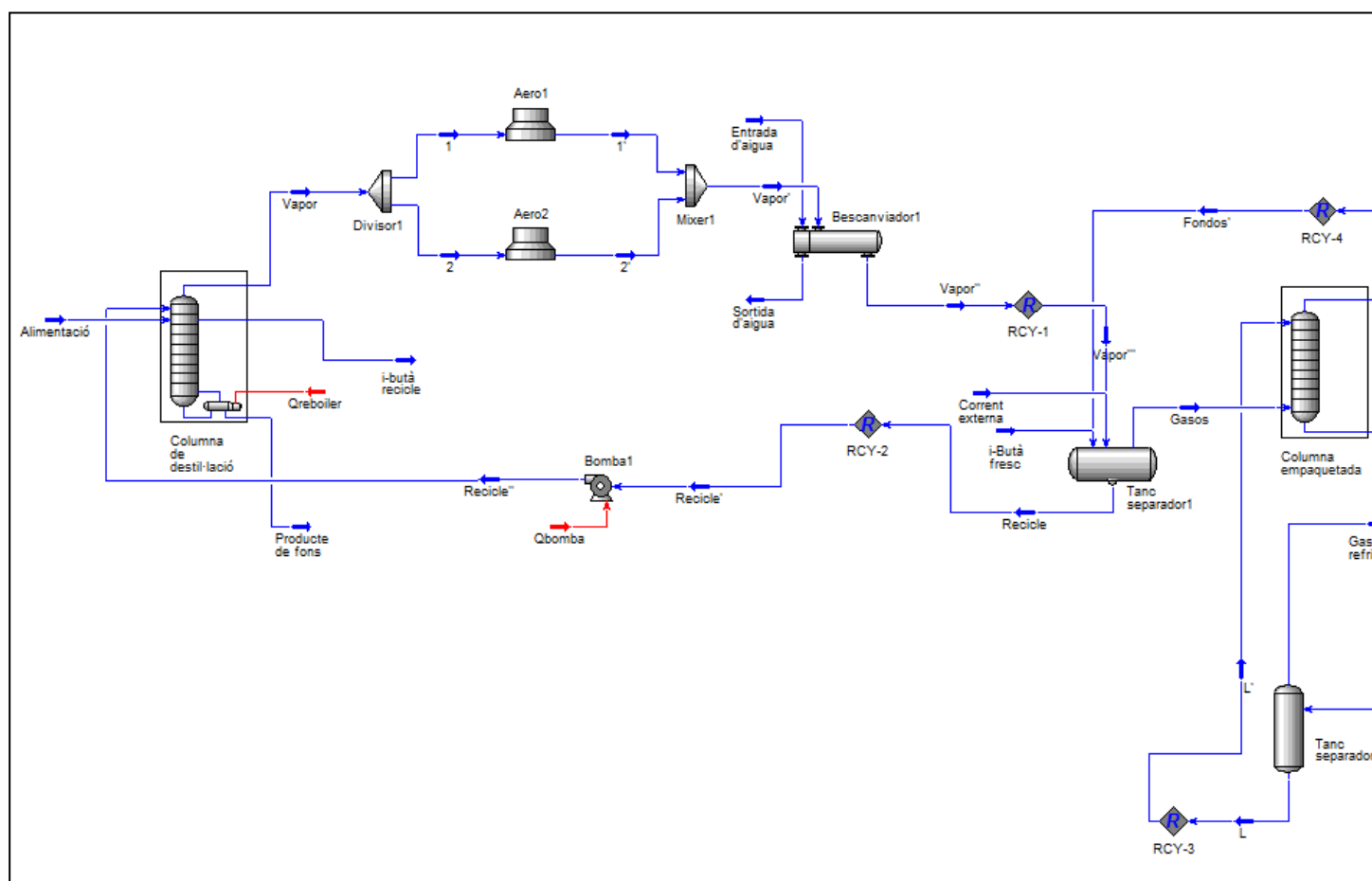


Figura 12. PFD (Process Flow Diagram) de l'unitat de recuperació d'i-butà (URIB) de la planta PEAD. Tots els equips han estat simulats en base a la planta real.

La columna a optimitzar, per altra banda, disposa d'una corrent d'extracció lateral rica en i-butà (*i-butà recycle*) com s'ha mencionat en anterioritat. Aquesta corrent segueix un procés de purificació que no s'explicarà en aquest projecte i que proporciona a la planta un cicle quasi tancat d'isobutà en el que s'intenta recuperar la majoria d'aquest dissolvent. De la mateixa forma, la corrent *Producte de fons* també segueix un procés que no es mencionarà.

