



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**
**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA**

INGENIERÍA QUÍMICA

**“DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE
DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL
CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS”**

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA

JESSICA MUCIÑO CHÁVEZ

DANIEL RAMIRO CARMONA

ASESOR

Dr. NÉSTOR NOÉ LÓPEZ CASTILLO



México D.F. 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



AGRADECIMIENTOS

Agradezco principalmente a mis papás Beatriz Chávez Contreras y Juan Carlos Muciño Vargas por siempre brindarme su apoyo, estar conmigo en las buenas y en las malas pero sobretodo les agradezco por no dejar que me rindiera por más difíciles que fueran las cosas.

A mi lindo bebé Chris por ser mi motivación para seguir adelante y nunca darme por vencida. Eres la más grande bendición que me dio la vida mi niño te amo.

A mi hermana por siempre estar ahí conmigo y más cuando estamos deprimidas.

A mi Dany le agradezco todos lo lindos momentos que pasamos durante toda la carrera, por motivarme a seguir superando y por darme todo su amor y estar a mi lado.

Al Dr. Néstor Noé López Castillo por ser el asesor de este trabajo, por todas sus enseñanzas y sobre todo por enseñarme que no importa cuántas veces te equivocas si no como te levantas.

A Carlos y Marco por que más que ms amigos siempre fueron como mis hermanos, siempre me cuidaron y me apoyaron en los momentos más difíciles pero también estuvieron en los mejores momentos. La universidad no hubiera sido la misma sin ustedes los quiero.

A Cacahuete y Abi por siempre confiar en mí y apoyar todas las locuras que se me ocurrían, por defenderme de quienes hablaban mal de mí y por ayudarme con las tareas de económica.

Jessica

Me gustaría que estas líneas sirvieran para expresar mi más profundo y sincero agradecimiento en especial al Dr. Néstor Noé López Castillo que con su ayuda ha colaborado en la realización del presente trabajo.

Muy especialmente quiero agradecer a Jessica Muciño Chávez por su compañía, su gentileza, el ánimo que me brindo para la realización de este trabajo, pero en especial por estar siempre a mi lado.

Agradeciendo así mismo a mi madre que me impulso y ayudo en todo momento.

Daniel



ÍNDICE

ÍNDICE DE TABLAS	3
ÍNDICE DE FIGURAS	5
ABREVIATURAS.....	7
RESUMEN	9
CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN.....	10
1.1. INTRODUCCIÓN	10
1.2. ALCANCE	11
1.3. OBJETIVO GENERAL	11
1.4. OBJETIVOS PARTICULARES.....	12
CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO.....	13
2.1. GASOLINA.....	13
2.2. BENCENO EN LAS GASOLINAS	14
2.3. BENCENO EN LA SALUD	16
2.4. ECUACIONES DE ESTADO.....	18
2.4.1. ECUACIÓN REDLICH-KWONG (RK).....	19
2.4.2. ECUACIÓN SOAVE-REDLICH-KWONG (SRK).....	20
2.5. MÉTODOS APROXIMADOS PARA SEPARACIONES EN MULTIPLE ETAPA DE SISTEMAS MULTICOMPONENTE	21
2.5.1. DETERMINACIÓN DE LA PRESIÓN DE LA COLUMNA Y EL TIPO DE CONDENSADOR.....	22
2.5.2. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR EL NÚMERO MÍNIMO DE ETAPAS TEÓRICAS.....	23
2.5.3. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR LAS ESCISIONES DE LOS COMPONENTES NO CLAVE.....	27
2.5.4. CORRELACIÓN DE UNDERWOOD	28
2.5.5. CORRELACIÓN DE GILLILAND	35
2.5.6. ECUACIÓN DE KIRKBRIDE.....	37
2.5.7. CÁLCULO DE LOS SERVICIOS DEL CONDENSADOR Y EL EBULLIDOR.....	38
2.6. MÉTODOS RIGUROSOS PARA SEPARACIONES MULTICOMPONENTES EN ETAPAS MÚLTIPLES	38
2.6.1. ECUACIONES MESH.....	39



