

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS  
INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

UNIVERSIDAD DE CANTABRIA



*Trabajo Fin de Grado*

**APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DE  
DISEÑO CONCEPTUAL A UNA PLANTA DE  
OBTENCIÓN DE BTX A PARTIR DE GAS DE  
ESQUISTO**

(Application of the conceptual design  
methodology of a BTX plant from shale gas)

Para acceder al Título de

***Graduada en Ingeniería Química***

Beatriz Morante Fonfría  
Febrero 2015

En primer lugar quiero agradecer a D. Javier R. Viguri Fuente, la confianza que ha depositado en mí y en mi trabajo, así como el apoyo y los consejos que me ha aportado durante estos meses. Del mismo modo, quiero agradecer a Camino, Itziar, Elena, Eva... haberme hecho sentir como una más.

Quiero dar las gracias de una manera especial a mis padres y a mi hermana, por estar a mi lado en todo momento. Y a Rubén, por ser mi norte.

Cambio y Corto.

<b>TÍTULO</b>	Aplicación de la metodología de diseño conceptual a una planta de obtención de BTX a partir de gas de esquisto		
<b>AUTOR</b>	Beatriz Morante Fonfría		
<b>DIRECTOR/CODIRECTOR</b>	D. Javier R. Viguri Fuente		
<b>TITULACIÓN</b>	Grado en Ingeniería Química	<b>FECHA</b>	20-02-2.015

## **PALABRAS CLAVE**

Diseño conceptual, gas de esquisto, etano, BTX, síntesis, análisis, evaluación.

## **PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

El diseño conceptual de procesos químicos se caracteriza principalmente por tres etapas: síntesis, análisis y evaluación. El gas de esquisto es un tipo de gas natural cuyos componentes (metano, etano o etileno entre otros) hace que tenga un gran potencial como materia prima en procesos químicos. Entre los productos comerciales que se pueden obtener están los commodities BTX (benceno, tolueno y xileno). Este trabajo Fin de Grado plantea el diseño preliminar de una planta de producción de BTX a partir de este gas, tomando como base el documento de CACHE. En este trabajo se realiza una adaptación a la situación europea (precios de materia prima y productos) y se desarrollan algoritmos de cálculo para los balances y el dimensionado, así como una evaluación económica. Otro de los objetivos, es la adaptación a un proyecto de trabajo en grupo en la asignatura Diseño de Procesos Químicos (DPQ), así como la creación de una guía del profesor para que los alumnos puedan realizar este trabajo de una manera óptima.

## **RESULTADOS**

La síntesis de procesos se inicia con el análisis de las diferentes alternativas de obtención de BTX a partir de gas de esquisto. Evaluando el ratio beneficio-coste de cada una de las rutas, se decide que la alternativa más adecuada es la de etano a aromáticos.

En una segunda etapa de síntesis se realiza un diagrama de flujo teniendo en cuenta las posibles alternativas de proceso. El diagrama seleccionado contiene 6 etapas principales: pretratamiento y reacción (compresor, horno, reactor, intercambiador de calor), separación de H<sub>2</sub>/C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> de los aromáticos (destilación), separación de H<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> de C<sub>2</sub>-C<sub>3</sub> (destilación) y separación de H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub> (Adsorción-PSA), separación del benceno, separación del tolueno y por último, separación del xileno de los compuestos pesados.

Una vez finalizada la etapa de síntesis, se realiza el balance de materia y energía a cada unidad. Para ello se desarrollan algoritmos de cálculo para cada equipo. Usando una alimentación de gas de 514 gmol/s, el proceso es capaz de producir 31594.2 Ton/año de benceno (pureza 99.97%), 10258.75 Ton/año de tolueno con (pureza 99.62%), 2298.5 Ton/año de xileno con (pureza 99.38%), 3162.7 Ton/año de metano (pureza 88.24%) y 42379.8 Ton/año de hidrógeno (pureza 99%). Los requerimientos de

calentamiento y enfriamiento del proceso son 19824 kW y 16111 kW respectivamente. El consumo de energía total tiene un valor de 2259 kW.

La última etapa es la determinación de la viabilidad económica general del proceso por medio del dimensionado y la estimación de costes utilizando el método modular de Guthrie. Se calculan los costes de capital y fabricación así como los ingresos anuales. Se estiman así mismo una serie de criterios económicos como el valor actual neto (VAN), el tiempo de recuperación y el retorno de la inversión (ROI). Por último, se realiza un análisis de sensibilidad de dichos criterios.

## **CONCLUSIONES**

Los balances de masa y energía propuestos sugieren que la producción de compuestos aromáticos a partir de etano gas de esquisto es viable. Sin embargo, al realizar la evaluación económica, se observa que la planta no es rentable debido a que se obtiene un valor negativo del VAN. Con el objetivo de conseguir un proyecto viable, se realiza un análisis de sensibilidad para poder determinar los valores de coste de materia prima, precio de venta del benceno, coste de electricidad, etc. que hacen que el VAN sea positivo.

El documento de trabajo fin de grado muestra el diseño de una manera resumida y simplificada; sin embargo, ha resultado laborioso y en ocasiones el nivel de dificultad ha sido elevado. Sin embargo, aunque los alumnos de la materia Diseño de Procesos Químicos vayan a encontrar cierto nivel de dificultad, si contemplan el máximo de alternativas en la síntesis del proceso y son ordenados y rigurosos con el balance de materia, pueden llegar a obtener buenos resultados.

Como trabajo posterior se sugiere el modelado del proceso en el simulador Aspen, así como la realización de la integración de calor, para poder hacer una comparativa de los resultados obtenidos y analizar las condiciones de viabilidad económica.

## **BIBLIOGRAFÍA/REFERENCES**

ANUNZIATA, O.A.; EIMER, G.A.; PIERELLA, L.B. (1999) Ethane conversion into aromatic hydrocarbons over molybdenum-containing MEL zeolites. *Applied Catalysis A: General* [online]. 182(2), pp. 267-274.

BIEGLER, L.T.; GROSSMANN, I.E.; WESTERBERG, A.W. (1997). *Systematic Methods of Chemical Process Design*. New Jersey: Pearson Education. ISBN: 0-13-492422-3.

MARTIN M.; GROSSMAN I.E.; SIROLA J. 2013. *Conceptual Design of an Aromatics Plant from Shale Gas*. Carnegie Mellon University. CACHE Process Design Case Studies.

<b>TÍTULO</b>	Application of the conceptual design methodology of a BTX plant from shale gas		
<b>AUTOR</b>	Beatriz Morante Fonfría		
<b>DIRECTOR/CODIRECTOR</b>	D. Javier R. Viguri Fuente		
<b>TITULACIÓN</b>	Grado en Ingeniería Química	<b>FECHA</b>	20-02-2015

## KEYWORDS

Conceptual design, shale gas, ethane, BTX, synthesis, analysis, evaluation.

## SCOPE

The conceptual design of chemical processes is mainly characterized by three phases: synthesis, analysis and evaluation. Shale gas is a type of natural gas whose components (methane, ethane or ethylene etc.) gives it a great potential as feedstock in chemical processes. Among the commercial products that can be obtained are the commodities BTX (benzene, toluene and xylene). The final project presents the preliminary design of a production of BTX from shale gas, based on the document from CACHE. In this paper an adaptation is performed at the European situation (prices of raw materials and products) and calculation algorithms for balances and dimensioning as well as a development of an economic evaluation. Another objective is adapting to a project working group on the subject Design of Chemical Processes and the creation of a teacher's guide for students to undertake this work in an optimal way.

## RESULTS

The synthesis process starts with the analysis of different alternatives for obtaining BTX from shale gas. By evaluating the cost-benefit ratio of each of the routes, it is decided that the best alternative is ethane to aromatics.

In a second synthesis step a flowchart is performed taking into account possible alternative processes. The selected diagram contain the six main stages: pre-treatment and reaction (compressor, furnace, reactor, heat exchanger), separation of H<sub>2</sub>/C1-C3 from aromatics (distillation), separation of H<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> from C2-C3 (distillation) and separation of H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> (adsorption-PSA), separation of benzene, toluene and the separation of xylene of heavy compounds.

Upon completion of the synthesis stage, the mass and energy balance to each unit is performed. For this stage algorithms of calculation are developed for each team. With an ethane shale gas feed of 514 gmol/s, the process is able to produce 31594.2 ton/yr of benzene (purity 99.97%), 10258.75 ton/yr of toluene (purity 99.62%), 2298.5 ton/yr of xylene (purity 99.38%), 3162.7 ton/yr of methane (purity 88.24%) and 42379.8 ton/yr of hydrogen (purity 99%). The heating and cooling duties of the process are 19824 kW and 16111 kW respectively. The total power consumption has a value of 2259 kW.

The final stage is the determination of the overall economic feasibility of process through sizing and cost estimation using the modular method Guthrie. The capital and manufacturing costs as well as annual revenue are been calculated. Furthermore a range of economic criteria have been considered such as net present value (NPV), payout time and return on investment (ROI). Ultimately, a sensitivity analysis of such criteria is performed.

## **CONCLUSIONS**

The mass and energy balances proposed, suggest that the production of BTX from ethane shale gas is feasible. However, when performing economic evaluation, it is observed that the plant is not profitable because a negative value of NPV is obtained. In order to achieve a viable project, a sensitivity analysis is performed to determine the values of raw material cost, price of benzene and the electricity cost, that make the VAN to be positive.

The final project showing the design of a condensed and simplified way, proved to be laborious and sometimes the difficulty level has been elevated. However, the students of the subject Design of Chemical Processes are going to find a certain level of difficulty, but contemplating the maximum of alternatives in the synthesis process and being sorted and rigorous with the mass balance, will can reach good results .

As subsequent work, it is suggested model the process in Aspen simulator, as well as the realization of heat integration, to make a comparison of the results and analyze the conditions of economic viability.

## **REFERENCES**

- ANUNZIATA, O.A.; EIMER, G.A.; PIERELLA, L.B. (1999) Ethane conversion into aromatic hydrocarbons over molybdenum-containing MEL zeolites. *Applied Catalysis A: General* [online]. 182(2), pp. 267-274.
- BIEGLER, L.T.; GROSSMANN, I.E.; WESTERBERG, A.W. (1997). *Systematic Methods of Chemical Process Design*. New Jersey: Pearson Education. ISBN: 0-13-492422-3.
- MARTIN M.; GROSSMAN I.E.; SIIROLA J. 2013. *Conceptual Design of an Aromatics Plant from Shale Gas*. Carnegie Mellon University. CACHE Process Design Case Studies.

## INDICE

LISTADO DE FIGURAS Y TABLAS.....	1
1. INTRODUCCIÓN. ....	2
1.1. DISEÑO CONCEPTUAL. ....	2
1.2. GAS DE ESQUISTO COMO MATERIA PRIMA.....	4
1.3. BENCENO, TOLUENO Y XILENO (BTX) COMO COMMODITIES QUÍMICOS.....	7
1.4. OBJETIVOS DEL TRABAJO FIN DE GRADO.....	7
2. SÍNTESIS DE ALTERNATIVAS DE PROCESO.....	8
2.1. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BTX. ....	8
2.1.1. INDUSTRIA PETROQUÍMICA ..... 8	
2.1.2. GAS DE ESQUISTO..... 9	
2.2. ESTUDIO DE LAS ALTERNATIVAS DE PROCESO. ....	10
2.3. SELECCIÓN DEL DIAGRAMA DE FLUJO PRELIMINAR. ....	13
2.2.1. REACTOR..... 13	
2.2.2. COLUMNAS DE DESTILACIÓN. .... 13	
2.2.3. ADSORCIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN (PSA). .... 14	
3. ANÁLISIS DEL PROCESO: BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA.....	16
3.1. PRINCIPALES CONSIDERACIONES. ....	16
3.2. BALANCE DE MATERIA EN CADA UNIDAD. ....	17
3.2.1 REACTOR..... 17	
3.2.2 ADSORCIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN (PSA) ..... 18	
3.2.3. COLUMNAS DE DESTILACIÓN ..... 19	
3.3. BALANCE DE ENERGÍA EN CADA UNIDAD.....	22
3.3.1. EQUIPOS DE INTERCAMBIO DE CALOR..... 22	
3.3.2. HORNO Y REACTOR. .... 23	
3.3.3 COMPRESORES, BOMBAS Y VÁLVULAS. .... 24	
4. DIMENSIONADO Y ESTIMACIÓN DE COSTES. ....	26
4.1. DIMENSIONADO Y COSTES DE EQUIPOS.....	26
4.2. CAPITAL FIJO Y CAPITAL DE TRABAJO.....	26
4.3. COSTES DE FABRICACIÓN. ....	27
4.4. ESTIMACIÓN DE BENEFICIOS. ....	29
4.5. INDICADORES ECONÓMICOS.....	30
4.6. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD. ....	30
5. GUIAS DEL PROFESOR.....	31

6. CONCLUSIONES.....	32
7. REFERENCIAS .....	34
8. ANEXOS.....	36
8.1. DIAGRAMA DE FLUJO FINAL. ....	36
8.2. TABLAS DE CORRIENTES POR SECCIONES. ....	37
I. Proceso de Aromatización. ....	37
II. Separación de C1-C3 y H2 de los compuestos aromáticos. ....	38
III. Separación de CH <sub>4</sub> y H <sub>2</sub> de C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> . Separación de CH <sub>4</sub> y H <sub>2</sub> via PSA .....	39
IV. Separación de C2 y C3. ....	40
V. Separación de benceno de C <sub>7</sub> -C <sub>9</sub> . ....	41
VI. Separación de tolueno y xileno .....	42
8.3. ALGORITMO DE CÁLCULO DE DIMENSIONADO Y COSTE DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN.....	43
8.4. RESUMEN DE LOS RESULTADOS DEL DIMENSIONADO Y COSTE DE LOS EQUIPOS. ....	45
8.5. CÁLCULO DE LOS COSTES DEL PROCESO. ....	46
8.6. CÁLCULO DE LOS INDICADORES ECONÓMICOS .....	46
8.7. REPRESENTACIÓN GRÁFICA DEL ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD. ....	47

## LISTADO DE FIGURAS Y TABLAS

Figura 1. Esquema del ciclo de vida de un proceso químico.....	3
Figura 2. Características de la fase de diseño preliminar.....	3
Figura 3. Clasificación general de las reservas de gas.....	4
Figura 4. Diagrama de procesado de gas después de ser extraído.....	5
Figura 5. Mapa de las reservas de gas de esquisto.....	5
Figura 6. Reservas de gas de esquisto en Europa.....	6
Figura 7. Diagrama de flujo de la obtención de productos a partir de crudo de petróleo.....	8
Figura 8. Diagrama de flujo para obtener diferentes productos a partir de metano y etano de gas de esquisto.....	9
Figura 9. Diagrama de flujo de las diferentes alternativas de proceso de obtención de BTX a partir de etano de gas de esquisto.....	12
Figura 10. Diagrama de flujo seleccionado.....	15
Figura 11. Algoritmo de cálculo para el reactor.....	18
Figura 12. Algoritmo de cálculo para el PSA.....	19
Figura 13. Temperaturas en una columna de destilación.....	20
Figura 14. Algoritmo de cálculo de una columna de destilación.....	21
Figura 15. Algoritmo de cálculo del calor en un enfriador de una mezcla de dos fases.....	23
Figura 16. Secuencia de compresión con enfriamiento intermedio.....	24
Figura 17. Distribución del coste total de los equipos.....	27
Figura 18. Distribución detallada de los Costes de Fabricación.....	28
Figura 19. Distribución de los ingresos por ventas de cada producto.....	29
Figura 21. Variación del VAN en función del coste de Etano.....	47
Figura 22. Variación del VAN con las tasas.....	47
Tabla 1. Recursos de gas de esquisto técnicamente recuperables.....	6
Tabla 2. Relación de beneficio/coste para cada una de las rutas de obtención de BTX.....	9
Tabla 3. Determinación del Capital de Proceso.....	26
Tabla 4. Capital Fijo y Capital de Trabajo.....	27
Tabla 5. Costes de Fabricación.....	28
Tabla 6. Determinación del Beneficio Bruto.....	29
Tabla 7. Resumen de la determinación de los Beneficios.....	29
Tabla 8. Principales Indicadores Económicos.....	30
Tabla 9. Resultados del Análisis de Sensibilidad.....	30
Tabla 10. Resumen de los resultados finales.....	32
Tabla 11. Requerimientos de energía I.....	37
Tabla 12. Tabla de corrientes del proceso de aromatización.....	37
Tabla 13. Requerimientos de energía II.....	38
Tabla 14. Tabla de corrientes de la separación de H <sub>2</sub> /C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> de los aromáticos.....	38
Tabla 15. Requerimientos de energía III.....	39
Tabla 16. Separación de CH <sub>4</sub> y H <sub>2</sub> de C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> .....	39
Tabla 17. Requerimientos de Energía IV.....	40
Tabla 18. Tabla de corrientes de la separación de C <sub>2</sub> y C <sub>3</sub> .....	40
Tabla 19. Requerimientos de energía V.....	41
Tabla 20. Separación de benceno.....	41
Tabla 21. Requerimientos de energía VI y VII.....	42
Tabla 22. Tabla de corrientes de separación de tolueno y xileno.....	42

## **1. INTRODUCCIÓN.**

Este trabajo Fin de Grado se desarrolla ante la necesidad de realizar un diseño preliminar de una planta de producción de BTX (benceno, tolueno y xileno) a partir de metano, etano o etileno contenido en el gas de esquisto.

En primer lugar, se realiza una búsqueda bibliográfica de las materias primas, de los productos, de la producción tradicional de BTX y de la situación de la explotación de gas de esquisto a nivel mundial y europeo. Posteriormente, se exponen las posibles rutas de obtención de BTX así como un estudio de la viabilidad económica de cada una de ellas. Una vez analizadas las posibles rutas, se propone un diagrama de flujo y se lleva a cabo el balance de masa y energía. Conocidas las composiciones molares de las corrientes, la temperatura y presión de equipos y corrientes, así como el calor requerido y la potencia consumida, se realiza una evaluación económica. Se establece la tasa de retorno de la inversión y el valor actual neto del proyecto. El propósito de esta fase es establecer el potencial económico y poder identificar alternativas ingenieriles de proceso.