5.4.2. Aplicació del mètode FUG a l'URIB

La columna que opera en aquests moments a la planta de PEAD disposa de 31 plats perforats, la corrent d'alimentació està al plat 28 i la d'extracció lateral al plat 11. Opera a $14.19 \text{ kg/cm}^2(\text{g})$ de pressió i té una pèrdua de càrrega de 0.2. El reboiler que utilitza consumeix 1327 kg/h de vapor de baixa pressió, que és el servei de vapor que és subministrat a la planta de PEAD (148°C a $3.5 \text{ kg/cm}^2(\text{g})$). El cabal màssic de gasos que s'envien a torxa és de 1487 kg/h . Es gasten 16330 kg/h d'aigua per refrigerar el cabal que passa pel *bescanviador1* i 845.3 kg/h de propà al *bescanviador3* (el propà és un altre servei del que disposa la planta i està a -36°C i $0.34 \text{ kg/cm}^2(\text{g})$ de pressió).

La planta de PEAD requereix que per la corrent d'extracció lateral de la columna (*i-butà de recycle*) circulin 19780 kg/h de líquid, amb un percentatge d'isobutà prou elevat i que aquest no contingui més de 10 ppm d'etilè. Per aquest motiu, el procés d'optimització ha de seguir complint aquesta condició.

A la **Figura 13** es mostra el PFD de la simulació de l'unitat de recuperació d'isobutà (URIB) actual amb els respectius cabals màssics.

Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD

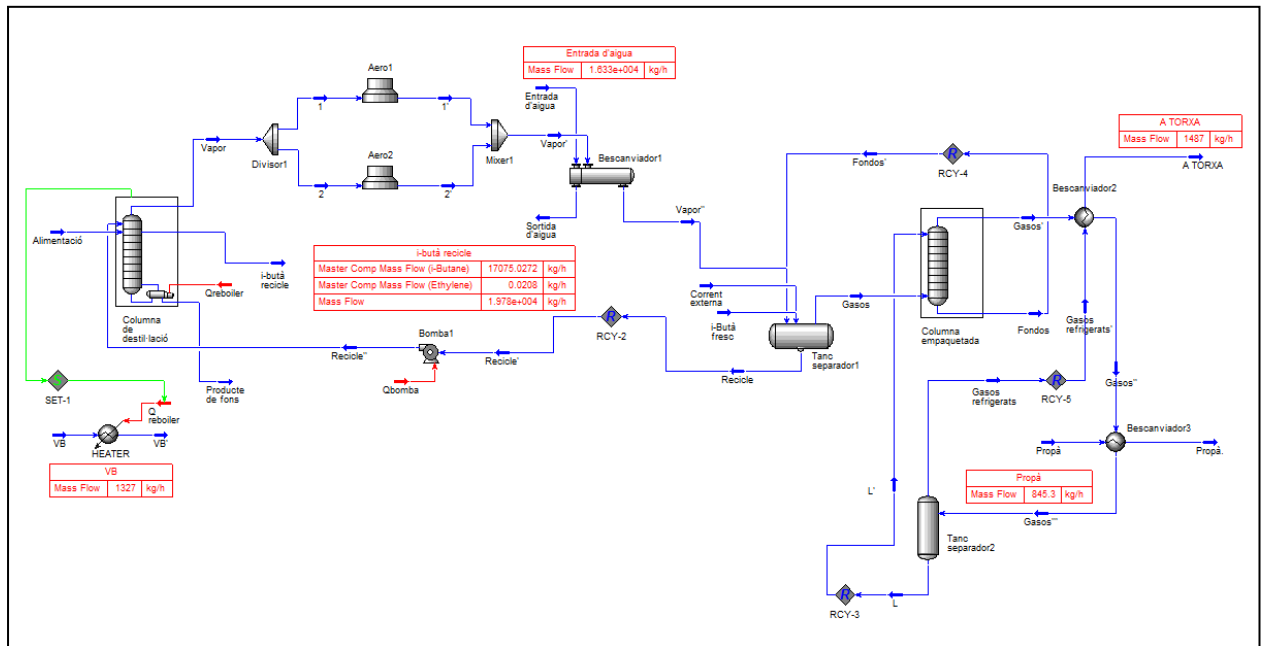


Figura 13. PFD actual de l'URIB. En vermell apareixen les corrents a optimitzar, excepte l'extracció lateral, que sempre ha de complir un règim de 19780 kg/h.

Per tal de comprovar que el mètode FUG **no** dona resultats fiables davant de processos de destil·lació que comprenen extraccions laterals es poden utilitzar els resultats del citat mètode i aplicar-los a HYSYS. (Veure **Taula 8.**)

Taula 8. Resultats obtinguts del mètode FUG aplicats a HYSYS. Es manté la pèrdua de càrrega de la columna en operació.