2.6.2.	ALGORITMO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL	42
2.6.3.	MÉTODO DEL PUNTO DE BURBUJA (BP) PARA DESTILACIÓN ..	43
CAPÍTULO 3: DESARROLLO Y RESULTADOS		48
3.1.	COMPOSICIÓN DE LA GASOLINA Y ESPECIFICACIONES	48
3.2.	DISEÑO DE PRELIMINAR DE LA COLUMNA	49
3.3.	DISEÑO RIGUROSO DE LA COLUMNA.....	57
3.4.	SIMULACIÓN DE LA COLUMNA.....	69
3.5	RESULTADOS.....	75
CAPÍTULO 4: CONCLUSIONES.....		76
ANEXOS		78
ANEXO A: VALORES DE K PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		78
ANEXO B: DATOS DE ISOPENTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN.....		80
ANEXO C: DATOS DE ISOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN.....		82
ANEXO D: DATOS DE HEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN.....		84
ANEXO E: DATOS DE BENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		86
ANEXO F: DATOS DE CICLOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		88
ANEXO G: DATOS DE HEPTENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		90
ANEXO H: DATOS DE ISOCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		92
ANEXO I: DATOS DE TOLUENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		94
ANEXO J: DATOS DE OCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		96
ANEXO K: DATOS DE ETILBENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		98
ANEXO L: DATOS DE XILENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN		100
BIBLIOGRAFÍA		102



ÍNDICE DE TABLAS

<i>Tabla 1 Especificaciones adicionales de gasolinas por región</i>	15
<i>Tabla 2 Composición del reformado, 24-08-2012</i>	48
<i>Tabla 3 Composición Gasolina para Cálculo</i>	48
<i>Tabla 4 Balance de Materia Preliminar</i>	50
<i>Tabla 5 Valores de K_D y K_B</i>	51
<i>Tabla 6 Valores Medios de Volatilidades</i>	52
<i>Tabla 7 Distribución de los Componentes no Clave en el Destilado</i>	53
<i>Tabla 8 Distribución de los Componente no Clave en el Fondo</i>	53
<i>Tabla 9 Balance de Materia en el Domo y Fondo</i>	54
<i>Tabla 10 Valores de V y T iniciales</i>	60
<i>Tabla 11 Temperaturas Reales a lo Largo de Toda la Columna</i>	61
<i>Tabla 12 Composiciones a lo largo de toda la columna</i>	62
<i>Tabla 13 Flujos de líquido y vapor en cada etapa</i>	66
<i>Tabla 14 Resultados de los 3 métodos</i>	75
<i>Tabla 15 Valores de V_j, T_j y K_{ij} de la primera iteración</i>	78
<i>Tabla 16 Valores A, B, C y D para el isopentano</i>	80
<i>Tabla 17 Matriz tridiagonal A, B, C, para el isopentano</i>	81
<i>Tabla 18 Valores A, B, C y D para el isohexano</i>	82
<i>Tabla 19 Matriz tridiagonal A, B, C, para el isohexano</i>	83
<i>Tabla 20 Valores A, B, C y D para el hexano</i>	84
<i>Tabla 21 Matriz tridiagonal A, B, C, para el hexano</i>	85
<i>Tabla 22 Valores A, B, C y D para benceno</i>	86
<i>Tabla 23 Matriz tridiagonal A, B, C, para el benceno</i>	87
<i>Tabla 24 Valores A, B, C y D para el ciclohexano</i>	88
<i>Tabla 25 Matriz tridiagonal A, B, C, para el ciclohexano</i>	89
<i>Tabla 26 Valores A, B, C y D para el hepteno</i>	90
<i>Tabla 27 Matriz tridiagonal A, B, C, para el hepteno</i>	91
<i>Tabla 28 Valores A, B, C y D para el isoctano</i>	92
<i>Tabla 29 Matriz tridiagonal A, B, C, para el isoctano</i>	93
<i>Tabla 30 Valores A, B, C y D para el tolueno</i>	94