### **1.1. DISEÑO CONCEPTUAL.**

El diseño en ingeniería es la elaboración de un dispositivo, sistema, proceso o producto para responder a un objetivo fijado. Está basado en las matemáticas y en las ciencias básicas e ingenieriles, pero también en las humanidades, las ciencias sociales y en la economía.

El diseño en ingeniería implica el desarrollo de las especificaciones fijadas, justificando de manera razonada los criterios aplicados, así como el análisis de síntesis, construcción, prueba y evaluación de soluciones alternativas para satisfacer los criterios deseados. Sin olvidar la seguridad del sistema operativo, la fiabilidad, la viabilidad económica, la estética, la ética y las consideraciones sociales.

En la figura 1 se muestran las fases del ciclo de vida de un proceso químico. El diseño preliminar o conceptual se encuentra en las primeras fases, entre la planificación y el desarrollo.

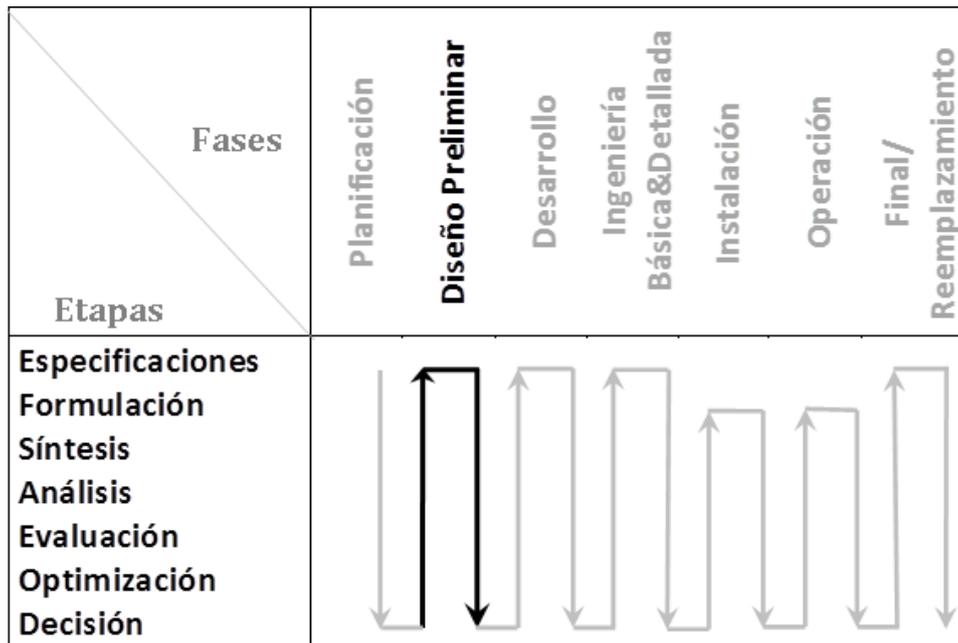


Figura 1. Esquema del ciclo de vida de un proceso químico

Una vez establecidas las diferentes fases y etapas en el diseño de un proceso químico, hay que diseñar un sistema o proceso que sea capaz de llevar a cabo las necesidades establecidas. Las características específicas de esta fase son:

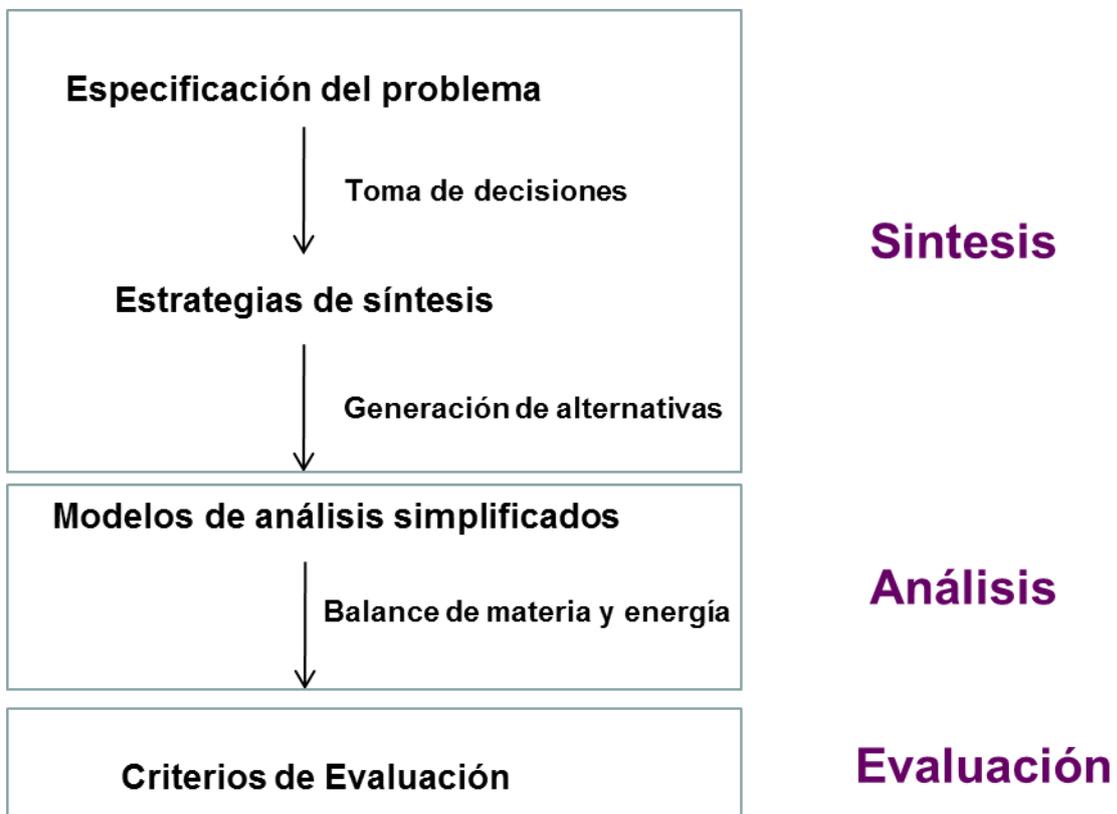


Figura 2. Características de la fase de diseño preliminar

## 1.2. GAS DE ESQUISTO COMO MATERIA PRIMA.

El gas de esquisto es un tipo de gas natural, cuyo nombre se debe a su origen, el esquisto. Este tipo de roca pertenece al grupo de los silicatos. Se caracterizan por su variación de la estructura foliada y la composición química, con una estructura molecular de un átomo de silicio y cuatro de oxígeno. El esquisto proviene de arcillas o lodos, que han sido sometidos a procesos metamórficos (Wang et al., 2013).

El esquisto negro que contiene materia orgánica se rompe a altas temperaturas y presiones, formando gas natural. Debido a la baja densidad de este gas, a menudo se desliza a través de la pizarra formando depósitos convencionales de gas natural. Sin embargo, el sellado de la roca bloquea el paso de gas natural, que es absorbido por el esquisto de arcilla, dando lugar al llamado gas de esquisto. La impermeabilidad del esquisto impide la fácil extracción del gas.

El gas de esquisto se encuentra a más profundidad que otras fuentes de gas natural, como se muestra en la figura 3. Se puede observar, que tiene una disposición horizontal.

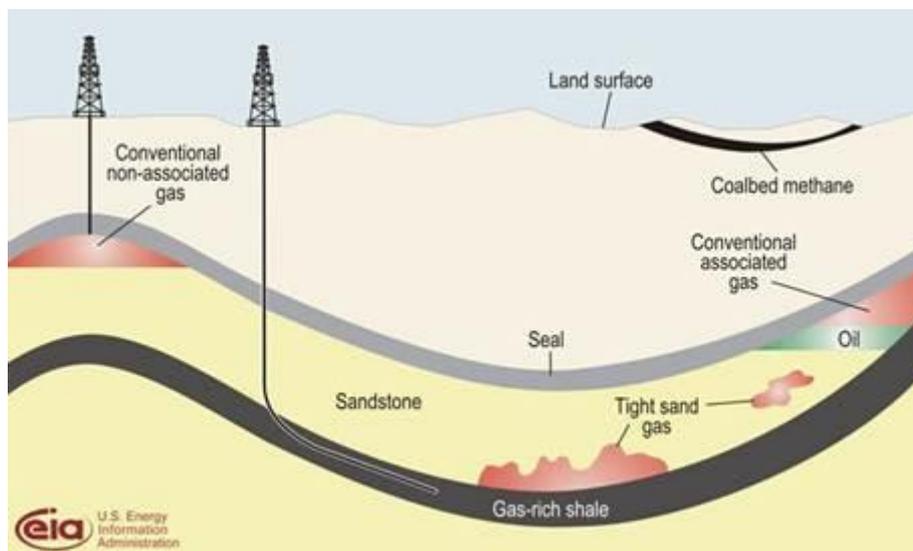


Figura 3. Clasificación general de las reservas de gas (EIA, 2011).

El gas extraído se somete a tratamiento en una serie de etapas como se ve en la Figura 4. En primer lugar, el gas se separa del líquido utilizado para la extracción. A continuación, se eliminan los gases ácidos tales como  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$ , se realiza una deshidratación y se eliminan el mercurio y el  $\text{N}_2$ . Después de este punto, el gas natural se separa de las fracciones más pesadas. Se realiza un fraccionamiento húmedo para que el gas de esquisto se pueda utilizar como fuente de productos químicos.

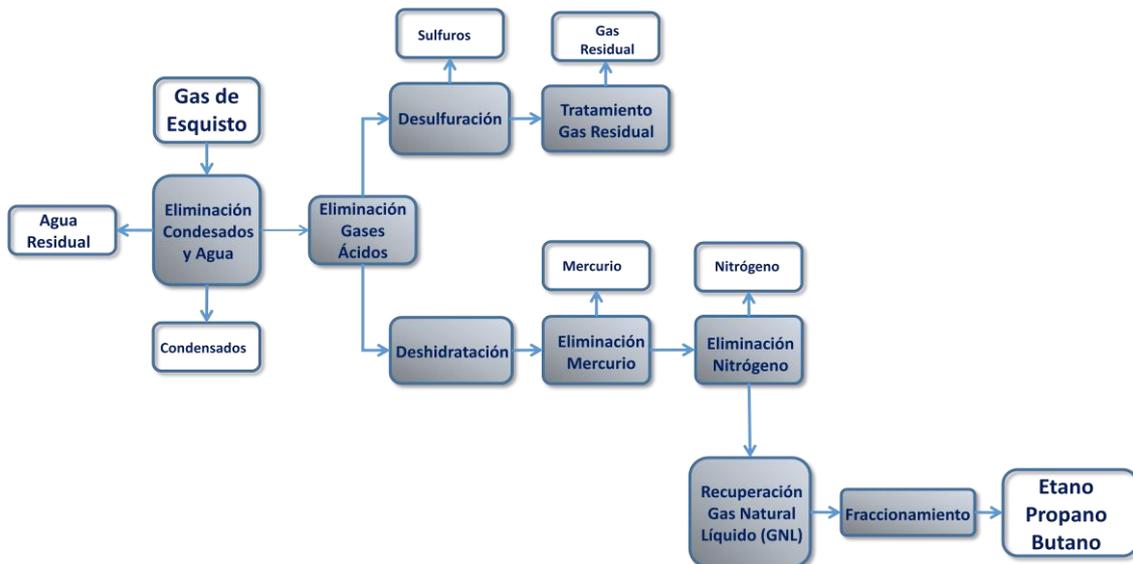


Figura 4. Diagrama de procesado de gas después de ser extraído (Plant Process Equipment, 2013)

De acuerdo a las reservas de gas natural localizados en la figura 5 (EIA, 2011), se puede hacer un análisis de los diez países con mayores reservas de este tipo de gas.

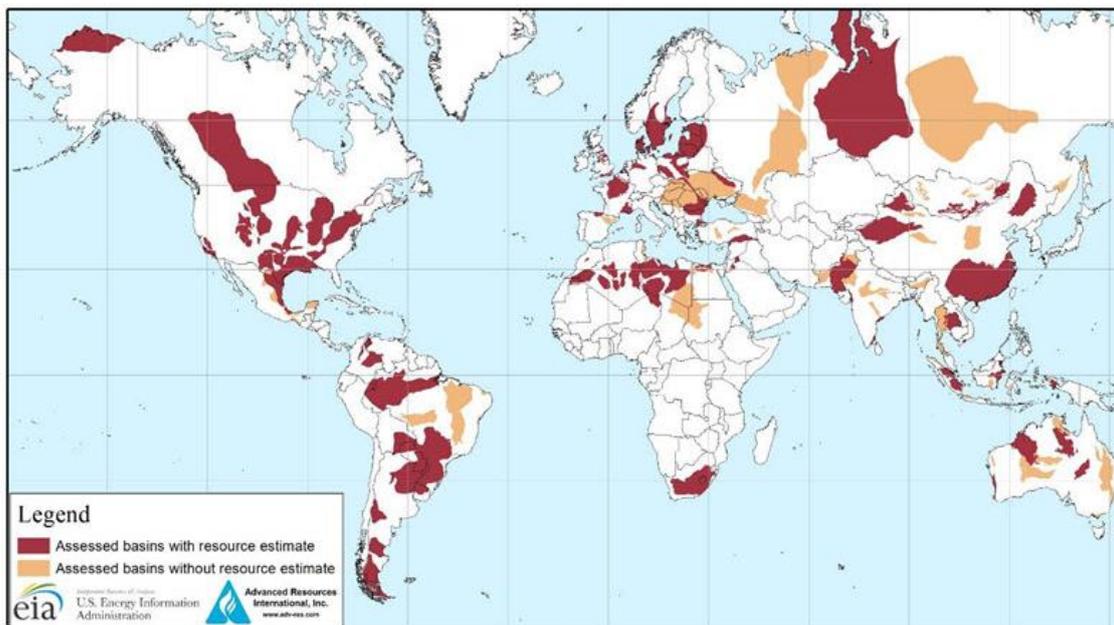


Figura 5. Mapa de las reservas de gas de esquisto (EIA, 2011).

China posee la mayor reserva recuperable de gas de esquisto, estimada en 31.6 trillones de metros cúbicos (tmc). En la tabla 1 se muestran los países y la cantidad de gas de esquisto recuperable (Melikoglu, 2013):

**Tabla 1. Recursos de gas de esquisto técnicamente recuperables**

<b>País</b>	<b>Reserva de gas de esquisto (tmc)</b>
China	31.6
Argentina	22.7
Argelia	20
EE.UU.	18.8
Canadá	16.2
México	15.4
Australia	12.4
Sudáfrica	11
Rusia	8.1
Brasil	6.9
Otros países	43.5
<b>Total</b>	<b>206.7</b>

Las reservas estimadas en Europa se muestran en la figura 6. Actualmente no hay producción comercial de gas de esquisto en la UE, debido a que no hay una política unificada sobre la utilización de este recurso.



**Figura 6. Reservas de gas de esquisto en Europa. (EAI, 2011)**

### **1.3. BENCENO, TOLUENO Y XILENO (BTX) COMO COMMODITIES QUÍMICOS.**

El benceno, el tolueno y el xileno son conocidos como compuestos aromáticos básicos, llamados así por su olor perfumado distintivo, siendo hidrocarburos compuestos exclusivamente por carbono e hidrógeno. En la industria química, los compuestos aromáticos BTX en gran medida producidos a partir de petróleo constituyen bloques de construcción química, cuyos productos finales ayudan a satisfacer las necesidades humanas en muchas áreas, como la salud, la higiene, la vivienda y la alimentación. Ejemplos de ello son los productos farmacéuticos (aspirina, penicilina), materiales de embalaje, ropa y neumáticos entre otros.

El benceno, el tolueno y los xilenos tienen el peso molecular más bajo que sus homólogos hidrocarburos. Puesto que se producen a gran escala y a menudo juntos en el mismo proceso, pueden ser considerados como un grupo, es decir, BTX. Sin embargo, BTX, como tal, no es un producto comercial. O bien es un componente importante de una mezcla bruta, como el reformado de gasolina, o se separa y purifica en sus componentes individuales.

### **1.4. OBJETIVOS DEL TRABAJO FIN DE GRADO.**

El objetivo de este trabajo es realizar un diseño conceptual de una planta de obtención de commodities químicos BTX a partir de gas de esquisto como materia prima. Se parte de un documento de CACHE sobre el que se realiza una adaptación a la situación europea de los precios de materia prima y productos y disponibilidad del gas de esquisto. Se dedica especial énfasis a los aspectos metodológicos del diseño conceptual, como los algoritmos de cálculo para los balances y el dimensionado. También se lleva a cabo la aplicación de herramientas short-cut para la realización de los cálculos manuales.

Otro de los objetivos, es la adaptación del documento de CACHE a un proyecto de trabajo en grupo en la asignatura Diseño de Procesos Químicos, así como la creación de una guía del profesor para la realización del trabajo en grupo por parte de los alumnos.

## 2. SÍNTESIS DE ALTERNATIVAS DE PROCESO.

### 2.1. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BTX.

Originalmente BTX se obtiene para su uso comercial mediante la pirólisis de carbón. A partir de la Segunda Guerra Mundial, su producción ha estado relacionada con el petróleo, en la gasolina de pirólisis o reformado. Más tarde los aromáticos se obtienen a partir de gas natural y gas de esquisto.

#### 2.1.1. INDUSTRIA PETROQUÍMICA

BTX constituye una parte de un componente de la gasolina importante llamado reformado. Mientras el reformado es la principal fuente de compuestos aromáticos en la mayoría del mundo, la gasolina de pirólisis es también una fuente importante. Ambos son mezclas de hidrocarburos aromáticos y alifáticos, en diferentes proporciones (Matar et al., 2008). La composición de la parte aromática varía de acuerdo con las condiciones de procesamiento durante su producción. La figura 7 (PBF Energy Industry, 2012) representa un diagrama de flujo de la obtención de productos a partir de crudo de petróleo, entre los que se encuentra el BTX.