Nº d'etapes	19
Nº d'etapes de rectificació	3
Nº d'etapes d'esgotament	15
Localització Alimentació	16
Pressió d'operació (kg/cm ² _g)	14.50
Pèrdua de càrrega	0.2
Especificació	95% recuperació de propà

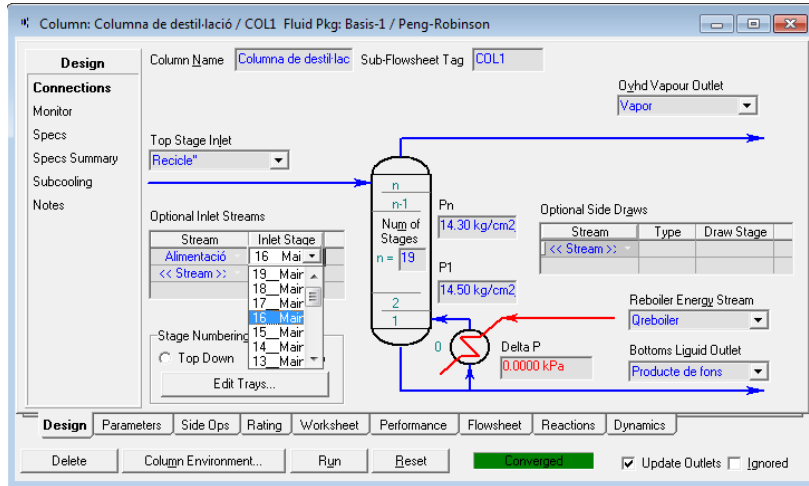


Figura 14 A Pestanya de disseny de HYSYS.

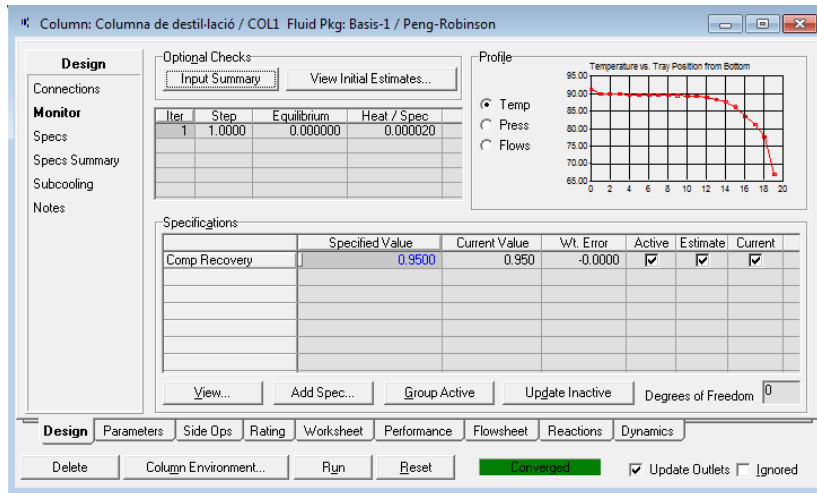


Figura 14 B Pestanya d'especificacions de HYSYS.

Si s'observen els fluxos màssics que mostra la **Figura 15** es pot veure que l'etapa 3 conté un major flux d' i-butà que d'altres etapes amb un menor contingut d'etilè. Així doncs es decideix localitzar l'extracció lateral en aquesta etapa.

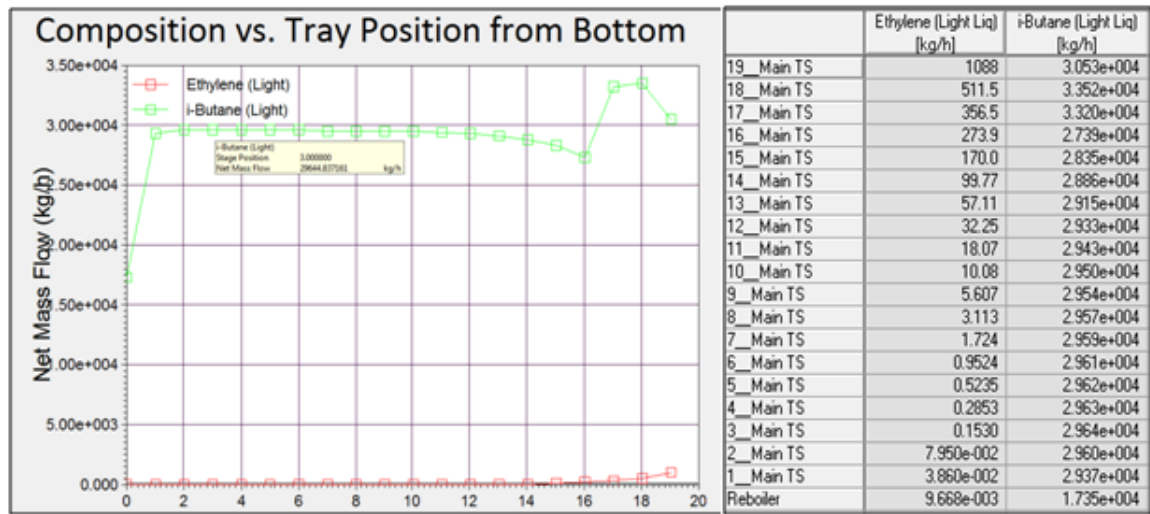


Figura 15. Fluxos massics d'etilè i i-butà obtinguts del simulador.