<i>Tabla 31 Matriz tridiagonal A, B, C, para el tolueno</i>	<i>95</i>
<i>Tabla 32 Valores A, B, C y D para el octano</i>	<i>96</i>
<i>Tabla 33 Matriz tridiagonal A, B, C, para el octano</i>	<i>97</i>
<i>Tabla 34 Valores A, B, C y D para el etilbenceno</i>	<i>98</i>
<i>Tabla 35 Matriz tridiagonal A, B, C, para el etilbenceno.....</i>	<i>99</i>
<i>Tabla 36 Valores A, B, C y D para el xileno</i>	<i>100</i>
<i>Tabla 37 Matriz tridiagonal A, B, C, para el xileno.....</i>	<i>101</i>



ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 1 Algoritmo para destilación de sistemas multicomponentes por un método empírico.....</i>	<i>22</i>
<i>Figura 2 Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.....</i>	<i>23</i>
<i>Figura 3 Correlación de Gilliland en coordenadas lineales.</i>	<i>36</i>
<i>Figura 4 Etapa General de Equilibrio</i>	<i>39</i>
<i>Figura 5 Representación Esquemática de un Proceso en Contracorriente de N Etapas.....</i>	<i>40</i>
<i>Figura 6 Algoritmo del método Punto de Burbuja (BP).....</i>	<i>44</i>
<i>Figura 7 Algoritmo para calcular el Punto de Burbuja</i>	<i>47</i>
<i>Figura 8 Especificaciones para el Método FUG</i>	<i>49</i>
<i>Figura 9 Presión del condensador hoja de cálculo.....</i>	<i>50</i>
<i>Figura 10 Temperatura de Fondo Hoja de Calculo</i>	<i>51</i>
<i>Figura 11 Valor ϕ Solver Excel.....</i>	<i>54</i>
<i>Figura 12 Valor de Y Correlación de Gilliland.....</i>	<i>56</i>
<i>Figura 13 Diseño Preliminar Final de la Columna</i>	<i>57</i>
<i>Figura 14 Flujos que Componen la Columna de Destilación.....</i>	<i>58</i>
<i>Figura 15 Parte Superior de la Torre.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 16 Fracción mol de los componentes en cada plato</i>	<i>64</i>
<i>Figura 17 Comportamiento de las constantes de equilibrio K en la columna</i>	<i>65</i>
<i>Figura 18 Flujos calculados para la columna de destilación (las unidades de los flujos son Kmol/hr).....</i>	<i>68</i>
<i>Figura 19 Resultados del destilado Aspen Plus</i>	<i>69</i>
<i>Figura 20 Especificaciones de diseño en el destilado</i>	<i>70</i>



<i>Figura 21 Especificaciones de diseño en el fondo</i>	<i>70</i>
<i>Figura 22 Variación en la relación de reflujo</i>	<i>71</i>
<i>Figura 23 Resultado de la variación del reflujo.....</i>	<i>71</i>
<i>Figura 24 Variable a modificar y variable a monitorear</i>	<i>72</i>
<i>Figura 25 Resultados análisis de sensibilidad.....</i>	<i>73</i>
<i>Figura 26 Composición de benceno a lo largo de la columna.....</i>	<i>73</i>
<i>Figura 27 Especificaciones para el dimensionamiento de la columna</i>	<i>74</i>
<i>Figura 28 Dimensionamiento de la columna.</i>	<i>74</i>