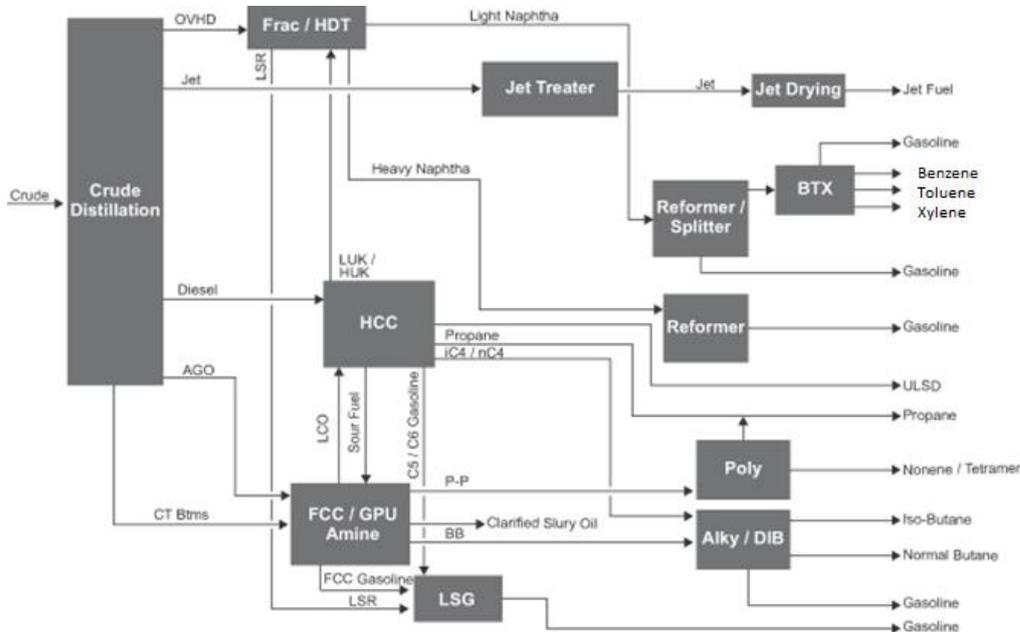


Figura 7. Diagrama de flujo de la obtención de diferentes productos a partir de crudo de petróleo.

## 2.1.2. GAS DE ESQUISTO.

Se ha realizado un diagrama de flujo (Figura 8), en el que se muestran los productos obtenidos, a partir de metano y etano del gas de esquisto por diferentes vías.

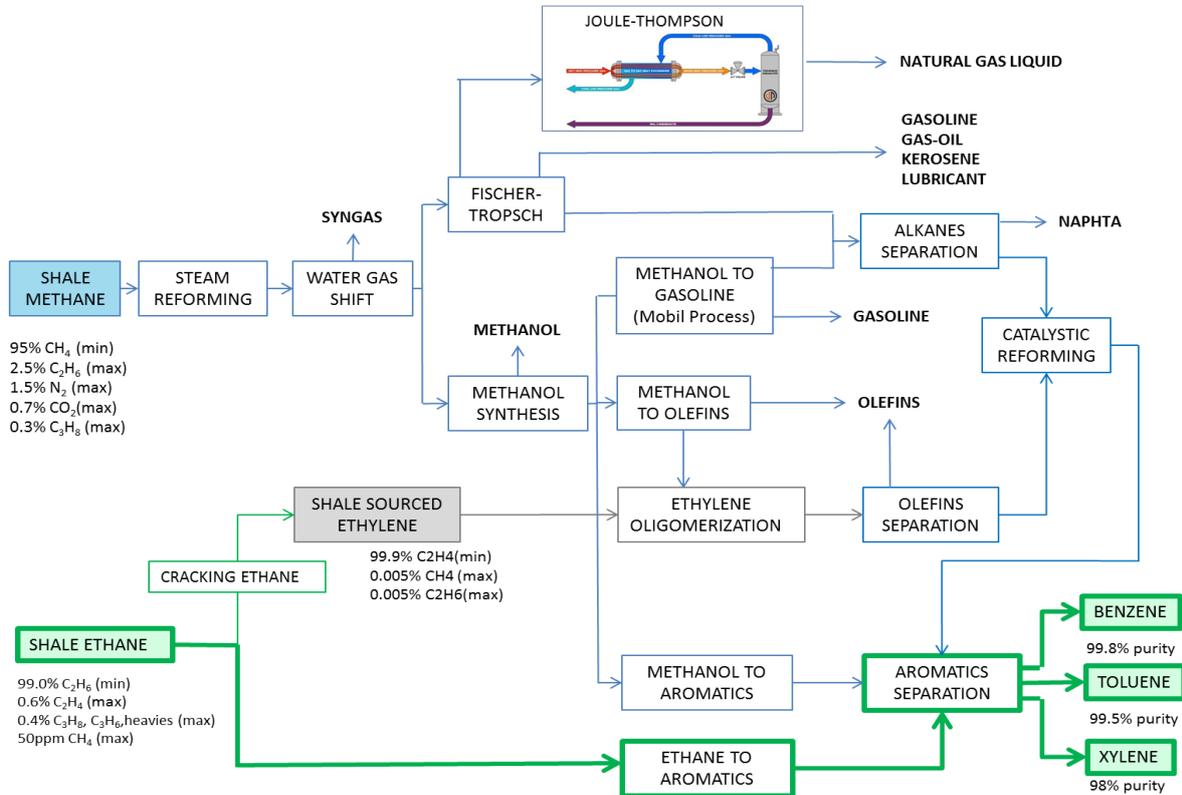


Figura 8. Diagrama de flujo para obtener diferentes productos a partir de metano y etano de gas de esquisto.

Se ha hecho un estudio de la relación ingresos (€) de productos BTX y coste (€) de materia prima. La ruta más rentable es la producción de BTX a partir de etano de esquisto, vía etano a aromáticos, con un beneficio de 7.24 €/€ de materia prima. En la tabla 2 se muestran los resultados para todas las rutas:

Tabla 2. Relación de beneficio/coste para cada una de las rutas de obtención de BTX.

Ruta	Fuente	Coste (€/s)	Beneficio (€/s)	$\frac{\text{€Beneficio}}{\text{€Coste}}$
Vía Fischer-Tropsch			0.0866	0.2844
Vía Metanol a Gasolina	Metano	0.3045	0.3971	1.3041
Vía Metanol a Olefinas			0.1462	0.4801
Vía Metanol a Aromáticos			0.6965	2.2874
Etileno a Aromáticos	<b>Etileno</b>	3.3172	1.3456	0.4056
Etano a Aromáticos	<b>Etano</b>	0.3147	2.2772	7.2361

## 2.2. ESTUDIO DE LAS ALTERNATIVAS DE PROCESO.

Se van a estudiar las alternativas de las cinco etapas del proceso que se muestran en la figura 9:

- Primera Etapa: pre-tratamiento previo al reactor. Al tratarse de una corriente gaseosa la alternativa para aumentar la presión es uno o varios compresores. Sin embargo, para aumentar la temperatura se puede utilizar un intercambiador de calor, un horno o aprovechar el aumento de temperatura que produce la compresión. Esta decisión viene definida por la temperatura que se necesita alcanzar en el reactor: 973K, es por ello, que se propone el uso de un horno.
- Segunda Etapa: reacción. Hay que decidir el tipo de contacto en el reactor catalítico: lecho fluidizado o lecho fijo. El uso de un regenerador junto a un reactor de lecho de fluidizado permite que las partículas de catalizador parcialmente desactivado se retiren a una zona de regeneración. El catalizador es así capaz de mantener una alta tasa de actividad durante el funcionamiento del reactor. Los costes de operación y de capital de esta alternativa son altos (Lauritzen et al., 2009), por lo que se descarta esta configuración y se opta con un reactor de lecho fijo.
- Tercera Etapa: separación de H<sub>2</sub>/C1-C3 de los productos aromáticos/C9. Mediante un equipo flash se separa la corriente de vapor que contiene H<sub>2</sub> e hidrocarburos C1-C3, de la corriente de producto líquido y que contiene los compuestos aromáticos (C6-C8) y aromáticos pesados (C9) como residuo. En esta etapa también se estudian las diferentes alternativas para la corriente de alcanos: recircular C2+C3 al reactor o realizar una destilación para separar los C2 de los C3 y así recircular únicamente los C2. En esta última opción, se podría realizar una destilación en la corriente de C3 para obtener propano y propileno como productos. La recirculación de C3 al reactor produciría una acumulación de estos componentes en el reactor y debido a que ni el propano ni el propileno nos interesan como productos, se opta por la opción de recircular únicamente los C2.

- Cuarta Etapa: separación de  $H_2$  y  $CH_4$  de alcanos. Las alternativas que se estudian son la utilización de destilación criogénica, membrana o adsorción por cambio de presión (PSA), optando finalmente por esta última.
- Quinta Etapa: separación de BTX. La corriente de fondo del equipo de flash de la tercera etapa, entra en un tren de destilaciones sucesivas donde el benceno, tolueno y xileno se separan secuencialmente considerando sus puntos de ebullición. Una alternativa es el uso de una destilación extractiva. Este proceso supone un mayor coste y rendimiento, por lo que se descarta.

Las diferentes alternativas posibles se muestran en la figura 9:

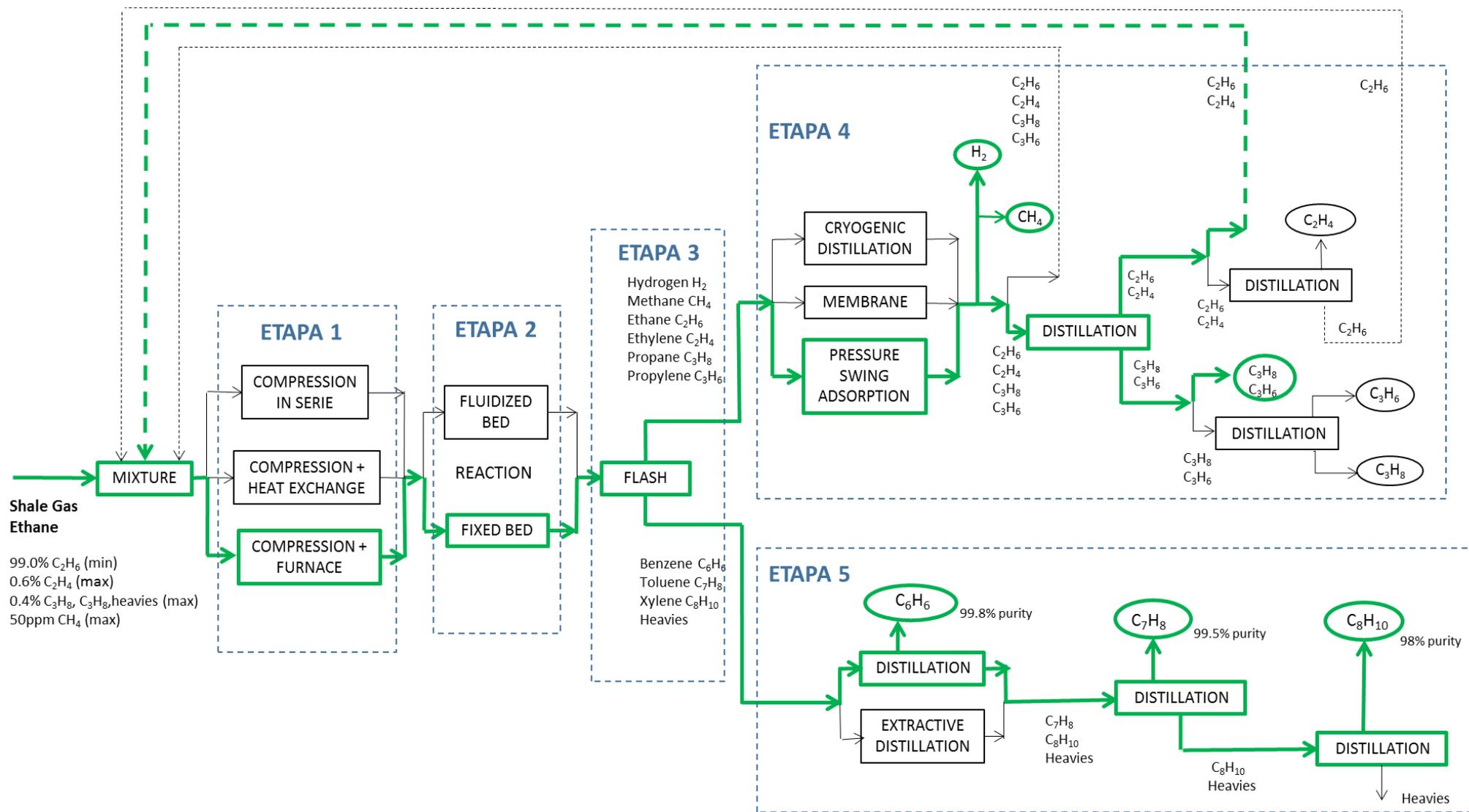


Figura 9. Diagrama de flujo de las diferentes alternativas de proceso de obtención de BTX a partir de etano de gas de esquisto.

## **2.3. SELECCIÓN DEL DIAGRAMA DE FLUJO PRELIMINAR.**

Una vez estudiadas las principales etapas y alternativas de la figura 9, se exponen las condiciones de operación de los equipos principales: reactor, columnas de destilación y PSA.

### **2.2.1. REACTOR.**

El reactor de lecho fijo se mantiene en unas condiciones de temperatura y presión de 973 K y 101.3 kPa respectivamente. El catalizador seleccionado es ZSM-5, una zeolita de aluminosilicatos, incorporada con 0.04% en peso de platino y 0.08% en peso de hierro. Esta configuración específica fue elegida porque conlleva una mayor conversión a aromáticos. La aromatización de etano se ve favorecida termodinámicamente por altas temperaturas y bajas presiones. Sin embargo, esto también causa la degeneración del catalizador, lo que conduce al bloqueo de los sitios activos (Anunziata et al., 1999).

### **2.2.2. COLUMNAS DE DESTILACIÓN.**

La corriente que contiene los alcanos inferiores y el H<sub>2</sub> se comprime de 101.3 kPa a 6400 kPa antes de ser alimentada a una columna de destilación que funciona a 6400 kPa y 298 K. Esta alta presión permite que la columna funcione a temperatura ambiente puesto que los puntos de ebullición de los alcanos inferiores a presión atmosférica son todos extremadamente bajos. Los principales productos de la corriente de destilado son H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>, mientras que los productos de fondo son compuestos C2-C3 que son recirculados al reactor.

La corriente de fondo de la primera columna de destilación consiste en benceno, tolueno, xilenos y compuestos aromáticos C9. La corriente líquida entra en la primera columna de destilación a 368 K y 101.3 KPa donde el benceno, (P.E. menor de 353 K) se separa por cabeza. Los aromáticos restantes entran en la segunda columna de destilación a 397 K y 101.3 kPa. El tolueno, con un punto de ebullición de 384 K se separa por la parte superior de la columna. La corriente final entra en la tercera columna 425 K y 101.3 kPa y los xilenos, con un punto de ebullición de 411-418 K, se

separan por cabeza, mientras que los compuestos aromáticos C9 salen por la parte inferior de la columna como un residuo.

### **2.2.3. ADSORCIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN (PSA).**

La separación de hidrógeno a partir de metano se consigue mediante un proceso PSA a 298 K y 1172 kPa. La corriente de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub> se hace pasar a través del lecho, que contiene una capa de carbón activo para la adsorción de CH<sub>4</sub>. La alta presión se utiliza para aumentar las fuerzas de adsorción entre el carbón activo y CH<sub>4</sub>. Por otro lado, la molécula de H<sub>2</sub>, una molécula altamente volátil sin polaridad, es prácticamente no adsorbible y será capaz de fluir fuera del lecho de adsorción.

En la figura 10 se muestra una propuesta de diagrama de flujo preliminar.

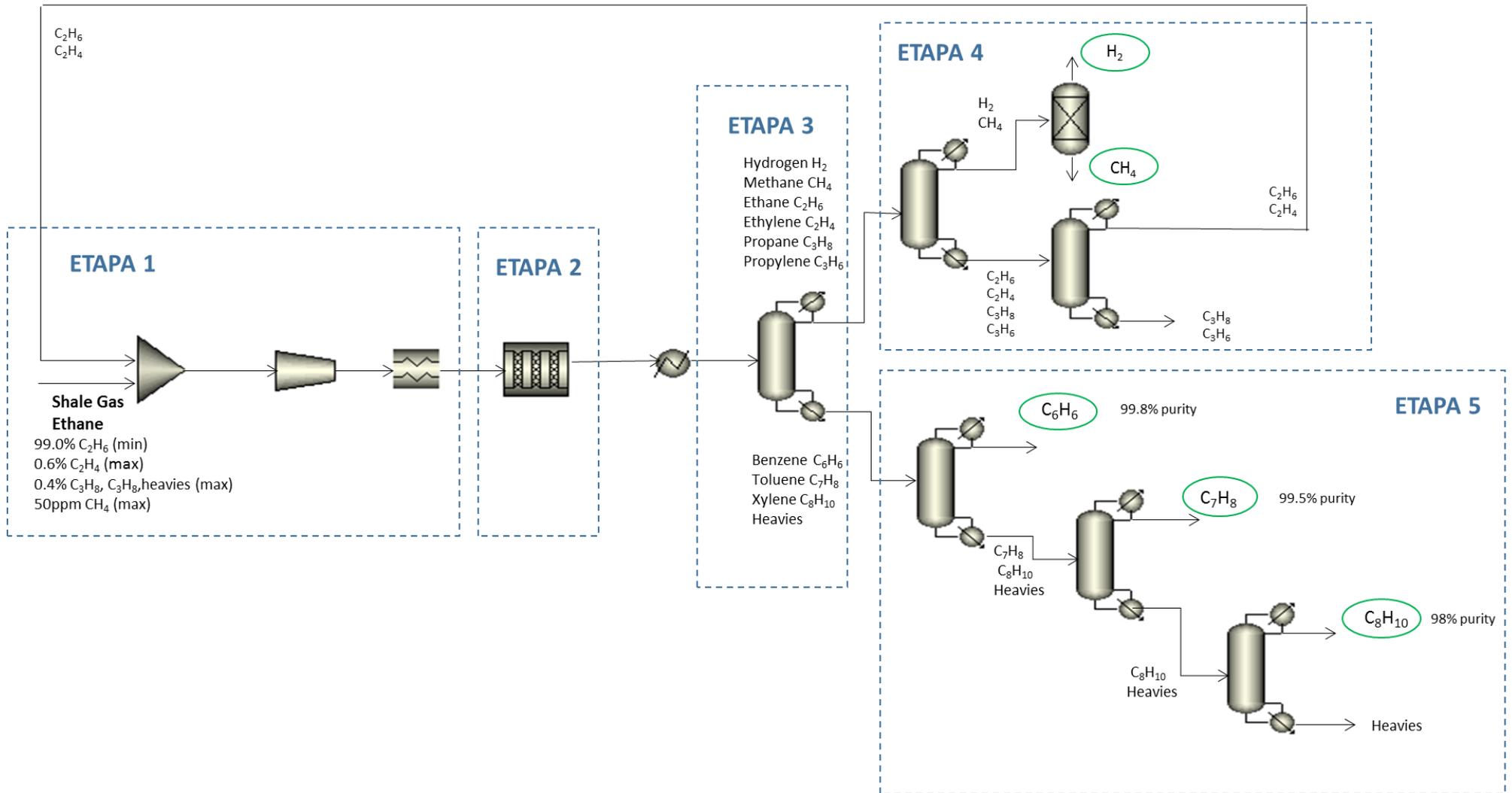


Figura 10. Diagrama de flujo seleccionado.