La Figura 16 mostra els resultats d'ubicar aquesta extracció lateral a l'etapa 3:

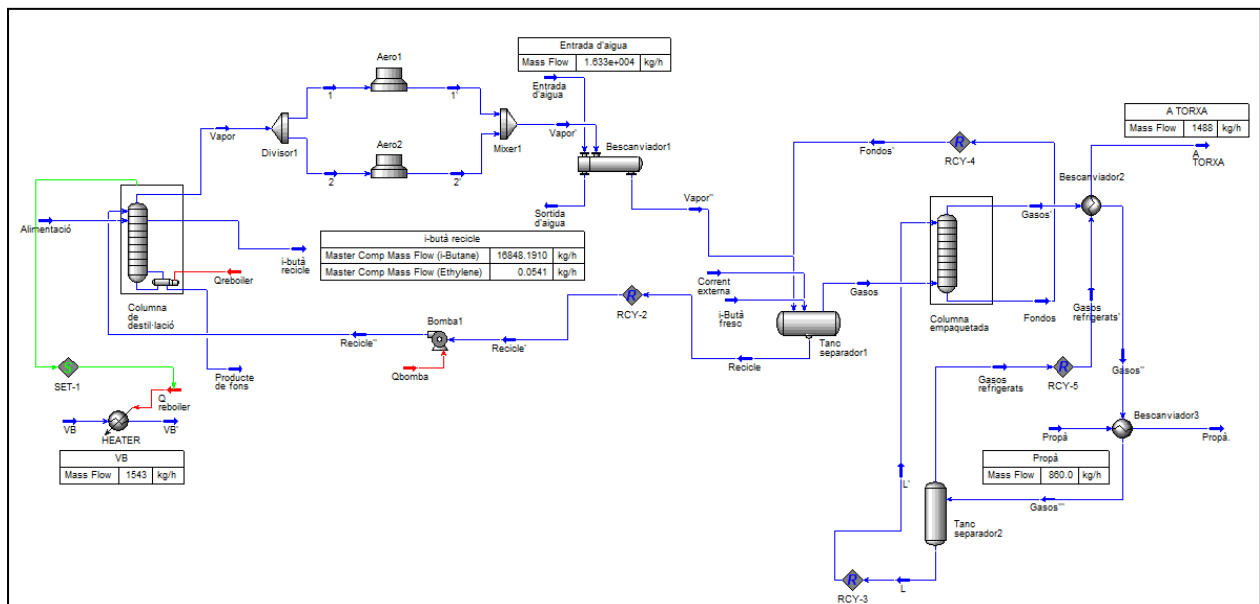


Figura 16. PFD de URIB amb extracció lateral d'i-butà de recicla ubicada a l'etapa 3 amb els paràmetres extrets del mètode FUG.

S'ha calculat que, per a un règim de 19780 kg/h de producte per l'extracció lateral, el màxim d'etilè permès (10 ppm) correspon a 0.1978 kg/h d'etilè. Per tant, la corrent *i-butà recicle* de la **Figura 16** compleix aquesta condició. Les diferències entre les corrents a optimitzar de la columna actual vers la columna simulada en base als resultats del mètode abreviat s'observen a la **Taula 9**.

Taula 9. Cabals màssics de les corrents a optimitzar de la columna en operació a la planta de PEAD i la columna FUG. El cabal d'aigua del bescanviador1 es queda fixat ja que és un grau de llibertat necessari per a la convergència de tot el sistema.

	Columna actual	Columna FUG
VB (Vapor de baixa pressió) (kg/h)	1327	1543
Entrada d'aigua (kg/h)	16330*	16330*
Propà (kg/h)	845.3	860
A TORXA (kg/h)	1487	1488
i-butà recicle (i-butà) (kg/h)	17075.027	16848.19
i-butà recicle (etilè) (kg/h)	0.0208	0.0541

Sabent que al sistema entren 17407.56 kg d'isobutà, ara per ara s'està recuperant un 98.1% d'aquest a la planta de PEAD, mentre que la columna amb dades del mètode FUG només en recupera un 96.8%. A més a més el consum de vapor i de propà és més elevat, s'envia 1 kg més de gasos a cremar i la corrent d'isobutà conté més etilè.

És obvi, doncs, que les dades del mètode FUG no s'adeqüen gaire bé amb el que es demana tot i que era d'esperar, perquè anteriorment ja s'ha citat que el mètode abreviat només serveix pel disseny de columnes amb una sola corrent d'alimentació i dos sortides de producte. Així doncs, queda demostrada la ineficàcia d'aquest mètode davant de columnes d'aquest tipus.