ABREVIATURAS

LETRAS MAYÚSCULAS Y MINUSCULAS

ASTM	American Society for Testing Materials,
Ai, Bi, Ci, Di	Parámetros del Balance de materia
a,b	Constantes de Redlich-Kwong
Ac	Constante Soave- Redlich-Kwong
b _j	Flujo del fondo del componente j
b _r	Flujo del fondo de referencia
D	Caudal del destilado
d _i	Flujo de destilado del componente i
d _r	Flujo de destilado de referencia
f _i	Flujo de alimentación del componente i
H	Entalpia por mol
HHK	Más pesado que el clave pesado
HK	Clave pesado
i,j	Componente i en una corriente que abandona la etapa j
K	Constante de Equilibrio
L _∞	Caudal de líquido en la zona de contacto
LK	Clave ligero
LLK	Más ligero que el clave ligero
N	Número de etapas de equilibrio
N _{min}	Número de etapas de equilibrio mínimas
N _R	Número de pisos en el sector de enriquecimiento
N _s	Número de pisos en el sector de agotamiento
P	Presión
PB	Presión del Fondo de la Columna
P _C	Presión crítica
P _D	Presión del condensador
Q _B	Flujo de calor en el rehervidor
Q _C	Flujo de calor en el condensador
R	Constante universal de los gases ideales
R _{min}	Reflujo mínimo
S _j	Función del punto de burbuja
S _X , S _Y	Funciones de la suma de fracción molar
T	Temperatura
T _B	Temperatura del fondo de la columna
T _c	Temperatura crítica
TD	Temperatura del Condensador
T _r	Temperatura reducida
V	Volumen
V,L	Caudales de corrientes de vapor y líquido
V _∞	Caudal de vapor en la zona de contacto
\bar{V}	Flujo Molar
x _B	Composición en el fondo de la columna
x _D	Composición de destilado



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

x_i	Composición de líquido del componente i
$x_{i\infty}$	Composición del componente i en la zona de contacto
$x_{j\infty}$	Composición del componente j en la zona de contacto
x_{oi}	Composición de reflujo
y_i	Composición de vapor del componente i
ZMVM	Zonas Metropolitanas del Valle de México
ZMG	Zonas Metropolitanas de Guadalajara
ZMM	Zonas Metropolitanas de Monterrey

LETRAS GRIEGAS

α	Relación para Hidrocarburos Redlich-Kwong
$(\alpha_{ij})_m$	Valor medio de la volatilidad en la columna
γ	Coefficiente de actividad de una mezcla
θ	Raíz de la ecuación de Underwood
τ	Suma de los cuadrados de la diferencia
ϕ	Parámetro de la ecuación de Underwood
ψ	Parámetro de asociación
ω	Factor acéntrico

ABREVIACIONES

atm	Atmósfera
°C	Grados Celsius
°F	Grados Fahrenheit
K	Kelvin
h	Hora
Kg	Kilogramo
lb	libra de masa
mol-kg	mol-kilogramo
mol-lb	mol-libra
psi	Libra fuerza por pulgada cuadrada
psia	Libra fuerza por pulgada cuadrada absoluta

SÍMBOLOS MATEMÁTICOS

Σ	Suma
\ln	Logaritmo natural
Lim	Límite
log	Logaritmo natural
π	Pi



RESUMEN

En esta tesis se realizó el diseño de una torre de destilación para disminuir el contenido de benceno en las gasolinas partiendo de las especificaciones de control de calidad del reformado las cuales se dividen en: Aromáticos (Tolueno, Xileno y Etilbenceno), Olefinas (Hepteno,), Benceno (Benceno,), Parafinas (Hexano, Octano e Isopentano), Isoparafinas (Isohexano, Isoctano), Nafteno (Ciclohexano), utilizando un método aproximado (FUG) para el diseño preliminar de la columna en el que se estableció que el benceno es el componente ligero ya que se quiere obtener la mayor parte del mismo

Para el diseño final de la columna se calculó mediante un método riguroso la temperatura, la presión, los caudales, las composiciones de las corrientes y las velocidades de transferencia de calor para cada etapa.

Para optimizar los gastos de energía se realizó la simulación de la destilación en el programa Aspen Plus V8. Y con ayuda del programa se logró obtener la etapa óptima de alimentación y el dimensionamiento de la columna.

Por último se realizó la comparación de los resultados obtenidos por los tres métodos para determinar si las diferencias entre los métodos son muy considerables.

Al final de la comparación se obtuvo como resultado que aunque las diferencias entre los métodos no son muy grandes el diseño más conveniente es el realizado por el simulador ya que con él se logró obtener la mayor cantidad de benceno con menores gastos energéticos.



CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

1.1. INTRODUCCIÓN

Desde comienzos del siglo XX, se tenía conocimiento de los métodos cortos y rigurosos para el cálculo de las columnas de destilación. En ese entonces, los métodos cortos se constituían en la herramienta primaria de diseño, ya que era necesario realizar los cálculos a mano y la implementación de métodos rigurosos era una tarea compleja que podía demandar varios días y algunas veces semanas. El error derivado de la aplicación de métodos cortos era compensado con factores de sobre diseño.

En la actualidad, los métodos rigurosos han pasado a ser la principal herramienta de diseño, quedando como único papel de los métodos aproximados el proporcionar una estimación inicial para los cálculos rigurosos y eliminar las opciones menos adecuadas. El diseño final del equipo de etapas múltiples requiere una determinación rigurosa de la temperatura, la presión, los caudales y composiciones de las corrientes y las velocidades de transferencia de calor para cada etapa. Dada la elevada no linealidad de las ecuaciones que describen el proceso, es necesario resolver el problema general por el uso de procedimientos iterativos y los diversos métodos difieren en la selección del conjunto de variables independientes. Históricamente, los primeros intentos para la resolución del sistema de ecuaciones formado por los balances de materia, las relaciones de equilibrio, las sumas de fracciones molares y los balances de entalpía (sistema de ecuaciones MESH) fueron los métodos clásicos de cálculo etapa a etapa y ecuación a ecuación de Lewis-Matheson (1932) y Thiele-Geddes (1933), aplicables a columnas convencionales (se introduce un único alimento y se extraen dos productos, el destilado por la cabeza y el residuo por el fondo). Sin embargo, la mayor parte de los métodos modernos son “componente a componente”, haciendo referencia este tipo de designación a la forma en que se agrupan y se resuelven los sistemas de ecuaciones. Los métodos clásicos de cálculo etapa a etapa y ecuación a ecuación de Lewis-Matheson y de Thiele-Geddes constituyen un primer intento de resolución de las ecuaciones MESH. Aunque ambos fueron ampliamente utilizados para cálculos manuales en los años



siguientes a su aparición en la bibliografía, se observó un comportamiento numéricamente inestable cuando se intentó su programación en una computadora. En la actualidad se utilizan métodos que resuelven las ecuaciones MESH a partir de un conjunto de ecuaciones lineales simultáneas para las N etapas, agrupadas para cada componente. Estos métodos se pueden clasificar dentro de cuatro grandes grupos: - Métodos de punto de burbuja (BP), que calculan la temperatura de las etapas por resolución de la ecuación del punto de burbuja. - Métodos de suma de flujos (SR), que usan los balances de energía para obtener la temperatura de las etapas. - Métodos de Newton 2N, que calculan las temperaturas y el flujo total al mismo tiempo, pero las composiciones en un paso separado. Estas tres clases de métodos separan las ecuaciones MESH en grupos, que resuelven a través de una serie de pasos. - Método de Newton global o de corrección simultánea (SC), que se resuelve todas las ecuaciones MESH simultáneamente. En general, los métodos modernos están ya programados, son rápidos y requieren un espacio mínimo de memoria en una computadora, aunque normalmente están limitados a un número relativamente reducido de posibilidades para la especificación de variables.

1.2. ALCANCE

- ❖ Realizar el diseño de una torre de destilación para disminuir el contenido de benceno en la gasolina reformada mediante un método aproximado (método FUG).
- ❖ Calcular mediante un método riguroso las temperaturas, presiones, flujos de líquido y vapor, composición y velocidades de transferencia de calor para cada etapa utilizando el diseño obtenido del método aproximado.
- ❖ Realizar la simulación en ASPEN PLUS V8 para obtener una corriente de benceno más pura optimizando los gastos de energía cambiando algunas variables.

1.3. OBJETIVO GENERAL

Diseñar una torre de destilación para la reducción del contenido de benceno y llevar a cabo la simulación para obtener una corriente de benceno de mayor pureza.