### **3. ANÁLISIS DEL PROCESO: BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA.**

El objetivo de los balances de materia y energía es determinar cinco propiedades características para cada flujo: temperatura, presión, composición, caudal total y la fracción de vapor.

#### **3.1. PRINCIPALES CONSIDERACIONES.**

Lo primero a tener en cuenta son los supuestos a utilizar para hacer los balances de materia y energía, los cuales se enumeran a continuación:

1. Se toman 100 g/mol/s de materia prima como base. Posteriormente se calcula el factor de aumento de escala.
2. Se considera estado estacionario por lo que las propiedades termofísicas permanecen constantes.
3. Las mezclas son ideales.
4. Los gases tienen un comportamiento ideal.
5. La presión se fija en un valor deseable y la temperatura se calcula con el punto de rocío y el punto de burbuja.
6. Se supone una caída de presión en cada equipo de 50 kPa.
7. La caída de presión en los intercambiadores de calor y en las tuberías es despreciable.
8. En columnas de destilación se supone que ningún componente más ligero que el componente clave ligero aparece en el producto de fondo. Asimismo, ningún componente más pesado que el componente clave pesado aparecerá en el destilado.
9. La relación de reflujo en la parte superior y en la parte inferior de la columna se suponen iguales.
10. Los mezcladores, turbinas y compresores tienen un comportamiento adiabático. Las bombas se suponen isotérmicas.
11. Para calcular las propiedades termofísicas de los compuestos pesados C9 se asume que son una mezcla de los isómeros trimetilbenceno, metiletilbenceno y propilbenceno.

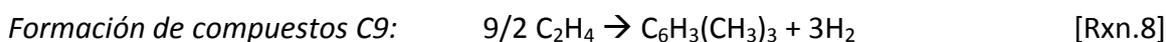
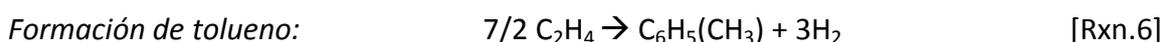
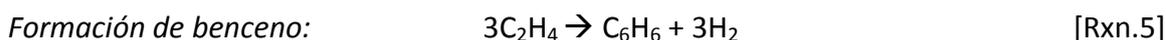
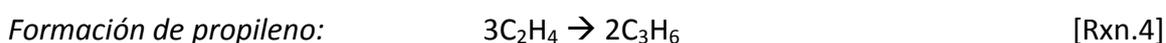
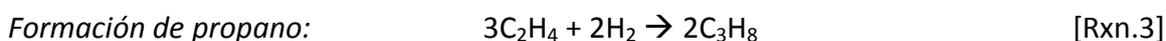
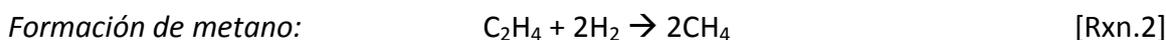
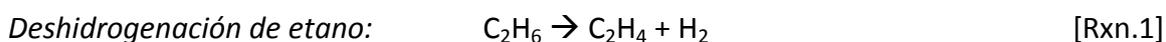
### 3.2. BALANCE DE MATERIA EN CADA UNIDAD.

Los siguientes apartados muestran los balances de masa realizados en las diferentes unidades, las suposiciones realizadas y los algoritmos de cálculo utilizados (Biegler et al., 1997).

#### 3.2.1 REACTOR

El reactor opera a 973K y 303.9 kPa, con un tiempo de contacto de  $W/F=20$  g·h/gmol. Como catalizador se usa la zeolita Mo-ZSM-11 (Anunziata et al., 1999). La transformación directa de etano a compuestos aromáticos es un proceso químico complejo. La aromatización de etano (Hagen et al., 2000) requiere un catalizador con sitios ácidos fuertes y alta estabilidad térmica. Estudios cinéticos (Keipert et al., 1995) han indicado que la deshidrogenación del etano para producir etileno es el primer paso en la producción de compuestos aromáticos. Las reacciones subsiguientes de etileno producen benceno, tolueno, xilenos, entre otros hidrocarburos.

Las principales reacciones que tienen lugar son:



Se ha realizado un algoritmo de cálculo para obtener el flujo de salida a partir de los rendimientos de las reacciones, el cual se muestra en la figura 11:

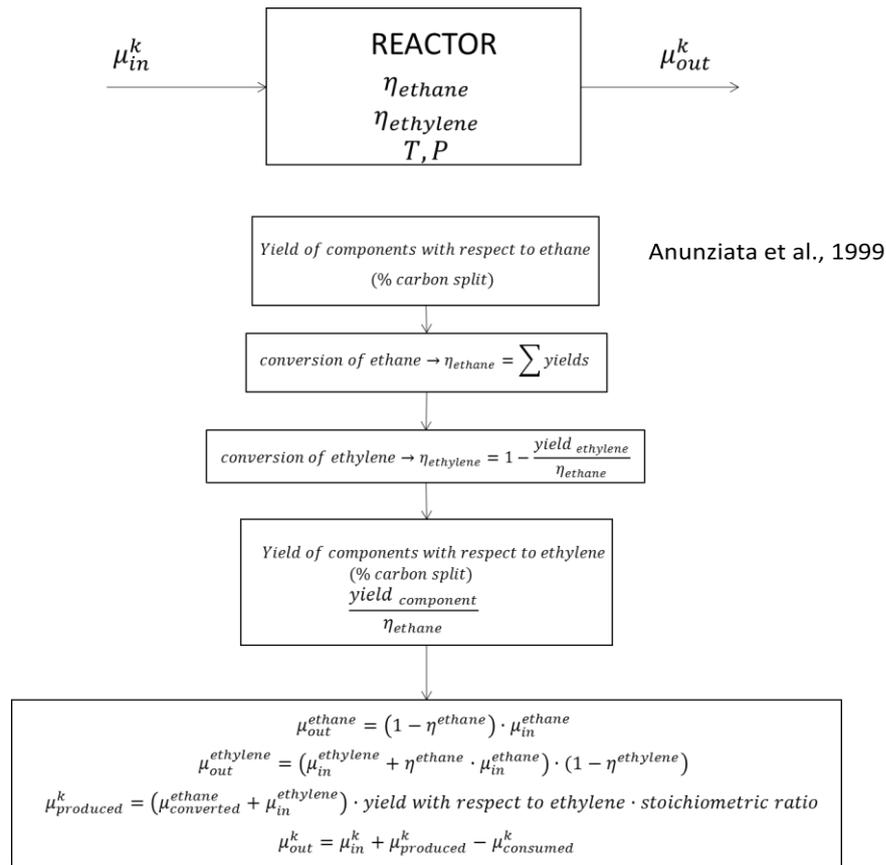


Figura 11. Algoritmo de cálculo para el reactor.

### 3.2.2 ADSORCIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN (PSA)

En el proceso seleccionado, el flujo de CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> pasa a través de un lecho relleno de adsorbente poroso, que es una estructura metalorgánica Mg<sub>2</sub> a 313 K y 16 atm (Zoey et al., 2012). Como el CH<sub>4</sub> es adsorbido en el lecho empaquetado, el H<sub>2</sub> purificado se recupera en la fase gas. El caudal del lecho empaquetado se detiene a continuación y la presión se reduce a 1 atm. Los gases adsorbidos se desorben desde el lecho de relleno y se eliminan, regenerando el adsorbente del lecho.

Dado que el proceso se asemeja a uno por lotes, en lugar de a uno en continuo, se utilizan dos lechos de relleno en paralelo. Esto permite que un lecho esté adsorbiendo CH<sub>4</sub> mientras que el otro se regenera. La representación de un PSA en un diagrama de flujo es compleja debido a que hay muchas válvulas y tuberías, por lo que se simplifica con un diagrama de caja.

PSA trabaja con una relación de adsorción absoluta  $\text{CH}_4/\text{H}_2$  de 7.5 y una pureza de la corriente de hidrógeno de 99%. Con esta información se realiza un balance de materia sobre el PSA. El algoritmo de cálculo a seguir se muestra en la figura 12:

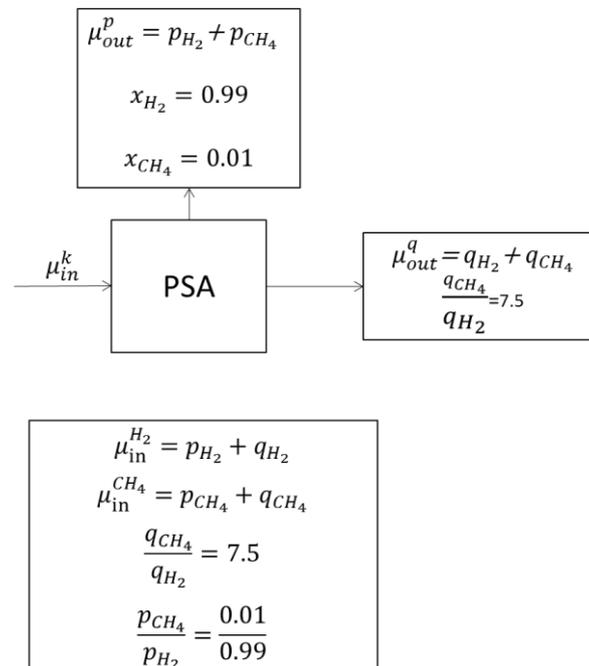


Figura 12. Algoritmo de cálculo para el PSA.

### 3.2.3. COLUMNAS DE DESTILACIÓN

Las operaciones de destilación son descritas como una cascada de platos de equilibrio cada una de las cuales se resuelve como una unidad flash. El cálculo detallado del comportamiento de la columna de destilación, plato por plato, no es considerado en esta etapa de diseño. En su lugar, se realiza una serie de aproximaciones utilizando el reflujo total con el fin de obtener modelos de distribución de masas lineales y parámetros de los equipos.

Para especificar una columna de destilación y obtener las tasas de separación de los componentes, en las ecuaciones lineales del balance de masa, se clasifican cinco tipos de componentes:

1. Componentes más ligeros que el clave ligero  $\rightarrow \xi_k = 1$ .
2. Componente clave ligero  $\rightarrow \xi_{lk}$  *fijado*.
3. Componentes distribuidos  $\rightarrow \xi_k$
4. Componente clave pesado  $\rightarrow \xi_{hk}$  *fijado*.
5. Componentes más pesados que el componente clave pesado  $\rightarrow \xi_k = 0$

Con el fin de resolver el balance de materia, debemos conocer las tasas de separación de los componentes distribuidos así como el número de platos y las temperaturas en la columna. Una vez elegidos los componentes clave ligero y pesado, se calcula el número mínimo de etapas ( $N_m$ ) con la ecuación de Fenske. Una vez que conocido  $N_m$ , se pueden obtener las tasas de separación de los componentes distribuidos sustituyendo  $lk$  por  $k$  en dicha ecuación. El análisis realizado se simplificará utilizando esta ecuación sólo con los componentes distribuidos. Posteriormente, se calcula la relación de reflujo. Además de especificar la recuperación de los componentes, es necesario establecer una presión adecuada (o una temperatura) para la parte superior de la columna. Para ello, se analiza las limitaciones de la columna, en este caso, la temperatura del agua de refrigeración ( $T_{cw}$ ) en el condensador y la temperatura de suministro de vapor ( $T_{st}$ ) en el calderín.

En la figura 13 se muestra una columna con un condensador y un rehervidor totales, con las temperaturas relevantes de la columna:

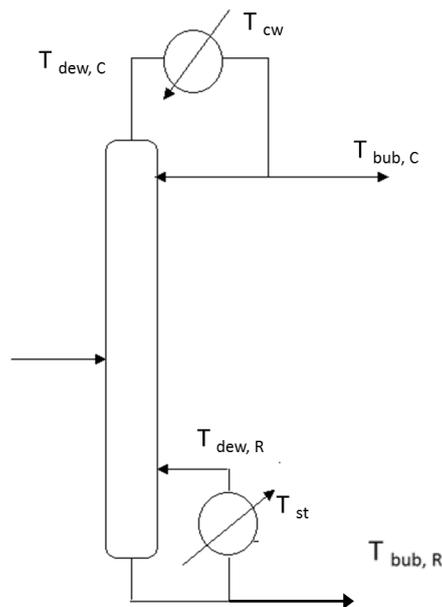


Figura 13. Temperaturas en una columna de destilación.

La presión de la columna es menor en la parte superior que en la inferior, y la concentración de los más volátiles es más alta en la parte superior, por lo tanto, se tiene la siguiente relación de temperaturas:

$$T_{cw} \leq T_{bub,C} \leq T_{dew,C} \leq T_{bub,R} \leq T_{dew,R} \leq T_{steam}$$

El agua de refrigeración será utilizada en las columnas de destilación 4, 5 y 6 donde  $T_{bub,C} \geq T_{cw}$ . Sin embargo, para las tres primeras destilaciones, donde los componentes (metano e hidrógeno) son no condensables se utilizará un condensador parcial.

El algoritmo de cálculo a seguir se muestra en la figura 14:

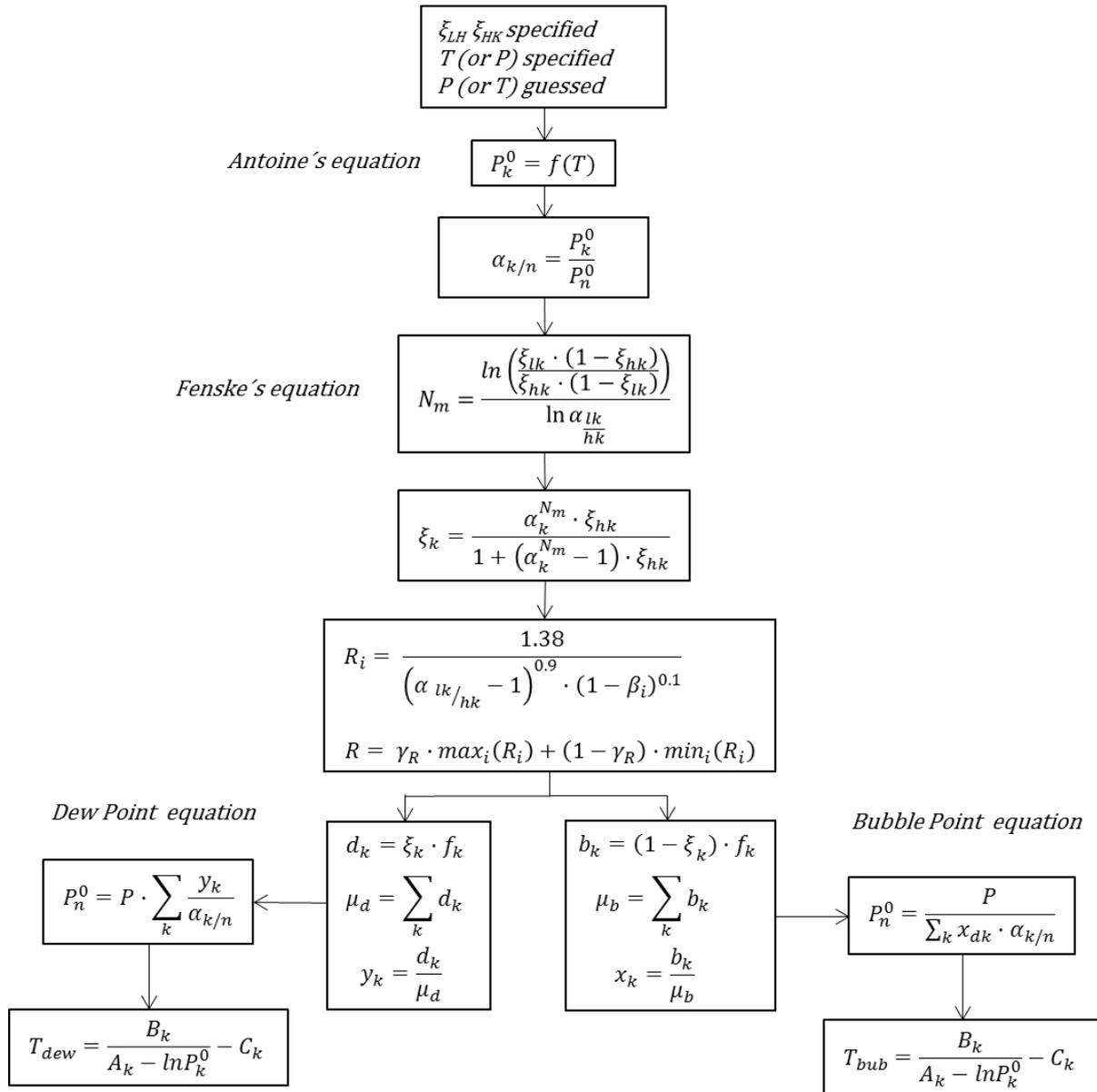


Figura 14. Algoritmo de cálculo de una columna de destilación.