En vistes de continuar amb l'optimització de l'URIB, es partirà de la columna actual i s'anirà modificant certs paràmetres de la columna i observant-ne els resultats.

5.4.3. Balanç econòmic i optimització de l'URIB

A la **Taula 11** es mostren les despeses econòmiques que suposen les corrents de vapor, aigua, propà, isobutà i consum elèctric d'acord amb els preus estimats de la **Taula 10**, actualment. Val a dir que són dades relatives, doncs l'aigua de refrigeració està en un circuit tancat igual que el propà, i les despeses reals serien respecte l'energia que es necessita per regenerar aquestes matèries en quant a temperatures i pressions o pèrdues en el sistema. Al no tenir dades suficients, les despeses es tracten com a circuits oberts.

Taula 10. Preus estimats dels serveis necessaris de l'URIB i de l'isobutà. El preu del kWh s'ha tret de "Precios regulados 2014 electricidad y gas, Iberdrola" [8] per a una potència contractada >15 kW i amb la mitjana ponderada per als 3 termes: 4h diàries puntes (0.018762 €/kWh), 12h diàries planes (0.012575 €/kWh) i 8h diàries de supervall (0.004670 €/kWh). Segons l'informe trimestral de PEMEX® emès al gener de 2014 [7] el preu de l'isobutà el desembre de 2013 estava a 7.75 €/kg.

SERVEI	Preus estimats
Aigua de refrigeració	0.00203 €/kg
Vapor de baixa pressió (VB)	0.00472 €/kg
Propà canalitzat	0.70888 €/kg
Electricitat	0.0109712 €/kWh
Isobutà	7.75 €/kg

Taula 11. Despeses econòmiques diàries actuals de l'URIB. Els consums elèctrics estan calculats per a tot un dia de funcionament en kWh.

SERVEI	URIB	DESPESES ACTUALS €/dia
VB (kg/dia)	31848	- 64.65
Entrada d'aigua (kg/dia)	391920	- 1849.86
Propà (kg/dia)	20287	- 14381.19
Electricitat (Bomba) kWh	0.3864	- 0.00
Electricitat (Aero1) kWh	169.56	- 0.47
Electricitat (Aero2) kWh	267.12	- 0.75
Isobutà (entrada sistema) (kg/dia)	417781.44	- 3237806.16
Isobutà (sortida lateral) (kg/dia)	409800.72	+ 3175,955.58
TOTAL		-78141.48

D'acord amb la **Taula 10**, resulta obvi que el servei més car i per tant, el que és prioritari optimitzar, és el propà. A la vegada, cal dir que l'optimització ha de complir almenys la mateixa recuperació d'isobutà o inclús superar-la, doncs és el material més car i convé disminuir-ne les pèrdues.

➤ **Cas 1: Modificació de la temperatura del reboiler**

Actualment el reboiler opera a 120 °C consumint 1327 kg/h (31848 kg/dia) de vapor de baixa pressió. Si es disminueix la temperatura d'operació, els gasos que surten pel cap de la torre estaran a una temperatura més moderada i en conseqüència menys propà serà requerit per liquar els gasos. No obstant, si s'augmenta, tot i necessitar més propà, l'eficiència de la separació és millor i més isobutà és recuperat. Ambdós casos s'avaluen i els resultats es mostren a la **Taula 12**.

Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD

Taula 12. Despeses econòmiques a diferents temperatures (es manté la pressió i la pèrdua de càrrega, P : 14.19 kg/cm²(g) i ΔP : 0.2) El cabal d'aire entra al sistema són valors que no canvien respecte l'actual i per tant no apareixen a la taula. A $T^a < 115$ °C no es compleix l'especificació de 1 l'equip és 138 °C, es recomana treballar aproximadament a menys de 10 °C respecte la T^a de disseny, és per això que no s'augmenta més la T^a són increments respecte els valors actuals (Taula 11).

En verd: Valors optimitzats. Que són favorables a l'optimització de l'URIB.

En vermell: Valors no desitjats o que no compleixen especificació.

SERVEI	Unitats	114 °C	115 °C	117 °C	122 °C	125 °C	
VB	kg/dia	-6216	-5184	-3120	+2016	+5184	
Propà	kg/dia	-998.2	-839.8	-515.8	+355.4	+931.4	
Bomba ²	kWh	-0.03	-0.03	-0.01	+0.01	+0.02	
Aero1 ²	kWh	-10.68	-8.76	-5.4	+3.48	+9.24	
Aero 2 ²	kWh	-16.8	-12.72	-8.4	+5.52	+14.38	
i-butà sortida lat	kg/dia	-1958.88	-1614.96	-941.28	+585.74	+1407.58	
i-butà recup.	%	-0.49 %	-0.39 %	-0.23 %	+0.14 %	+0.34 %	
Despeses diàries	€/dia	14444	11896	6914	-4278	-10224	
% despeses respecte l'actual	%	+18.5 %	+15.2 %	+8.9 %	-5.5 %	-13.1 %	

Etilè	ppm	12.3	7.7	3.3	0.5	0.2	
A Torxa	kg/dia	-48	-48	-24	+24	+48	

² Els consums elèctrics de la bomba i els dos aerorefrigeradors són calculats per tot un dia de funcionament en kWh.