1.4. OBJETIVOS PARTICULARES

Diseñar por medio de un método matemático aproximado y un método riguroso la columna de destilación óptima para obtener una corriente rica en benceno.

Realizar la simulación cambiando condiciones de operación para conseguir la mayor cantidad de benceno disminuyendo los gastos energéticos.

Comparar los resultados para elegir el correcto diseño de la columna.



CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO

2.1. GASOLINA

La gasolina es una mezcla de hidrocarburos derivada del petróleo, que se utiliza como combustible en motores de combustión interna de ignición por chispa; su composición química esta entre el rango de C_5H_{12} a C_9H_{20} .

La gasolina se obtiene del petróleo en una refinería, la cual se encarga de transformarlo en derivados comercializables. Es de color rojo, con un olor característico un tanto agradable, pero al estar por periodos prolongados en contacto, llega a causar nauseas.

En México, existen dos tipos de gasolinas: la gasolina magna y la premium. La magna contiene un octanaje menor que la premium, es la más común utilizada en los vehículos y su precio es menor que la segunda.

Las gasolinas contienen aditivos químicos llamados oxigenantes. Los oxigenantes permiten que exista la combustión completa en los motores; de esta forma se reduce la cantidad de gases contaminantes emitidos al medio ambiente, principalmente monóxido de carbono e hidrocarburos no quemados.

Dentro de una fracción de gasolina, los 5 tipos de componentes que pueden estar presentes son:

- Parafinas
- Oleofinas
- Naftenos
- Aromáticos
- Isoparafinas

Respecto a su procedencia, existen 3 clases de gasolinas

- Gasolina natural: Es aquella que se produce por separación del gas natural o gas de cabeza de pozo. La composición de esta gasolina varía con respecto al gas natural que lo acompaña. El contenido en hidrocarburos es más bajo que la gasolina de destilación.



- Gasolinas de destilación directa: Fracción que se obtiene al destilar el crudo de petróleo a presión atmosférica. No contiene hidrocarbonados no saturados de moléculas complejas aromático-nafténicas, puesto que presentan puntos de ebullición más altos que el límite superior del intervalo de ebullición de la gasolina.
- Gasolina de craqueo: Esta se obtiene a partir de la fracción pesada del petróleo que se somete a otro proceso (craqueo), en el que se rompen las moléculas grandes en otras más pequeñas, obteniendo así moléculas que entran dentro de la fracción de gasolina. La composición ya no va a ser tan homogénea como en las dos anteriores, y va a depender de la composición inicial y del proceso utilizado.

2.2. BENCENO EN LAS GASOLINAS

El benceno es un componente de la gasolina que sirve para aumentar el octanaje y evitar la detonación del motor. Al ser un contaminante tóxico del aire ya que se sabe que tienen efectos cancerígenos, el conocimiento de su concentración puede ser de ayuda en la evaluación de posibles riesgos para la salud a las personas que manipulan y utilizan gasolina.

El benceno se utiliza generalmente como un disolvente, pero actualmente se emplea como materia prima para la síntesis de otros químicos. El porcentaje de benceno en gasolina está entre 1% y 2% vol.

La Norma Oficial Mexicana nom-086-semarnat-sener-scfi-2005, (especificaciones de los combustibles fósiles para la protección ambiental) establece las especificaciones sobre la protección ambiental que deben cumplir los combustibles fósiles líquidos y gaseosos que se comercializan en el país.

Actualmente, el máximo contenido aceptable de benceno en las gasolinas de nuestro país es de 1.0 % vol. (NOM-086).

En la Tabla 1 se establecen las especificaciones para las gasolinas considerando las Zonas Metropolitanas del Valle de México, de Guadalajara y de Monterrey.



**DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS**

Tabla 1 Especificaciones adicionales de gasolinas por región

Contenido máximo de:	Unidad	Método de prueba	ZMVM	ZMG	ZMM	Resto del país	
			Premium y Magna			Premium	Magna
<i>Aromáticos</i>	% vol.	Tipos de hidrocarburos en productos líquidos de petróleo por absorción de indicador fluorescente (ASTM D 1319-03)	25	35	35	35	I N F O R M A R
<i>Olefinas</i>	% vol.	Tipos de hidrocarburos en productos líquidos de petróleo por absorción de indicador fluorescente (ASTM D 1319-03)	10	12.5	12.5	15	Informar
<i>Benceno</i>	% vol.	Determinación de benceno y tolueno en gasolina terminada para uso en motores y aviación por cromatografía de gases (ASTM D 3606-04 ^a)	1	1	1	2	3
<i>Oxígeno</i>	% peso, máximo	Determinación de MTBE, ETBE TAME, DIPE y de, Alcohol teramílico (ASTM D 4815-00 (2005))	2.7	2.7	2.7	2.7	No aplica
<i>BTX</i>	% vol.	Determinación de benceno y tolueno en gasolina terminada para uso en motores y aviación por cromatografía de gases (ASTM D 3606-04 ^a)	Informar				

Se prevé que, en un futuro de 1 a 3 años, el contenido máximo de benceno en las gasolinas se fijará, por norma, en niveles del orden del 0.62 % vol. Para cumplir con dicha norma, más restrictiva, se tendrán que implementar nuevos proyectos en Pemex.



2.3. BENCENO EN LA SALUD

¿QUÉ ES EL BENCENO?

El benceno, conocido también como benzol, es un líquido incoloro de olor dulce. El benceno se evapora al aire rápidamente y es sólo ligeramente soluble en agua. El benceno es sumamente inflamable. La mayoría de la gente puede empezar a detectar el olor del benceno en el aire cuando está en concentraciones de 1.5 a 4.7 partes por millón en el aire (ppm) y en el agua cuando la concentración es de 2 ppm. La mayoría de la gente empieza a detectar el sabor del benceno cuando está en concentraciones entre 0.5 y 4.5 ppm en el agua. Una parte por millón equivale aproximadamente a una gota en 40 galones. El benceno es un contaminante presente en el aire, el agua y el suelo. El benceno proviene tanto de fuentes industriales como naturales.

FUENTES Y USOS INDUSTRIALES

El benceno fue descubierto y producido a partir de alquitrán en el siglo XIX. Hoy en día, la mayoría del benceno se produce a partir del petróleo. Debido a su extenso uso, el benceno es una de las 20 sustancias químicas más producidas en los Estados Unidos en términos de volumen. Varias industrias usan benceno para fabricar otros productos químicos, como por ejemplo el estireno, el cumeno y ciclohexano. El benceno también se usa en la manufactura de ciertos tipos de caucho, lubricantes, tinturas, detergentes, medicamentos y plaguicidas.

FUENTES NATURALES

Las fuentes naturales de benceno incluyen los gases emitidos por volcanes y los incendios forestales, contribuyen a la presencia de benceno en el medio ambiente. El benceno también se encuentra en el petróleo, la gasolina y el humo de cigarrillos.

¿CÓMO ENTRA Y SALE EL BENCENO DEL CUERPO?

El benceno puede entrar al cuerpo a través de los pulmones, el tubo digestivo y la piel. Cuando se está expuesto a niveles altos de benceno en el aire, aproximadamente la mitad del benceno que se inhala pasa a través de los



pulmones y entra a la corriente sanguínea. Cuando se expone al benceno en alimentos o bebidas, la mayor parte del benceno que se ingiere pasa a través del tubo digestivo a la corriente sanguínea. Si la piel entra en contacto con benceno o con productos que contienen benceno, una pequeña cantidad de benceno pasará a la sangre a través de la piel. Una vez en la sangre, el benceno se moviliza a través del cuerpo y puede ser almacenado transitoriamente en la médula de los huesos y el tejido graso. El benceno es convertido en el hígado y los riñones a productos llamados metabolitos. La mayoría de los metabolitos del benceno abandonan el cuerpo en la orina dentro de 48 horas después de la exposición.

¿CÓMO PUEDE AFECTAR EL BENCENO LA SALUD?