### 3.3. BALANCE DE ENERGÍA EN CADA UNIDAD

Los siguientes apartados muestran los balances de energía realizadas en las diferentes unidades así como las suposiciones aplicadas para los cálculos.

#### 3.3.1. EQUIPOS DE INTERCAMBIO DE CALOR.

En el proceso seleccionado se ha asumido que todos los intercambiadores de calor serán ideales, de un solo paso y que trabajarán a contracorriente. El calor requerido por los intercambiadores de calor se determinará sin tener en cuenta la integración de calor. En el cálculo de la carga térmica, tiene que ser considerada la fase de la mezcla, la cual podría ser vapor puro, líquido puro o una mezcla de las dos fases.

Es necesario determinar el calor requerido y las entalpías de los distintos componentes en la corriente de vapor. Para ello se utilizan las constantes de capacidad calorífica de los diferentes componentes. Se aplican las ecuaciones eq.1 y eq.2 para determinar la carga de calor y las entalpías de cada componente en la corriente de vapor.

$$\Delta H_v^k = \int_{T_{in}}^{T_{out}} (A_{C_{pk}} + B_{C_{pk}} \cdot T + C_{C_{pk}} \cdot T^2 + D_{C_{pk}} \cdot T^3) \cdot dT \quad [eq. 1]$$

$$Q = \mu_{in} \cdot \sum_k y_k \cdot \Delta H_v^k \quad [eq. 2]$$

Para determinar el calor y las entalpías de cada componente en las corrientes líquidas se aplican las ecuaciones eq.3-eq.5. La correlación de Watson (eq.4) se ha utilizado para determinar el calor de vaporización de un líquido a una temperatura dada (Biegler et al., 1996):

$$\Delta H_L^k(T, x) = \sum_k x_k \cdot \left[ \Delta H_{f,k}^0(T_{in}) + \int_{T_{in}}^{T_{out}} C_{pk}^0 \cdot dT - \Delta H_{vap}^k(T) \right] \quad [eq. 3]$$

$$\Delta H_{vap}^k(T) = \Delta H_{vap}^k(T_b^k) \cdot \left( \frac{T_c^k - T_{bub}}{T_c^k - T_b^k} \right)^{0.38} \quad [eq. 4]$$

$$\Delta H_v^k(T_b^k) \rightarrow \text{tabulado}(\text{Reid et al., 1985})$$

$$Q = \mu_{in} \cdot [H_2(T_{out}, x) - H_1(T_{in}, x)] = \mu_{in} \cdot \sum_k x_k \cdot \Delta H_L^k \quad [eq. 5]$$

donde  $T_b^k$  es la temperatura de ebullición de cada componente k a 101.3 kPa,  $T_c^k$  es la temperatura crítica de cada componente k y  $\Delta H_{vap}^k(T_b^k)$  es el calor de vaporización a la temperatura normal de ebullición.

En el caso de un intercambiador con cambio de fase (enfriador), el cálculo se realiza en dos etapas. La temperatura de la corriente de entrada es de 973 K, lo que corresponde a un vapor de agua sobrecalentado. La primera etapa a determinar es enfriar el vapor sobrecalentado desde 973 K hasta la temperatura de rocío, en este caso  $T_{rocío}=329.78$  K. La segunda etapa consiste en condensar parcialmente la corriente de vapor a una fracción de vapor  $\phi = 0.95538$ . Este último paso debe ser modelado como un cálculo a un equipo flash. Para resolver este equipo, se propone seguir el algoritmo que se muestra en la figura 15:

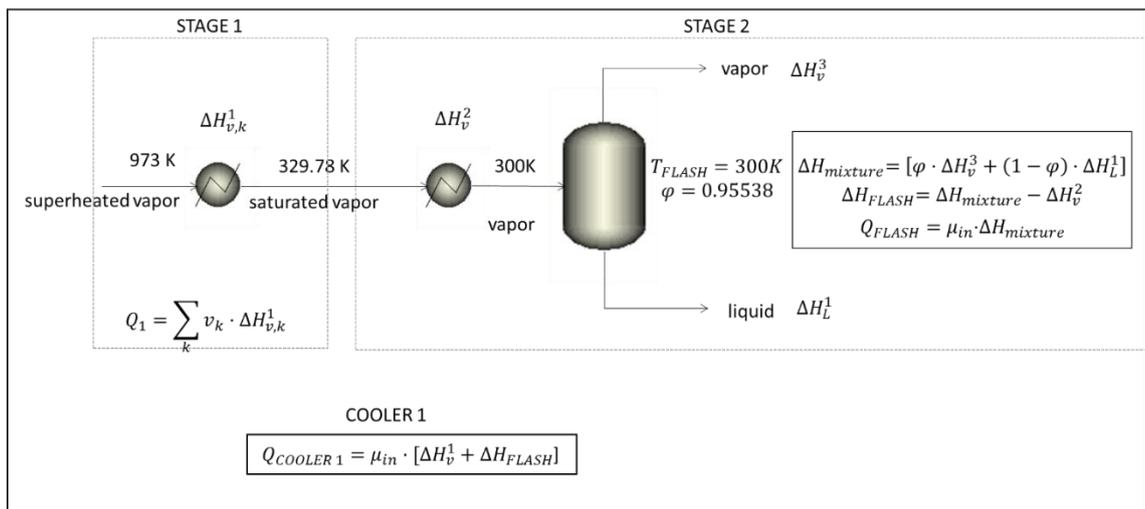


Figura 15. Algoritmo de cálculo del calor en un enfriador de una mezcla de dos fases.

### 3.3.2. HORNO Y REACTOR.

La temperatura requerida en el reactor es de 973 K. El vapor suministrado tiene una temperatura máxima de 523K, por lo que es necesaria la utilización de un horno para poder alcanzar dicha temperatura. Del mismo modo, hay que calcular el calor necesario en el reactor para mantener la temperatura de operación constante en 973 K, ya que las reacciones son endotérmicas. Se obtiene un valor del calor requerido para el horno y el reactor de 38.965 MW y 28.931 MW respectivamente.

### 3.3.3 COMPRESORES, BOMBAS Y VÁLVULAS.

Los **compresores** se utilizan en la entrada del proceso para conducir la corriente de gas a través de la planta y aumentar la presión de las corrientes de gas que entran a la segunda destilación. La compresión se ha supuesto ideal, isoentrópica y adiabática. Hay que tener en cuenta que la compresión isotérmica requiere la eliminación constante de calor para mantener el sistema en  $T_0$ . Si bien es físicamente poco realista, la compresión isotérmica es un caso límite de compresión por etapas, cuando el número de etapas tiende a infinito. En la compresión por etapas son necesarios enfriamientos intermedios, y por tanto se requiere la configuración mostrada en la figura 16.

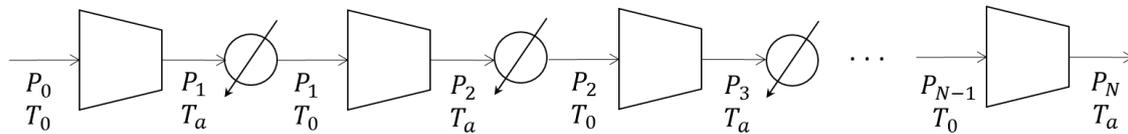


Figura 16. Secuencia de compresión con enfriamiento intermedio.

De acuerdo a las hipótesis aplicadas, el trabajo realizado por el compresor puede ser determinado por la siguiente ecuación (Biegler et al., 1997)

$$W_c = \frac{\mu_{in} \cdot N \cdot R \cdot T_0 \cdot \left(\frac{\gamma}{\gamma + 1}\right) \cdot \left[\left(\frac{P_N}{P_0}\right)^{\frac{\gamma-1}{N \cdot \gamma}} - 1\right]}{\eta_c \cdot \eta_m} \quad [eq. 6]$$

donde  $\mu_{in}$  y  $T_0$  son el caudal y la temperatura de la corriente gaseosa de entrada respectivamente, N es el número de etapas, R es la constante de los gases (8.314 J/mol·K),  $\gamma$  se supone 1.4 para una sistema ideal,  $(P_N/P_0)$  es la relación de compresión,  $\eta_m$  es la eficiencia del motor y toma un valor de 0.9 y  $\eta_c$  es la eficiencia del compresor que se supone 0.8.

Asumiendo un sistema ideal, isoentrópico y con expansión adiabática, se puede calcular la temperatura y la presión de cada compresor usando las siguientes relaciones:

$$T_{out} = T_0 \cdot \left(\frac{P_N}{P_0}\right)^{\frac{\gamma-1}{N \cdot \gamma}} \quad [eq. 7]$$

$$P_{out} = P_0 \cdot \left(\frac{P_N}{P_0}\right)^{\frac{1}{N}} \quad [eq. 8]$$

Utilizando la metodología anteriormente explicada, se obtiene un trabajo total para los compresores de 11.62 MW.

En el proceso seleccionado, se utiliza una **bomba** para aumentar la presión de la corriente líquida que sale de la columna de destilación 1. Se asume que tiene un comportamiento ideal y que la temperatura y el volumen específico de la corriente permanecen constantes. El trabajo realizado por la bomba puede ser calculado usando la siguiente ecuación:

$$W_b = \mu_{in} \cdot M \cdot \frac{P_{out} - P_{in}}{\rho \cdot \eta_b \cdot \eta_m} \quad [eq.9]$$

donde  $\eta_b$  y  $\eta_m$  son las eficiencias de la bomba y del motor, con un valor de 0.5 y 0.9 respectivamente.  $\mu_{in}$ , M and  $\rho$  son el flujo, el peso molecular y la densidad de la corriente de entrada (Biegler et al., 1997). Usando la ecuación 9 se obtiene que el trabajo necesario en la bomba es de 1.06 kW.

En el proceso, se utiliza así mismo una **válvula** para disminuir la presión de la corriente de reciclaje antes de entrar al horno. Se supone que la válvula opera ideal y adiabáticamente. El cambio de entalpía de la corriente tras pasar por la válvula se determina utilizando el diagrama de presión-entalpía siguiendo el modelo de la ecuación de estado de Peng-Robinson.

Por simplicidad a la hora de hacer los cálculos el diagrama de flujo se divide en 6 secciones correspondientes a las 5 etapas previamente descritas. Donde la sección I corresponde a las etapas 1 y 2, la sección II a la etapa 3, la etapa 4 se divide en dos secciones: la III y la IV, al igual que la etapa 5 que se divide en la sección V y VI.

Los resultados de la aplicación de los algoritmos de cálculo para el balance de materia y energía aplicados al diagrama de flujo final (Anexo 8.1) se muestran en los diagramas de flujo cuantitativos por secciones (Anexo 8.2)

## 4. DIMENSIONADO Y ESTIMACIÓN DE COSTES.

La última etapa en el diseño conceptual es determinar la viabilidad económica general del proceso. Para ello se estiman los costes de capital y fabricación así como los ingresos anuales de fabricación (Peters and Timmerhaus, 2002). Teniendo en cuenta los gastos en impuestos sobre las ventas, las tasas de interés e impuestos, se determinará el valor actual neto (VAN) del proceso. También se han calculado otros indicadores económicos como el tiempo de recuperación y el retorno de la inversión (ROI). Por último, se ha llevado a cabo un análisis de sensibilidad del VAN, variando parámetros clave, como el coste de materia prima y el precio de producto entre otros.

### 4.1. DIMENSIONADO Y COSTES DE EQUIPOS.

El tamaño y el coste de los equipos se ha estimado con los resultados de los balances de materia y energía. Para realizar el cálculo se han utilizado las metodologías proporcionadas por Biegler et al., 1997 y Guthrie (1969). Se muestra un ejemplo de cálculo de una columna de destilación en el Anexo 8.3. Los resultados del dimensionado y coste de todos los equipos se ha tabulado en el Anexo 8.4.

### 4.2. CAPITAL FIJO Y CAPITAL DE TRABAJO.

El capital fijo es la cantidad de dinero necesaria para construir totalmente una planta de proceso, con servicios auxiliares y ubicarla en situación de poder comenzar a producir. Una parte importante de este tipo de capital, es el coste total de los equipos, que se muestra en la tabla 3 y en la figura 17.

Tabla 3. Determinación del Capital de Proceso.

	Coste (€)
SISTEMA DE REFRIGERACIÓN	8.586E+07
COMPRESORES	1.854E+07
INTERCAMBIADORES DE CALOR	5.014E+06
COLUMNAS DE DESTILACIÓN	4.106E+06
TANQUES DE ALMACENAMIENTO	1.046E+06
REACTOR	7.126E+05
HORNO	3.911E+05
BOMBA+PSA+FLASH DRUMS	4.493E+05
<b>CAPITAL TOTAL DE PROCESO</b>	<b>1.161E+08</b>

## COSTE TOTAL DE LOS EQUIPOS

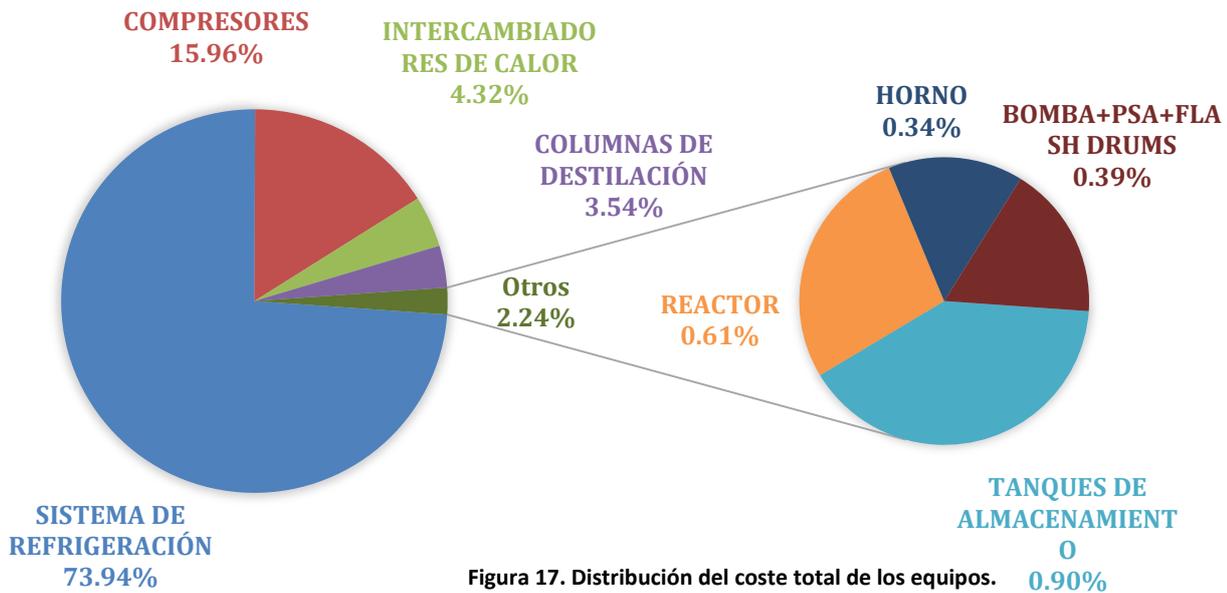


Figura 17. Distribución del coste total de los equipos.

Los costes fijos y de trabajo se detallan en la tabla 4:

**Tabla 4. Capital Fijo y Capital de Trabajo.**

COSTE DE EQUIPOS E INSTALACIÓN (€)	4.645E+08
CONTINGENCIA (€)	9.289E+07
CAPITAL DE FABRICACIÓN (€)	5.573E+08
CAPITAL DE NO FABRICACIÓN (€)	1.858E+08
<b>CAPITAL FIJO (€)</b>	<b>7.431E+08</b>
COSTE DE INVENTARIO ( €/año)	8.217E+05
Capital de fabricación anualizado (€/año)	3.716E+07
<b>CAPITAL DE TRABAJO (€/año)</b>	<b>4.727E+07</b>

### 4.3. COSTES DE FABRICACIÓN.

Los costes de fabricación son los gastos directamente relacionados con la operación de fabricación. Estos gastos se dividen en:

- Costes de producción directa: materias primas, mano de obra, electricidad, agua de refrigeración...
- Gastos fijos: son gastos que se mantienen prácticamente constantes de un año a otro, y no varían con los cambios en la tasa de producción. Depreciación, seguros...

Tabla 5. Costes de Fabricación.

Coste Total de Fabricación	(€/año)
Materias Primas	5.357E+07
Servicios: electricidad y agua de refrigeración	2.159E+07
Mano de Obra	5.078E+07
Coste de Mantenimiento	5.078E+07
Coste de Suministro	1.693E+07
Impuestos, seguros	2.539E+07
<b>Coste Total de Fabricación</b>	<b>1.784E+08</b>

La distribución detallada de los costes de fabricación se muestra en la Figura 18:



Figura 18. Distribución detallada de los Costes de Fabricación.

Se observa que la principal contribución a los costes de fabricación es el coste de materias primas (31%) y de mantenimiento (29%); el segundo bloque de costes está formado por los costes de impuestos, seguros, servicios y suministros, con valores entre el 10 y el 15%. Finalmente se observa, que la mano de obra solo supone un 2% de los costes.

#### 4.4. ESTIMACIÓN DE BENEFICIOS.

En el proceso de producción de BTX, también se generan otros productos útiles tales como el metano y el hidrógeno. Dado que estos productos tienen una pureza elevada se pueden vender en el mercado libre. La tabla 6 resume las diversas fuentes de ingresos, mientras que la figura 19 muestra la contribución a los beneficios de la venta de cada producto.