Com es pot observar a la **Taula 12**, al disminuir la temperatura, tot i reduir els consums dels serveis auxiliars, les despeses globals augmenten degut a la reducció de la recuperació d'isobutà i el seu elevat preu. Augmentant la temperatura del reboiler, els consums dels serveis augmenten, però la separació és més eficient i en conseqüència un major estalvi de despeses és aconseguit.

Des d'un punt de vista mediambiental la millor opció seria operar a 115 °C, doncs s'envien a cremar al dia 48 kg de gasos menys i es segueix complint la concentració d'etilè permès. És evident, però, que l'objectiu principal de tota empresa és augmentar el seu benefici i, per tant, operar a 128 °C resulta la millor opció desde el punt de vista econòmic, tot guardant un marge de seguretat respecte la T^a de disseny de l'equip en qüestió. D'aquesta manera les despeses de l'URIB es veuen reduïdes un 20.1 % respecte l'actual.

En vistes de seguir optimitzant l'unitat, per tal de reduir els elevats costos operacionals dels serveis auxiliars a aquesta temperatura, es decideix modificar la pressió operacional de la columna.

➤ **Cas 2: Modificació de la pressió operacional de la columna**

La pressió operacional d'un equip es controla, generalment, amb una PCV (*Pressure Control Valve*), la qual no apareix a l'entorn de simulació d'HYSYS perquè s'està treballant en mode estàtic. La PCV està connectada a un llaç de control típic que mesura la pressió de la columna. En funció del valor fixat de pressió (Set point), l'instrumentació adequada dona l'ordre d'obrir o tancar la PCV per regular d'aquesta forma la pressió operacional. Tot i això, treballar en mode dinàmic (que permet incloure instrumentació, llaços de control, PCV, etc. per controlar fluctuacions de temperatura, pressió i composició de les corrents simulades) no està a l'abast d'aquest projecte, amb que el canvi de pressió operacional es fixa directament a l'entorn de simulació de la columna sense contemplar cap tipus de control.

Actualment la columna treballa a 14.19 kg/cm^2 (g) de pressió, amb una pèrdua de càrrega de 0.2. A la **Taula 13** s'avalua el comportament de l'unitat modificant aquest paràmetre a una temperatura fixa de $128 \text{ }^{\circ}\text{C}$ mantenint sempre la pèrdua de càrrega actual de la torre.

Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD

Taula 13. Despeses econòmiques a diferents pressions (es manté la temperatura i la pèrdua de càrrega, T: 128 °C i ΔP: 0.2) El cabal d'aigua de
al sistema són valors que no canvien respecte l'actual i per tant no apareixen a la taula. La pressió màxima que es pot assumir respecta un mar
amb la pressió de l'alimentació, per permetre l'entrada de gas a la columna. **Els valors de la taula són increments respecte els valors actuals (T**

En verd: Valors optimitzats. Que són favorables a l'optimització de l'URIB.

En vermell: Valors no desitjats o que no compleixen especificació.

SERVEI	Unitats	11.50 Kg/cm ² (g)	12.04 Kg/cm ² (g)	12.58 Kg/cm ² (g)	13.11 Kg/cm ² (g)	13.65 Kg/cm ² (g)	14.19 Kg/cm ² (g)	14.24 Kg/cm ² (g)	14.30 Kg/cm ² (g)	Kg/cm ² (g)
VB	kg/dia	+15912	+14784	+13392	+11832	+10104	+8352	+8160	+7920	-
Propà	kg/dia	+12353	+9425	+6953	+4865	+3060.2	+1536.2	+1406.6	+1243.4	-
Bomba ³	kWh	+0.11	+0.10	+0.08	+0.07	+0.05	+0.04	+0.04	+0.03	-
Aero1 ³	kWh	+46.19	+39.94	+33.59	+27.24	+20.89	+14.75	+14.10	+13.35	-
Aero 2 ³	kWh	+72.70	+63.05	+52.80	+42.85	+32.9	+23.18	+22.25	+21.08	-
i-butà sortida lat	kg/dia	+3511.19	+3425.35	+3208.56	+2921.78	+2574.05	+2173	+2134.78	+2083.19	+2
i-butà recup.	%	+0.84 %	+0.82 %	+0.77 %	+0.7 %	+0.62 %	+0.52 %	+0.51	+0.5	-
Despeses diàries	€/dia	-18379	-19794	-19873	-19138	-17731	-15712	-15509	-15226	-
% despeses respecte l'actual	%	-23.5%	-25.3 %	-25.4 %	-24.5 %	-22.7 %	-20.1 %	-19.9 %	-19.5 %	-

Etilè	ppm	0	0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.1	0.1	-
A Torxa	kg/dia	+1464	+1032	+720	+456	+264	+72	+48	+48	-

Pressió d'operació act

³ Els consums elèctrics de la bomba i els dos aerorefrigeradors són calculats per tot un dia de funcionament en kWh.