**Tabla 6. Determinación del Beneficio Bruto**

PRODUCTOS	Cantidad (Ton/año)	Precio(€/Ton)	Beneficio (€/año)
<b>BENCENO</b>	1.627E+05	1.037E+03	1.688E+08
<b>TOLUENO</b>	5.284E+04	8.702E+02	4.598E+07
<b>XILENO</b>	1.184E+04	9.334E+02	1.105E+07
<b>HIDRÓGENO</b>	2.749E+04	3.951E+03	1.086E+08
PRODUCTO	(MJ/año)	Precio (€/J)	Beneficio (€/año)
<b>METANO</b>	7.30E+09	2.45E-09	1.641E+07
<b>Beneficio Bruto (€/año)</b>			<b>3.508E+08</b>

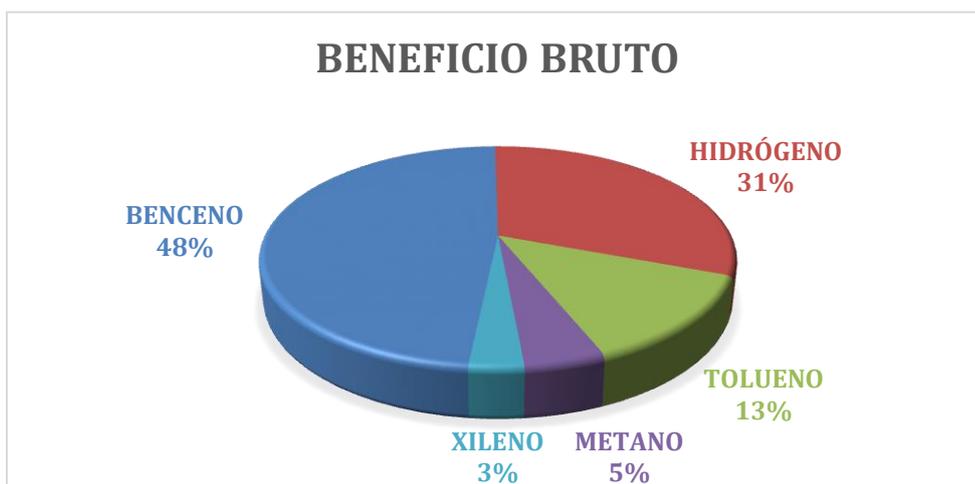


Figura 19. Distribución de los ingresos por ventas de cada producto.

La Tabla 7 recoge los resultados del cálculo de los beneficios netos:

Tabla 7. Resumen de la determinación de los Beneficios.

BENEFICIOS	(€/año)
Ingresos	3.508E+08
Royalties = 0.015·Ingresos	- 5.263E+06
Costes de Fabricación	- 1.566E+08
<b>Beneficio Bruto</b>	<b>1.889E+08</b>
Impuestos =0.1·Ingresos	- 3.508E+07
<b>Beneficio Neto antes de las Tasas</b>	<b>1.538E+08</b>
Tasas = 0.35· Beneficio Neto Antes de las Tasas	- 5.385E+07
<b>BENEFICIO NETO DESPUÉS DE LAS TASAS</b>	<b>1.000E+08</b>

#### 4.5. INDICADORES ECONÓMICOS.

También se realiza una estimación de los beneficios después de tener en cuenta los impuestos, para poder así calcular el retorno de la inversión y el tiempo de recuperación. En la tabla 8 se muestran los principales indicadores económicos.

Tabla 8. Principales Indicadores Económicos.

INDICADOR ECONÓMICO	VALOR
Retorno de la Inversión: ROI (%)	12.5
Tiempo de Recuperación de la Inversión(años)	3.886
Valor Actual Neto: VAN ( €)	-4.88E+09
Tasa Interna de Retorno: TIR (%)	0.485

Se observa que el ROI tiene un valor positivo y que la inversión se recuperaría en un periodo de 4 años, por lo que en un primer análisis el proceso resulta rentable. Sin embargo, debemos tener en cuenta que estos indicadores no tienen en cuenta el valor del dinero, por lo que se calcula el Valor Actual Neto y la Tasa Interna de Retorno. El VAN tiene un valor negativo, lo que indica que el proceso no es rentable.

#### 4.6. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD.

Al realizar los cálculos de los indicadores económicos, se observa que el VAN da un valor negativo. Esto quiere decir que no se va a poder recuperar la inversión y por tanto el proyecto no es rentable. Con el objetivo de conseguir un proyecto viable, se realiza un análisis de sensibilidad para poder determinar los valores de coste de materia prima, precio de venta del benceno, coste de electricidad, etc. que hacen que el VAN=0. Los valores óptimos de las variables a estudio se muestran en la tabla 9:

Tabla 9. Resultados del Análisis de Sensibilidad.

Variable	Valor utilizado	Valor que hace VAN=0
Coste de Etano (€/m <sup>3</sup> )	55.46	50
Precio de Benceno (€/Ton)	1181	1250
Precio de Electricidad (€/kwh)	0.05	0.02
Impuestos (t) (%)	35	28.6
Tasa de descuento (i) (%)	13.5	48.5

## 5. GUIAS DEL PROFESOR.

Este trabajo es una guía para que este proceso sea desarrollado en la asignatura de Diseño de Procesos Químicos; por ello es importante realizar una serie de líneas maestras para que el responsable de impartir dicha asignatura, sea capaz de transmitir a los alumnos de forma eficiente y ordenada los objetivos, el alcance y la metodología del proyecto.

En primer lugar hay que realizar una búsqueda bibliográfica sobre la técnica de fractura hidráulica, para ponerse en antecedentes de la posibilidad y viabilidad de diseñar un proceso que depende directamente de esta técnica de extracción de gas. Uno de los más útiles es la página de Administración de Información de Energía (EIA) del Gobierno de Estados Unidos.

La búsqueda de precios de las materias primas y los productos ha sido uno de los principales problemas respecto a la búsqueda de información. Los precios del benceno, tolueno y xileno se han encontrado en la siguiente página web: <http://www.platts.com>. Otro de los problemas encontrados, ha sido la síntesis de procesos para hacer el estudio de las diferentes alternativas de proceso.

Para resolver el balance de masa y calor se recomienda seguir el libro Biegler et al., 1997, disponible para los alumnos en la biblioteca de la Universidad de Cantabria.

Por otro lado, es necesaria la búsqueda de las propiedades físicas de los compuestos, las cuales se pueden encontrar en Reid et al., 1988. La resolución del balance de masa es engorroso y laborioso, pero sin gran dificultad. Para resolver estos cálculos, es necesario conocer las ecuaciones para cada equipo. El principal problema en la resolución del balance de materia aparece en la corriente de recirculación. Lo más sencillo es establecer la corriente de recirculación como si fuese otra corriente de alimentación al mezclador.

Para la realización del dimensionado de equipos y la estimación de los costes se recomienda la utilización del libro Biegler et al., 1997, citado anteriormente. En dicho texto se explica el método de Guthrie, y se muestran las tablas necesarias para su resolución. Así como las ecuaciones para la estimación de costes.

## 6. CONCLUSIONES.

- La síntesis de procesos de obtención de BTX a partir de etano de esquisto muestra múltiples alternativas de proceso, que contemplan diversas operaciones y reacciones. El mayor número de alternativas está relacionado con la recirculación de alcanos al reactor. La selección del diagrama de flujo se basa en datos previos bibliográficos.
- Usando una base de 100 gmol/s de alimentación de gas etano de esquisto, se obtienen los resultados de pureza y flujo mostrados en la Tabla 10. Así mismo se muestra en la tabla las necesidades energéticas requeridas por el proceso. Los balances de masa y energía de nuestro proceso propuesto sugieren que la producción de compuestos aromáticos a partir de etano gas de esquisto es viable.

Tabla 10. Resumen de los resultados finales.

	<b>% PUREZA OBTENIDA</b>	<b>% PUREZA REQUERIDA</b>	<b>Cantidad Producida (Ton/año)</b>
<b>BENCENO</b>	99.97	99.8	31594.14
<b>TOLUENO</b>	99.62	99.5	10258.75
<b>XILENO</b>	99.38	98	2298.5
<b>METANO</b>	88.24	80	42379.8
<b>HIDRÓGENO</b>	99	99	3162.7
<b>Gas etano de partida (gmol/s)</b>			100
<b>Factor de escala de la planta</b>			5.14
<b>Calor necesario (kW)</b>			19824
<b>Enfriamiento necesario (kW)</b>			16111.25
<b>Consumo de energía (kW)</b>			2259
<b>Calor total requerido (kW)</b>			3712.75

- La evaluación económica del proceso da lugar a un valor del Valor Actual Neto negativo. Una posible alternativa para disminuir los costes y conseguir que el VAN de un valor positivo, puede ser realizar una integración de calor.
- Se ha realizado un análisis de sensibilidad (del indicador económico VAN) con el objetivo de mostrar los valores que diferentes parámetros deben tener con el objetivo de hacer que nuestra planta sea rentable.

- Uno de los objetivos de este Trabajo Fin de Grado, es que sirva para que los alumnos de tercero de Grado de Ingeniería Química realicen el diseño conceptual en la asignatura de Diseño de Procesos Químicos. Aunque en este informe se muestra el diseño de una manera resumida y simplificada, ha resultado laborioso y en ocasiones el nivel de dificultad ha sido elevado. Por lo tanto, creo que aunque los alumnos vayan a encontrar cierto nivel de dificultad, si realizan la síntesis del proceso de manera correcta, son ordenados y rigurosos con el balance de materia, pueden llegar a obtener buenos resultados.
- Como trabajo posterior se sugiere el modelado del proceso en el simulador Aspen. Así como la integración de calor, para poder hacer una comparativa de los resultados obtenidos y analizar la rentabilidad del proceso.

## 7. REFERENCIAS

ANUNZIATA, O.A.; EIMER, G.A.; PIERELLA, L.B. 1999. Ethane conversion into aromatic hydrocarbons over molybdenum-containing MEL zeolites. *Applied Catalysis A: General* [online]. 182(2), pp. 267-274. Disponible en:

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0926860X99000204>

BIEGLER, L.T.; GROSSMANN, I.E.; WESTERBERG, A.W. 1997. *Systematic Methods of Chemical Process Design*. New Jersey: Pearson Education. ISBN: 0-13-492422-3.

EIA: ENERGY INFORMATION ADMINISTRATION. 2011. *World Shale Gas Resources: An Initial Assessment of 14 Regions Outside the United States* [online]. Washington, D.C. Disponible en:

<http://www.eia.gov/analysis/studies/worldshalegas/pdf/fullreport.pdf>

HAGEN, A.; ROESSNER F. 2000. Ethane to aromatic hydrocarbon: past, present, future. *Catalysis Reviews: Science and Engineering* [online], 42(4), pp. 403-437. Disponible en:

<http://dx.doi.org/10.1081/CR-100101952>

KEIPERT, O.P.; WOLF, D.; SCHULTZ, P. 1995. Kinetics of ethane aromatization over a gallium-dropped H-ZSM-5 catalyst. *Applied Catalysis A: General* [online]. 133, pp.347-365. Disponible en:

[http://dx.doi.org/10.1016/0926-860X\(95\)00148-4](http://dx.doi.org/10.1016/0926-860X(95)00148-4)

KIRK-OTHMER, *Encyclopedia of Chemical Technology* [online]. 1999-2014 by John Wiley and Sons, Inc. Online ISBN: 9780471238966. Disponible en:

<http://onlinelibrary.wiley.com/mrw/advanced/search?doi=10.1002/0471238961>

MARTIN M.; GROSSMAN I.E.; SIROLA J. 2013. *Conceptual Design of an Aromatics Plant from Shale Gas*. Carnegie Mellon University. CACHE Process Design Case Studies.

MATAR, S.; HATCH L.F. 2000 *Chemistry of Petrochemical processes* [online]. 2<sup>nd</sup> Edition. Houston. Gulf publishing company. ISBN: 978-0-88145-315-3. Disponible en:

<http://www.sciencedirect.com/science/book/9780884153153>

MELIKOGLU, M. (2014) Shale gas: Analysis of its role in the global energy market. *Renewable and sustainable energy reviews* [online], 37, pp. 460-468. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2014.05.002>

PBF Energy Industry, 2012. *Annual Report*. Delaware, 2012. Disponible en: <http://www.sec.gov/Archives/edgar/data/1534504/000119312513084119/d482186d10k.htm>

PETERS M.S.; TIMMERHAUS K.D., (2002). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. 5th Edition, McGraw-Hill, 2002. ISBN: 0-07-100871-3.

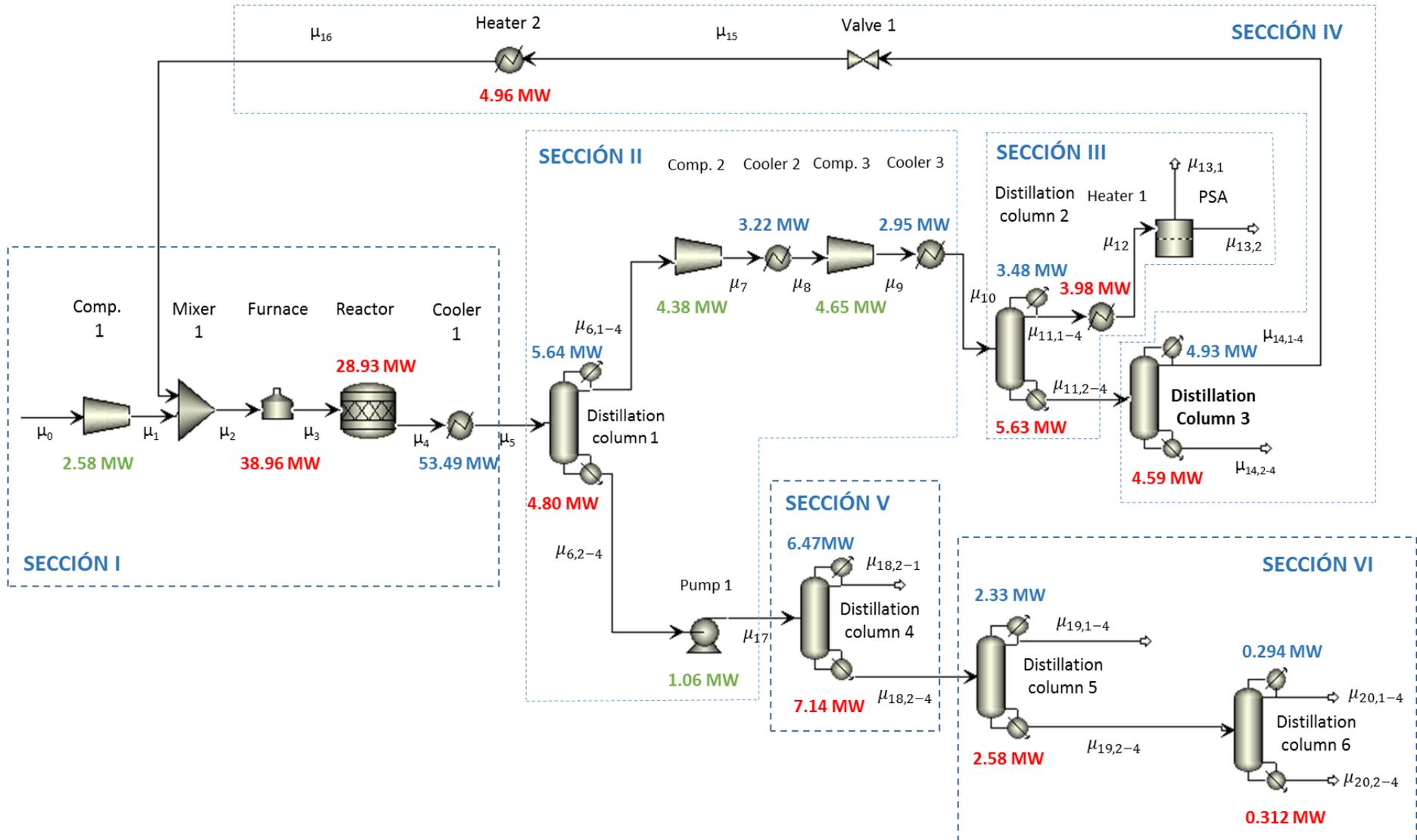
PLANT PROCESS EQUIPMENT, INC. 2013. *Gas Processing* [web site]. Texas. Available in: [http://www.plant-process.com/gas\\_processing/default.html](http://www.plant-process.com/gas_processing/default.html)

WANG, Q.; CHEN, X.; JHA, A.N., (2013). Natural gas from shale formation: The evolution, evidences and challenges of shale gas revolution in United States. *Renewable and sustainable energy reviews* [online], 30, pp. 1-28. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2013.08.065>

ZOEY R. H.; RAJAMANI K.; JEFFREY R. L. (2012). CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>, CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>, and CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> separations at high pressures using Mg<sub>2</sub> (dobdc). *Microporous and Mesoporous Materials* 151, 481-487. Disponible en: <http://alchemy.cchem.berkeley.edu/jeff/paper146.pdf>

## 8. ANEXOS

### 8.1. DIAGRAMA DE FLUJO FINAL.



## 8.2. TABLAS DE CORRIENTES POR SECCIONES.

### I. Proceso de Aromatización.

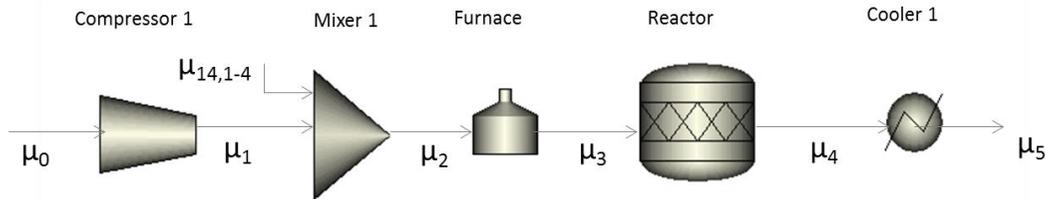


Tabla 11. Requerimientos de energía I.

UNIDADES I	ENERGÍA (kW)
COMPRESOR 1	2583.38
HORNO	38965.57
ENFRIADOR 1	-53497.48
REACTOR	28931.44

Tabla 12. Tabla de corrientes del proceso de aromatización.

Corrientes	$\mu_0$	$\mu_1$	$\mu_{14,1-4}$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$\mu_5$
T (K)	289.00	413.36	413.40	413.38	973.00	973.00	300.00
P (kPa)	101.3	354.5	354.5	354.50	303.85	253.2	202.6
Flujo Total (gmol/s)	514	514	224.772	738.77	738.77	1149.08	1149.08
Fracción de Vapor	1	1	1	1	1	1	0.95538
Componentes							
Metano	0	0	0.0012	0.0004	0.0004	0.2386	0.2386
Etano	0.99	0.99	0.6061	0.8732	0.8732	0.1179	0.1179
Etileno	0.006	0.006	0.3926	0.1236	0.1236	0.0894	0.0894
Propano	0.004	0.004	1.29E-05	0.0028	0.0028	0.0194	0.0194
Propileno	0	0	4.52E-05	1.37E-05	1.37E-05	0.0088	0.0088
Benceno	0	0	0	0	0	0.0618	0.0618
Tolueno	0	0	0	0	0	0.0170	0.0170
p-Xileno	0	0	0	0	0	0.0033	0.0033
C9	0	0	0	0	0	0.0037	0.0037
Hidrógeno	0	0	4.32E-08	1.31E-08	1.31E-08	0.4401	0.4401

## II. Separación de C1-C3 y H2 de los compuestos aromáticos.

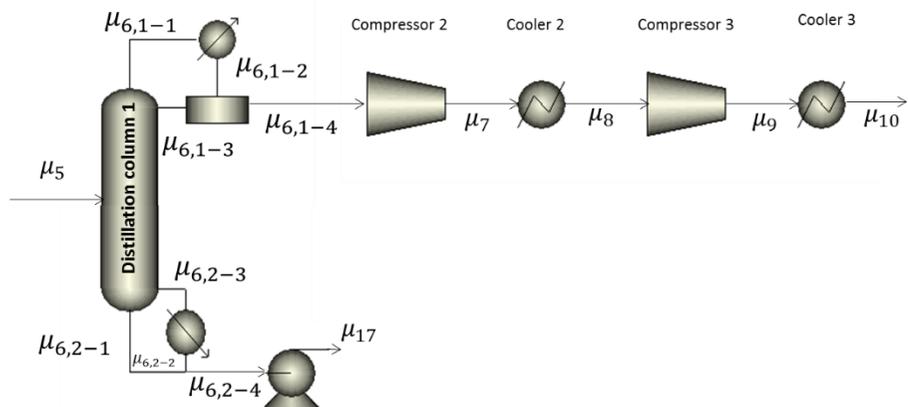


Tabla 13. Requerimientos de energía II.

UNIDADES II	ENERGÍA (kW)
COMPRESOR 2	4377.43
COMPRESOR 3	4651.48
ENFRIADOR 2	-3219.06
ENFRIADOR 3	-2953.70
BOMBA 1	1.06
CONDENSADOR PARCIAL 1	-5635.98
REHERVIDOR 1	4803.82

Tabla 14. Tabla de corrientes de la separación de H2/C1-C3 de los compuestos aromáticos.

Corrientes	$\mu_{6,1-1}$	$\mu_{6,1-2}$	$\mu_{6,1-3}$	$\mu_{6,1-4}$	$\mu_{6,2-1}$	$\mu_{6,2-2}$	$\mu_{6,2-3}$	$\mu_{6,2-4}$	$\mu_7$	$\mu_8$	$\mu_9$	$\mu_{10}$	$\mu_{17}$
T (K)	297.50	191.96	191.96	191.96	385.42	385.42	401.28	385.42	295.07	204.10	313.66	233.20	385.42
P (kPa)	151.9	151.9	101.3	101.3	202.6	202.6	202.6	202.6	455.9	405.25	1823.4	1772.75	253.20
Flujo Total (gmol/s)	1260.59	1260.59	210.10	1050.49	261.37	162.78	162.78	98.59	1050.49	1050.49	1050.49	1050.49	98.59
Fracción de Vapor	1	0.833	0	1	0	0	1	0	1	1	1	1	0
Componentes													
Metano	0.2187	0.2187	0.0094	0.2610	0	0	0	10	0.2610	0.2610	0.2610	0.2610	0
Etano	0.1292	0.1292	0.1317	0.1290	0	0	0	0	0.1290	0.1290	0.1290	0.1290	0
Etileno	0.0890	0.0890	0.0462	0.0978	0	0	0	0	0.0978	0.0978	0.0978	0.0978	0
Propano	0.0625	0.0625	0.2691	0.0213	2.27E-05	2.27E-05	2.27E-05	2.27E-05	0.0213	0.0213	0.0213	0.0213	2.27E-05
Propileno	0.0231	0.0231	0.0905	0.0097	4.28E-06	4.28E-06	4.28E-06	4.28E-06	0.0097	0.0097	0.0097	0.0097	4.28E-06
Benceno	0.0753	0.0753	0.4527	6.76E-06	0.7201	0.7201	0.7201	0.7201	6.76E-06	6.76E-06	6.76E-06	6.76E-06	0.7201
Tolueno	0.0015	0.0015	0.0088	0	0.1984	0.1984	0.1984	0.1984	0	0	0	0	0.1984
p-Xileno	0	0	0	0	0.0386	0.0386	0.0386	0.0386	0	0	0	0	0.0386
C9	0	0	0	0	0.0429	0.0429	0.0429	0.0429	0	0	0	0	0.0429
Hidrógeno	0.4007	0.4007	0.0015	0.4814	0	0	0	0	0.4814	0.4814	0.4814	0.4814	0

### III. Separación de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub> de C<sub>2</sub>-C<sub>3</sub>. Separación de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub> via PSA

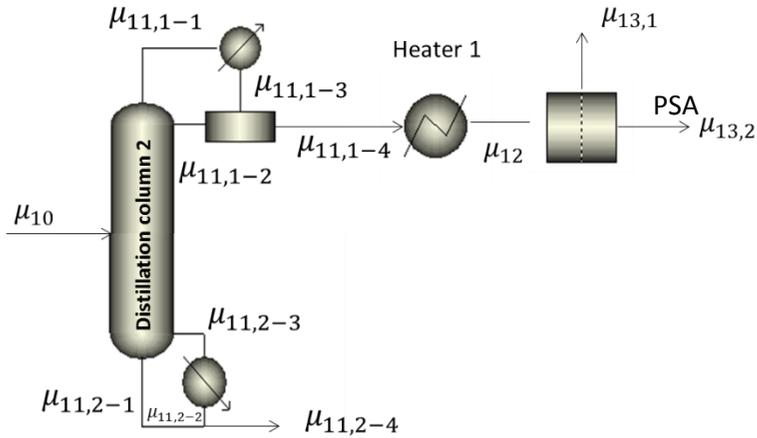


Tabla 15. Requerimientos de energía III.

UNIDADES III	ENERGÍA (kW)
CALENTADOR 1	3983.57
CONDENSADOR PARCIAL 2	-3479.88
REHEVIDOR 2	5625.69

Tabla 16. Separación de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub> de C<sub>2</sub>-C<sub>3</sub>.

Corrientes	$\mu_{11,1-1}$	$\mu_{11,1-2}$	$\mu_{11,1-3}$	$\mu_{11,1-4}$	$\mu_{11,2-1}$	$\mu_{11,2-2}$	$\mu_{11,2-3}$	$\mu_{11,2-4}$	$\mu_{11,2-4}$	$\mu_{12}$	$\mu_{13,1}$	$\mu_{13,2}$
T (K)	152.90	139.80	139.80	139.80	255.96	255.96	272.81	255.96	255.96	313.00	313.00	313.00
P (kPa)	1722.1	1722.1	1671.5	1671.45	1772.75	1772.75	1772.75	1772.75	1772.75	1620.8	1570.15	101.3
Flujo Total (gmol/s)	1300.3	1300.3	520.48	779.81	940.97	670.29	670.29	270.68	270.68	779.81	467.95	311.12
Fracción de Vapor	1.0	0.600	0	1	0	0	1	0	0	1	1	1
Componentes	0											
Metano	0.5975	0.5975	0.9660	0.3515	1.01E-04	1.01E-04	1.01E-04	1.01E-04	1.01E-04	0.3515	0.01	0.8824
Etano	1.14E-05	1.14E-05	2.84E-05	0	0.5005	0.5005	0.5005	0.5041	0.5005	0	0	0
Etileno	7.92E-04	7.92E-04	0.0020	1.32E-05	0.3794	0.3794	0.3794	0.3719	0.3794	1.32E-05	0	0
Propano	0	0	0	0	0.0825	0.0825	0.0825	0.0846	0.0825	0	0	0
Propileno	0	0	0	0	0.0375	0.0375	0.0375	0.0383	0.0375	0	0	0
Benceno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Tolueno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
p-Xileno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Hidrógeno	0.4017	0.4017	0.0318	0.6485	0	0	0	0	0	0.6485	0.99	0.1176

#### IV. Separación de C2 y C3.

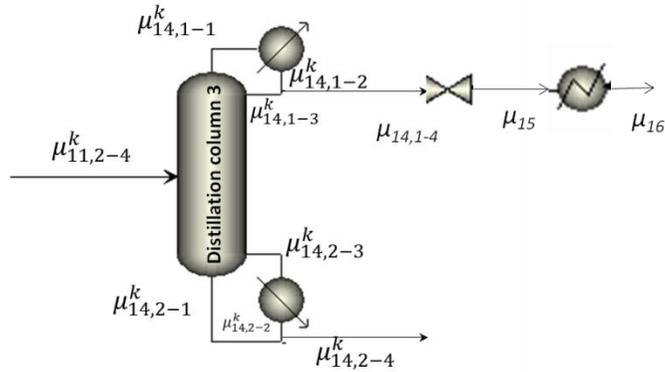


Tabla 17. Requerimientos de Energía IV.

UNIDADES IV	ENERGÍA (kW)
CONDENSADOR PARCIAL 3	-4928.56
REHERVIDOR 3	4588.29
CALENTADOR 2	4962.88

Tabla 18. Tabla de corrientes de la separación de C2 y C3.

Corrientes	$\mu_{14,1-1}$	$\mu_{14,1-2}$	$\mu_{14,1-3}$	$\mu_{14,1-4}$	$\mu_{14,2-1}$	$\mu_{14,2-2}$	$\mu_{14,2-3}$	$\mu_{14,2-4}$	$\mu_{15}$	$\mu_{16}$
T (K)	254.69	253.42	253.42	253.42	322.87	322.87	323.71	322.87	205.00	413.40
P (kPa)	1722.1	1722.1	1672.1	1672.10	1772.75	1772.75	1772.75	1772.75	405.10	354.45
Flujo Total (gmol/s)	507.16	507.16	268.99	238.17	412.56	380.05	380.05	32.51	238.17	238.17
Fracción de Vapor	1	0.470	0	0	0	0	1	0	0.2667	1
Componentes										
Metano	6.14E-05	6.14E-05	1.39E-05	1.15E-04	0	0	0	0	1.15E-04	1.15E-04
Etano	0.6355	0.6355	0.6932	0.5687	0.0004	0.0004	0.0004	0.0004	0.5687	0.5687
Etileno	0.3644	0.3644	0.3047	0.4311	0	0	0	0	0.4311	0.4311
Propano	2.48E-06	2.48E-06	4.14E-06	0	0.6871	0.6871	0.6871	0.6871	0	0
Propileno	1.46E-05	1.46E-05	2.37E-05	4.26E-06	0.3122	0.3122	0.3122	0.3122	4.26E-06	4.26E-06
Benceno	0	0	0	0	2.18E-04	2.18E-04	2.18E-04	2.18E-04	0	0
Tolueno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
p-Xileno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Hidrógeno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

V. Separación de benceno de C<sub>7</sub>-C<sub>9</sub>.

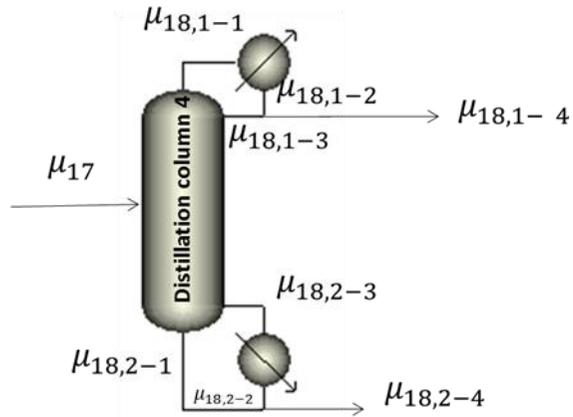


Tabla 19. Requerimientos de energía V.

UNIDADES V	ENERGÍA (kW)
CONDENSADOR 1	-6472.18
REHERVIDOR 4	7138.42

Tabla 20. Separación de benceno.

Corrientes	μ <sub>18,1-1</sub>	μ <sub>18,1-2</sub>	μ <sub>18,1-3</sub>	μ <sub>18,1-4</sub>	μ <sub>18,2-1</sub>	μ <sub>18,2-2</sub>	μ <sub>18,2-3</sub>	μ <sub>18,2-4</sub>
T (K)	377.57	377.53	377.53	377.53	428.23	428.23	438.55	428.23
P (kPa)	202.6	202.6	202.6	202.55	253.20	253.20	253.20	253.20
Flujo Total (gmol/s)	221.42	221.42	150.47	70.94	249.06	221.42	221.42	27.64
Fracción de Vapor	1	0	0	0	0	0	1	0
Componentes								
Metano	0	0	0	0	0	0	0	0
Etano	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno	0	0	0	0	0	0	0	0
Propano	0	0	0	0	0	0	0	0
Propileno	0	0	0	0	0	0	0	0
Benceno	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.0026	0.0026	0.0026	0.0026
Tolueno	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.7069	0.7069	0.7069	0.7069
p-Xileno	0	0	0	0	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376
C9	0	0	0	0	0.1529	0.1529	0.1529	0.1529
Hidrógeno	0	0	0	0	0	0	0	0

## VI. Separación de tolueno y xileno

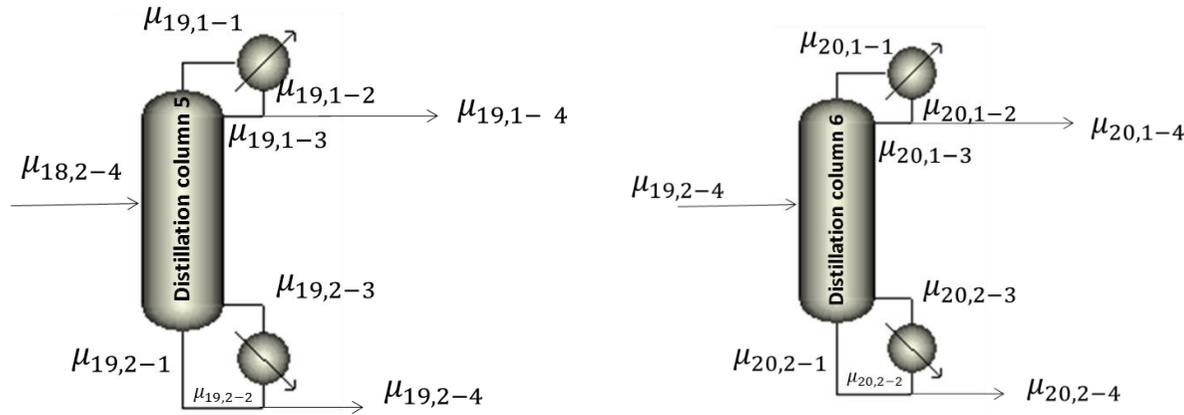


Tabla 21. Requerimientos de energía VI y VII.

UNIDADES	ENERGÍA (kW)
CONDENSER 2	-2331.09
REBOILER 5	2584.95
CONDENSER 3	-293.89
REBOILER 6	311.83

Tabla 22. Tabla de corrientes de separación de tolueno y xileno.

Corrientes	VI. SEPARACIÓN DE TOLUENO								VII. SEPARACIÓN DE XILENO							
	$\mu_{19,1-1}$	$\mu_{19,1-2}$	$\mu_{19,1-3}$	$\mu_{19,1-4}$	$\mu_{19,2-1}$	$\mu_{19,2-2}$	$\mu_{19,2-3}$	$\mu_{19,2-4}$	$\mu_{20,1-1}$	$\mu_{20,1-2}$	$\mu_{20,1-3}$	$\mu_{20,1-4}$	$\mu_{20,2-1}$	$\mu_{20,2-2}$	$\mu_{20,2-3}$	$\mu_{20,2-4}$
T (K)	410.02	409.92	409.92	409.92	462.01	462.01	466.14	462.01	439.24	439.36	439.36	439.36	477.05	477.05	477.06	477.05
P (kPa)	202.6	202.6	202.6	202.55	253.20	253.20	253.20	253.20	202.6	202.6	202.6	202.55	253.20	253.20	253.20	253.20
Flujo Total (gmol/s)	74.28	74.28	54.68	19.60	82.32	74.28	74.28	8.05	8.68	8.68	4.86	3.82	12.90	8.68	8.68	4.23
Fracción de Vapor	1	0	0	0	0	0	1	0	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00
Componentes																
Metano	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etano	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Propano	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Propileno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Benceno	0.0036	0.0036	0.0036	0.0036	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Tolueno	0.9962	0.9962	0.9962	0.9962	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024	0.0051	0.0051	0.0051	0.0051	0.0	0.0	0.0	0.0
p-Xileno	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002	0.4723	0.4723	0.4723	0.4723	0.9938	0.9938	0.9938	0.9938	0.0009	0.0009	0.0009	0.0009
C9	0	0	0	0	0.5253	0.5253	0.5253	0.5253	0.0011	0.0011	0.0011	0.0011	0.9991	0.9991	0.9991	0.9991
Hidrógeno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

### 8.3. ALGORITMO DE CÁLCULO DE DIMENSIONADO Y COSTE DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN

**STEP 1: TRAY NUMBER AND REFLUX RATIO**

$$N_i = \frac{12.3}{(\alpha_{lk/hk} - 1)^{\frac{2}{3}} \cdot (1 - \beta_i)^{\frac{1}{6}}}$$

$$R_i = \frac{1.38}{(\alpha_{lk/hk} - 1)^{0.9} \cdot (1 - \beta_i)^{0.1}}$$

$$N_T = \gamma_N \cdot \max_i(N_i) + (1 - \gamma_N) \cdot \min_i(N_i)$$

$$R = \gamma_R \cdot \max_i(R_i) + (1 - \gamma_R) \cdot \min_i(R_i)$$

$\alpha_{lk/hk}, \beta_i \rightarrow$  memo II  
 $\gamma_N, \gamma_R$  set to 0.8

**STEP 2: AVERAGE MOLECULAR WEIGHT**

$$\text{Average molecular weight} = \sum_k (x_k \cdot MW_k)$$

$x_k \rightarrow$  memo II  
 $MW_k \rightarrow$  tabulated Reid et al.