A la taula anterior, com es pot observar, queda remarcada la pressió d'operació de 12.58 kg/cm²(g). A aquesta pressió les despeses de l'URIB es veuen reduïdes un 25.4%, és a dir, que els costos totals del funcionament de l'unitat suposen 20832.5 € menys, a expenses d'enviar 720 kg diaris de gasos a torxa, que a nivell mediambiental no és bo.

6. Resultats i discussió

A la **Taula 14** es presenten els resultats finals de l'optimització de l'unitat de recuperació d'isobutà, els quals s'han obtingut de modificar dos variables: temperatura del reboiler i pressió d'operació de la columna de destil·lació. Amb aquests canvis s'ha analitzat l'evolució econòmica de l'unitat en vers als costos procedents dels serveis auxiliars i de l'isobutà recuperat.

Taula 14. Despeses actuals i optimitzades de l'URIB. Les optimitzades s'han obtingut a una T^a reboiler: 128 °C i P operació: 12.58 kg/cm²(g)

SERVEI	URIB ACTUAL	URIB OPTIMITZADA	DESPESES ACTUALS €/dia	DESPESES OPTIMITZADES €/dia
VB (kg/dia)	31848	45240	- 64.65	-213.53
Entrada d'aigua (kg/dia)	391920	391920	- 1849.86	-795.60
Propà (kg/dia)	20287	27240	- 14381.19	-19309.89
Electricitat (Bomba) kWh	0.3864	0.4670	- 0.00	-0.01
Electricitat (Aero1) kWh	169.56	203.15	- 0.47	-2.23
Electricitat (Aero2) kWh	267.12	319.92	- 0.75	-3.51
Isobutà (entrada sistema) (kg/dia)	417781.44	417781.44	- 3237806.16	-3237806.16
Isobutà (sortida lateral) (kg/dia)	409800.72	413009.28	+ 3175,955.58	+3200821.92
TOTAL			-78141.48	-57309.01

Aquests valors, cal remarcar, són dades relatives i per tant no es poden prendre com a valors de costos reals. Són valors intuïtius, que han seguit una pauta i un procediment i que per tant l'únic que es pot creure de l'optimització presentada en aquest projecte és el comportament d'aquests. És a dir, si s'han vist reduïts els costos relatius, *a priori* els costos reals també ho haurien de fer.

Tot i això, cal advertir que les modificacions proposades poden suposar grans canvis a la resta de l'unitat o a la planta de PEAD sencera, la qual cosa comportaria més costos en compra d'equips nous o instrumentació de control necessària. Això, per desgràcia, no està a l'abast d'aquest treball ni a l'abast d'una sola persona, a raó d'aquest fet els programes de simulació, com Aspen HYSYS, i les empreses d'enginyeria agiliten tot aquest procediment i fa que altres empreses, siguin del sector que siguin, puguin reduir els seus costos de producció i maximitzar els seus beneficis.

7. Conclusions

Hereafter, the conclusions for this project will be shown:

- It has been demonstrated that Fenske-Underwood-Gilliland (FUG) method is useful for designing a distillation column with two product outlets: one at the top of the column (distillate) and other at the bottom (residue), but not for columns that contain an additional outlet.
- Although the FUG method gives appropriate results for achieve a desired separation in a distillation column, Aspen HYSYS streamlines the calculation process. HYSYS is a powerful tool for engineers to develop projects and the given results are more accurate. That results seems more to reality if the chosen fluid package is correctly selected.
- It has been demonstrated that increasing the temperature of the reboiler and reducing the operational pressure of a distillation column, the producing costs of an isobutane recovery unit of a real HDPE plant decrease respect the current ones.
- This project can be extended, designing a more efficient column that reduces the costs of production and, therefore, increase the long term benefits.