**STEP 3: VAPOR DENSITY OF STREAM**

$$(\text{Volumetric flowrate of vapor})_k = \left( \frac{\text{Molar Flowrate} \cdot MW \cdot \text{Vapor Fraction}(\varphi)}{\text{density}} \right)_k$$

$\varphi \rightarrow$  memo II

$$(\text{Volumetric Fraction})_k = \frac{(\text{Volumetric flowrate of vapor})_k}{\sum_k (\text{Volumetric flowrate of vapor})_k}$$

$$\text{Stream Vapor density} = \sum_k \text{weighted gas density} = \sum_k (\text{Volumetric flowrate of vapor})_k \cdot \text{density}_k$$

**STEP 4: LIQUID DENSITY OF STREAM**

$$(\text{Volumetric flowrate of liquid})_k = \left( \frac{\text{Molar Flowrate} \cdot MW \cdot (1 - \text{Vapor Fraction})}{\text{density}} \right)_k$$

$\varphi \rightarrow$  memo II

$$(\text{Volumetric Fraction})_k = \frac{(\text{Volumetric flowrate of liquid})_k}{\sum_k (\text{Volumetric flowrate of liquid})_k}$$

$$\text{Stream liquid density} = \sum_k \text{weighted liquid density} = \sum_k (\text{Volumetric flowrate of liquid})_k \cdot \text{density}_k$$

### STEP 5: DIAMETER OF THE TOP HALF COLUMN

$$V_{TOP} = \text{Vapor molar flowrate} = \mu_D \cdot (1 + \text{Reflux Ratio})$$

$$L_{TOP} = \text{Liquid molar flowrate} = \mu_D \cdot \text{Reflux Ratio}$$

$\mu_D \rightarrow$  memo II

$$V'_{TOP} = \text{Vapor mass flowrate} = V_{TOP} \cdot \text{Average Molecular weight}$$

$$L'_{TOP} = \text{Liquid mass flowrate} = L_{TOP} \cdot \text{Average Molecular Weight}$$

$$F_{lv} = \frac{L'_{top}}{V'_{top}} \cdot \left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{0.5}$$

$C_{sb} \rightarrow$  figure 1

$$U_{nf} = C_{sb} \cdot \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0.5} \text{ (ft/s)} \rightarrow U_{nf} \text{ (m/s)}$$

$$\text{Area}_{TOP} = \frac{V'_{TOP}}{0.8 \cdot U_{nf} \cdot \varepsilon \cdot \rho_g} \text{ (m}^2\text{)}$$

$$D_{TOP} = \sqrt{\frac{4 \cdot \text{Area}_{TOP}}{\pi}} \text{ (m)} \rightarrow D_{TOP} \text{ (m)}$$

### STEP 6: DIAMETER OF THE BOTTOM HALF COLUMN

$$V_{BOTTOM} = V_{TOP} - \text{Vapor Fraction} \cdot \text{Feed Flowrate} \cdot \text{scale} - \text{up factor}$$

$$L_{BOTTOM} = (\mu_D \cdot \text{Reflux Ratio} + \mu_{in}) \cdot \text{scale} - \text{up factor}$$

$\mu_D, \varphi \rightarrow$  memo II

$$V'_{BOTTOM} = \text{Vapor mass flowrate} = V_{BOTTOM} \cdot \text{Average Molecular weight}$$

$$L'_{BOTTOM} = \text{Liquid mass flowrate} = L_{BOTTOM} \cdot \text{Average Molecular Weight}$$

$$F_{lv} = \frac{L'_{bottom}}{V'_{bottom}} \cdot \left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{0.5}$$

$C_{sb} \rightarrow$  figure 1

$$U_{nf} = C_{sb} \cdot \left(\frac{\rho_l}{\rho_g}\right)^{0.5} \text{ (ft/s)} \rightarrow U_{nf} \text{ (m/s)}$$

$$\text{Area}_{bottom} = \frac{V'_{TOP}}{0.8 \cdot U_{nf} \cdot \varepsilon \cdot \rho_g} \text{ (m}^2\text{)}$$

$$D_{bottom} = \sqrt{\frac{4 \cdot \text{Area}_{TOP}}{\pi}} \text{ (m)} \rightarrow D_{TOP} \text{ (m)}$$

### STEP 7: HEIGHT OF THE COLUMN

$N =$  Number of stages in tray stack = Number total of stages – 2

	ft
Tray Stack (N-1)*2ft	(N-1)·2
Extra feed space (ft)	5
Disengagement Space(top&bottom)	10
Skirt Height	5
<b>Total (L)</b>	<b>Height of the column</b>

### STEP 8: COSTING CALCULATIONS: Guthrie's Method

$$BC_{vessel} = C_0 \cdot \left(\frac{L_{COLUMN}}{L_0}\right)^\alpha \cdot \left(\frac{D_{COLUMN}}{D_0}\right)^\beta \rightarrow \text{table 5}$$

$$BC_{TRAY} = C_0 \cdot \left(\frac{L_{TRAY}}{L_0}\right)^\alpha \cdot \left(\frac{D_{COLUMN}}{D_0}\right)^\beta \rightarrow \text{table 5}$$

$MF_{2,vessel}, MF_{2,tray} \rightarrow$  table 6

select material  $\rightarrow$  table 7

$$MPF_{vessel} = F_m \cdot F_p \rightarrow \text{table 8}$$

$$MPF_{tray} = F_t + F_s + F_m \rightarrow \text{table 9}$$

$$UF = \frac{\text{present cost index}}{\text{base cost index}} = 4.935$$

$$BMC_{vessel} = UF \cdot BC \cdot (MPF + MF - 1)$$

$$BMC_{tray} = UF \cdot BC \cdot (MPF + MF - 1)$$

$$BMC_{column} = BMC_{vessel} + BMC_{tray}$$

#### 8.4. RESUMEN DE LOS RESULTADOS DEL DIMENSIONADO Y COSTE DE LOS EQUIPOS.

INTERCAMBIADORES DE CALOR		ÁREA (m <sup>2</sup> )	CANTIDAD	BMC (€)	
Calentador 1		53.73	x1	161814.27	
Calentador 2		95.88	x1	242358.20	
Rehervidor 1		1131.47	x1	1280481.21	
Rehervidor 2		89.37	x1	225242.52	
Rehervidor 3		81.16	x1	199828.65	
Rehervidor 4		1117.63	x1	1196024.25	
Rehervidor 5		117.35	x1	276385.43	
Rehervidor 6		19.62	x1	86402.97	
Enfriador 1		775.41	x1	943064.81	
Condensador 1		183.63	x1	369753.55	
Condensador 2		46.61	x1	5694.35	
Condensador 3		4.64	x1	26841.33	
SISTEMA DE REFRIGERACIÓN		Wb(W)	Qc(W)	CANTIDAD	BMC (€)
Condensador Parcial 1		11282.96	13759.71	x1	21953015.82
Condensador Parcial 2		13603.90	13274.69	x1	37349750.36
Condensador Parcial 3		3850.44	7700.87	x1	6642606.08
Enfriador 2		6444.41	7859.04	x1	12812232.76
Enfriador 3		3910.06	5768.95	x1	7098370.30
COLUMNAS DE DESTILACIÓN		D(m)	H(m)	CANTIDAD	BMC (€)
Columna 1		4.79	7.92	x1	640800.82
Columna 2		4.60	15.85	x1	1305062.71
Columna 3		3.39	20.73	x1	822981.40
Columna 4		2.62	25.60	x1	690259.97
Columna 5		1.60	29.87	x1	462176.87
Columna 6		0.63	32.92	x1	185187.47
EQUIPOS		D(m)	L(m)	CANTIDAD	BMC (€)
REACTOR		3.11	12.46	x2	712598.71
Flash Drum 1		10.83	0.92	x1	41432.20
Flash Drum 2		10.43	1.14	x1	71051.71
Flash Drum 3		14.17	0.89	x1	10870.47
TANQUES DE ALMACENAMIENTO		D(m)	L(m)	CANTIDAD	BMC (€)
Benceno		28.82	23.63	x1	389138.29
Tolueno		20.10	16.49	x1	203563.60
Xileno		12.32	10.10	x1	84264.81
Pesados C9		13.77	11.29	x1	102976.39
Propano&Propileno		22.13	18.15	x1	241904.67
Catalizador		1.894332	1.554	x1	24598.69
COMPRESORES		Wb(hp)	CANTIDAD	BMC (€)	
Compresor 1		3461.74	x1	4596625.79	
Compresor 2		5865.75	x1	6807412.92	
Compresor 3		6232.99	x1	7133273.97	
OTROS EQUIPOS		Parámetros		CANTIDAD	BMC (€)
Bomba	$\Delta P=50.65$ kPa	$F=0.041$ m <sup>3</sup> /s	x1	10516.54	
Horno	$Q=39E6$ W		x1	391075.18	
PSA	$V=49.56$ m <sup>3</sup>		x2	315455.97	

## 8.5. CÁLCULO DE LOS COSTES DEL PROCESO.

$$\begin{aligned} \text{Costes de Capital} &= \text{Capital Fijo} + \text{Costes de Puesta en Marcha} + \text{Capital de Trabajo} \\ &= 9.4 \cdot BMC_{TOTAL} \end{aligned}$$

$$BMC_{TOTAL} = \sum BMC_{EQUIPOS}$$

$$\text{Costes Onsite} = 4 \cdot BMC$$

$$\text{Capital Fijo} = 1.8 \cdot \text{Costes Onsite} = 7.2 \cdot BMC$$

$$\text{Working capital} = 0.15 \cdot \text{Costes de Capital} = 1.41 \cdot \text{Costes de Capital}$$

$$\begin{aligned} \text{Costes de Fabricación} &= C_{materia\ prima} + C_{servicios} + C_{mano\ obra} + C_{mantenimiento} + \\ &C_{suministro} + C_{impuestos\ y\ seguros} \end{aligned}$$

$$C_{mantenimiento} = 0.6 \cdot \text{Capital Fijo}$$

$$C_{suministro} = 0.2 \cdot \text{Capital Fijo}$$

$$C_{impuestos\ y\ seguros} = 0.3 \cdot \text{Capital Fijo}$$

$$\text{Costes de Fabricación} = C_{materia\ prima} + C_{servicios} + C_{mano\ obra} + 1.1 \cdot \text{Capital Fijo}$$

$$\text{Salario Anual Operario (\$)} = 41600 \cdot (1.03)^{\text{año}-2003}$$

$$\text{Costes Totales de Mano de Obra} = \text{Directa} + \text{Indirecta} + \text{Beneficios} + \text{Mantenimiento}$$

$$\begin{aligned} C_{mano\ de\ obra\ Directa} &= \text{Salario Anual Operario} \cdot x \frac{\text{person} \cdot h}{\text{day} \cdot \text{processing\ step}} \cdot 5 \text{ processing\ step} \cdot \frac{1\ \text{day}}{8\ h} \\ &x \frac{\text{person} \cdot h}{\text{day} \cdot \text{processing\ step}} \rightarrow \text{graph in Peters and Timmerhaus, 2002} \end{aligned}$$

## 8.6. CÁLCULO DE LOS INDICADORES ECONÓMICOS

$$\text{Retorno de la Inversión (ROI)} = \frac{\text{Beneficio Neto Después de las Tasas}}{\text{Coste de Capital}}$$

$$\text{Tiempo de Recuperación de la Inversión} = \frac{\text{Coste de Capital}}{\text{Beneficio Neto Antes de las Tasas} + \text{Depreciación}}$$

$$NPV = -(C_1 + C_W) + [(R - X) + D \cdot t] \cdot \left[ \frac{1 - (1 + i)^{-n}}{i} \right] + \frac{C_S + C_W}{(1 + i)^n}$$

donde:

$$C_1 = \text{Capital Fijo}, C_W = \text{Capital de Trabajo}$$

$$R = \text{Beneficio Bruto}, X = \text{Costes de Fabricación} + \text{Royalties} + \text{Impuestos}$$

$$D = \text{Depreciation per year}$$

$$t = \text{impuestos} = 0.35$$

$$i = \text{Tasa de retorno} = 0.135$$

$$n = \text{Vida útil de la planta} = 15$$

## 8.7. REPRESENTACIÓN GRÁFICA DEL ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD.

Para realizar el análisis de sensibilidad, se dejan fijas todas las variables menos una, que es la que se va a estudiar. En primer lugar, se analiza la variación del VAN con el coste de la materia prima. El coste de etano influye en el capital de trabajo, en los costes de fabricación y en la X del VAN. Representando el valor del coste frente al valor del VAN obtenemos la gráfica mostrada en la figura 21, donde se observa que el VAN se hace positivo un coste de etano menor a 50 €/m<sup>3</sup>.

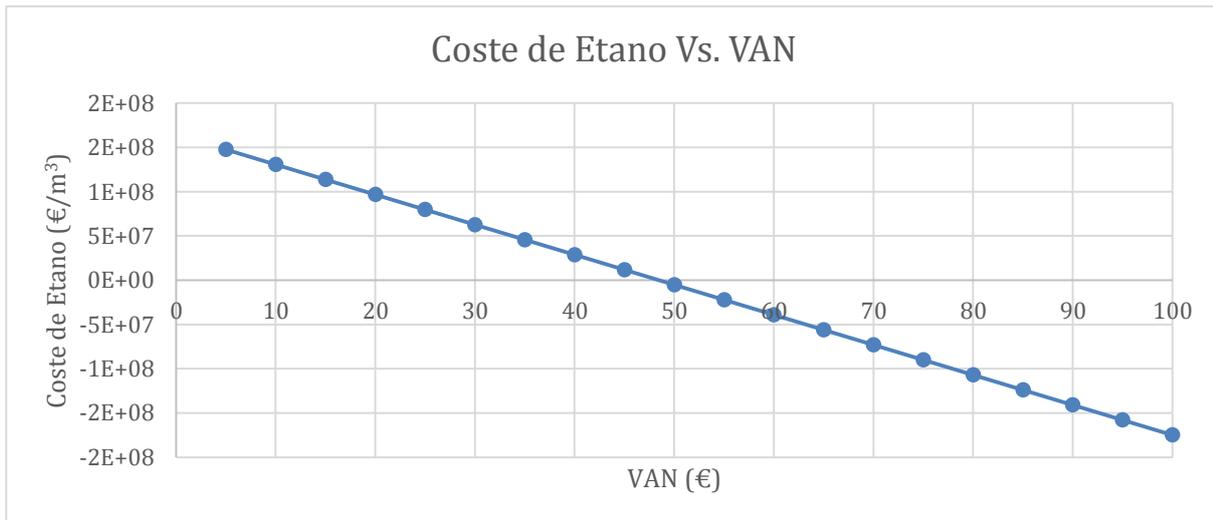


Figura 20. Variación del VAN en función del coste de Etano.

Si realizamos un estudio de la variación del VAN con el precio del benceno, en la gráfica representada en la figura 22 se observa que se obtienen valores positivos del VAN para un precio de venta del benceno superior a 1250 €/ton.

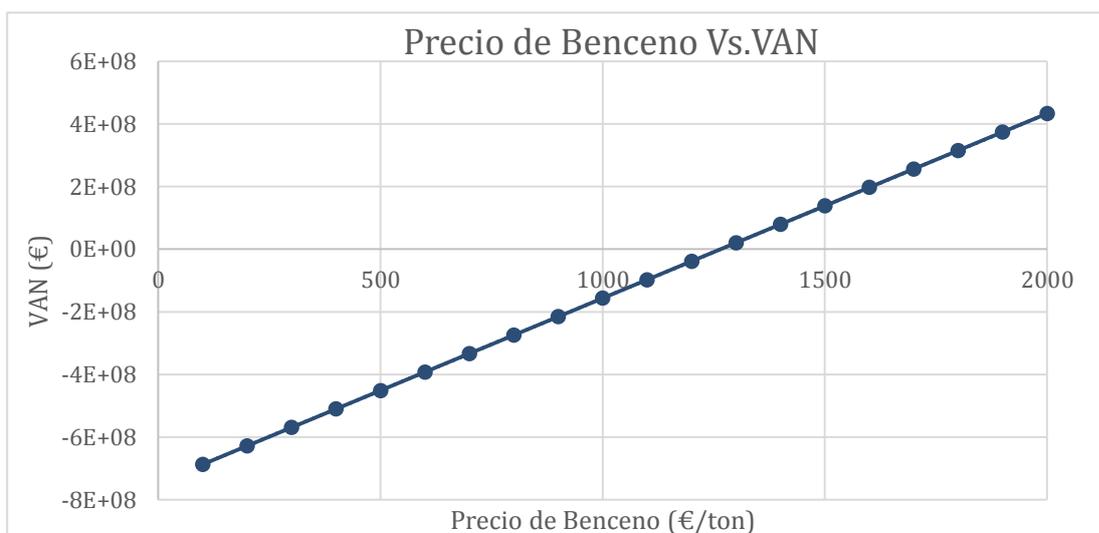


Figura 21. Variación del VAN con el precio del Benceno.