8. Bibliografia

- [1] Hernández, J. G. (2009). *Diseño de columnas de destilación utilizando aspen plus*. Zacateca: Universidad de Guanajuato.(pg. 1-12)
- [2] Universitat Politècnica de Catalunya. (s.f.). *UPC*. Recuperat l' 1 d' Abril de 2014, de EPSEM: http://epsem.upc.edu/~plantapilot/castella/model%20matematic_2.3.1.html
- [3] Perry, R. H., Green, D. W., & Maloney, J. O. (1992). *Manual del Ingeniero Químico* (Vol. II). Naucalpan de Juárez, México: McGraw-Hill/Interamericana de México. (pg. 5-43)
- [4] Zavaleta Ortiz Jack. (2007). *Balance de Materia y Energía*. Universidad Nacional del Callao.
- [5] Kister, H. Z. (1992). *Distillation Design*. Boston, USA: McGraw-Hill. (pg. 61-129)
- [6] Cuevas Aranda, M. (2011). *Introducción a la simulación en Ingeniería Química: Aplicación del simulador HYSYS.Plant para la resolución de ejercicios y el desarrollo de prácticas de laboratorio*. Jaén, España: Universidad de Jaén. (pg. 31-91)
- [7] PEMEX. (2014, Enero). *Precios interorganismos*. Recuperat el 28 d' Abril, 2014, de: Informe trimestral Octubre-Diciembre de 2013: http://www.pemex.com/acerca/informes_publicaciones/Documents/Art73_1401.pdf
- [8] Iberdrola. (2014, Transitorio desde 1 Abril hasta 1 de Julio en Electricidad). *Precios regulados 2014 Electricidad y gas*. Recuperat el 28 d' Abril , 2014 , de: www.iberdrola.es/clientes
- [9] AspenTech, INC. (2005, Octubre). *HYSYS 2004.2. Operations Guide*. Cambridge, Massachusetts: USA

INFORME D'AUTO AVALUACIÓ DEL TREBALL DE FI DE GRAU

Alumne

DADES BÀSIQUES SOBRE EL TREBALL DE FI DE GRAU

Data d'inici del TFG: 31 de Març del 2014

Data de finalització de les pràctiques: 23 de Maig de 2014

Durada total del TFG: 280 hores.

L'ENTITAT COL-LABORADORA O UNIVERSITAT

Nom de l'entitat o universitat: **Fluor Plant Engineering S.A.U.**

Centre de treball on s'ha desenvolupat el TFG: Port Tarraco - Moll Llevant
B6 2on- Dreta CP 43004

Unitat, departament o grup de recerca: Dpt. de Processos

Nom del director del TFG: Anton Valero Andrade

Nom del tutor acadèmic del TFG: Jaume Massons Bosch

L'ESTUDIANT

Nom: **Amadeu Blasco Muria**

Ensenyament: Grau de Química

Telèfon:
626077544

Adreça electrònica:
amadeu.blasco@estudiants.urv.cat

AUTOAVALUACIÓ GENERAL

	Deficient	Acceptable	Bé	Molt bé	Observacions
Coneixements assolits				X	El fet d'haver realitzat el TFG en una empresa relacionada amb l'enginyeria m'ha aportat molts conceptes nous.
Grau d'adaptació al lloc de treball			X		No ha sigut difícil adaptar-me a la situació de l'empresa doncs el personal està molt qualificat i obert a discutir experiències i compartir coneixements. Seguir el procediment general de l'empresa va ser una mica més difícil.
Implicació personal en el TFG				X	El que es tracta al meu TFG és molt diferent en quant a conceptes, fet pel qual ha portat que m'impliqués molt en el projecte en quant a recerca bibliogràfica. La majoria d'informació me l'han subministrat els mateixos treballadors de l'empresa.
Grau d'autonomia i presa de decisions			X		A partir de les fites que va especificar el tutor professional vaig decidir estructurar el treball de la meua forma. Val a dir, però, que aquesta ha anat millorant-se a partir de les opinions del tutor.
Desenvolupament experimental			X		En alguns moments de l'experimentació no entenia el perquè d'alguns resultats obtinguts. Amb l'ajuda del tutor vaig saber respondre i continuar els experiments sense problemes.
Discussió de resultats amb el director del TFG		X			En general, els resultats obtinguts són fiables i les conclusions són robustes. Ambdues parts estem conformes amb el resultat del TFG. La coordinació entre alumne i tutor ha estat difícil ja que al tutor el van desplaçar a unes altres oficines i la comunicació ha sigut difícil.
Redacció de la memòria				X	En general crec que la memòria està ben estructurada i ben redactada. La guia de redacció del moodle ha estat molt útil.

OBSERVACIONS D'INTERÈS

Indicar qualsevol aspecte que es consideri important de destacar en aquest informe d'autoavaluació. Indicar també aquí propostes de millora de cara a futurs treballs de Fi de Grau.

Tot i que la guia de redacció que és subministrada als alumnes via Moodle és molt útil, crec que falten especificar més opcions. (Espaiat, tipus de lletra, grandària de la lletra, etc) ja que en altres graus que es desenvolupen a la URV, aquestes opcions estan establertes per tal de tenir una col·lecció de TFG's uniformes en quant a format.

Signatura

Amadeu Blasco Muria

Tarragona, de



Optimització d'una columna de destil·lació d'una planta de PEAD amb Aspen HYSYS by [Blasco Muria, Amadeu Jaume Massons](#) is licensed under a [Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 4.0 Internacional License](#).

Puede hallar permisos más allá de los concedidos con esta licencia en <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.ca>