La exposición breve (5 a 10 minutos) a niveles muy altos de benceno en el aire (10,000 a 20,000 ppm) puede producir la muerte. Niveles más bajos (700 a 3,000 ppm) pueden producir letargo, mareo, aceleración del latido del corazón, dolor de cabeza, temblores, confusión y pérdida del conocimiento. En la mayoría de los casos, los efectos desaparecerán cuando la exposición termina y la persona empieza a respirar aire fresco.

El benceno produce alteraciones en la sangre. La gente que respira benceno durante períodos prolongados puede sufrir daño de los tejidos que producen las células de la sangre, especialmente la médula de los huesos. Estos efectos pueden interrumpir la producción de elementos de la sangre y producir una disminución de algunos componentes importantes de la sangre. Una disminución de los glóbulos rojos puede conducir a anemia. La reducción de otros componentes de la sangre puede causar hemorragias. La producción de elementos de la sangre puede normalizarse después que la exposición al benceno termina. La exposición excesiva al benceno puede ser perjudicial para el sistema inmune, aumentando las probabilidades de contraer infecciones y posiblemente disminuyendo las defensas del cuerpo contra el cáncer.

La exposición prolongada al benceno puede producir cáncer de los órganos que producen los elementos de la sangre. Esta condición se llama leucemia. La exposición al benceno se ha asociado con el desarrollo de un tipo especial de



leucemia llamada leucemia mieloide aguda. El Departamento de Salud y Servicios Humanos (DHHS) ha determinado que el benceno es un carcinógeno reconocido. Tanto la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC) como la EPA han determinado que el benceno es carcinogénico en seres humanos.

2.4. ECUACIONES DE ESTADO

Una ecuación de estado es una ecuación constitutiva para sistemas hidrostáticos que describe el estado de agregación de la materia como una relación matemática entre la temperatura, la presión, el volumen, la densidad, la energía interna y posiblemente otras funciones de estado asociadas con la materia.

Una ecuación de estado es la relación que existe entre dos o más propiedades termodinámicas. En sistemas de un componente y de una fase, la ecuación de estado incluirá tres propiedades, dos de las cuales pueden ser consideradas como independientes. Aunque en principio se podrían plantear relaciones funcionales en que intervengan tres propiedades termodinámicas cualesquiera, las expresiones analíticas de las relaciones entre propiedades han sido limitadas casi completamente a la presión, volumen y temperatura. Dado que la presión, temperatura y volumen pueden ser medidos directamente, los datos necesarios para evaluar las constantes en tales ecuaciones pueden ser obtenidos experimentalmente.

La elección de la ecuación a usar en una aplicación dada depende principalmente de la exactitud deseada y de la capacidad del usuario. Como los coeficientes de casi todas las ecuaciones de estado deben ser evaluados ajustando o adaptando las ecuaciones a diversos datos experimentales de presión, volumen y temperatura, estas ecuaciones nunca pueden representar exactamente los datos experimentales; más aún, muchas veces estas ecuaciones no representan los datos, limitando la exactitud. Esto es particularmente cierto cuando las ecuaciones más sencillas son aplicadas en los límites del punto crítico.

Tiene la forma general:

$$f(p, V, T) = 0 \quad (1)$$



No existe una única ecuación de estado que describa el comportamiento de todas las sustancias para todas las condiciones de presión y temperatura.

IMPORTANCIA DE LAS ECUACIONES DE ESTADO

- Las ecuaciones de estado son útiles para describir las propiedades de los fluidos, mezclas o sólidos.
- El uso más importante de una ecuación de estado es para predecir el estado de gases y líquidos. Una de las ecuaciones de estado más simples para este propósito es la ecuación de estado del gas ideal, que es aproximable al comportamiento de los gases a bajas presiones y temperaturas mayores a la temperatura crítica. Sin embargo, esta ecuación pierde mucha exactitud a altas presiones y bajas temperaturas, y no es capaz de predecir la condensación de vapor en líquido.
- Entre las ecuaciones de estado más empleadas sobresalen las ecuaciones cúbicas de estado. De ellas, las más conocidas y utilizadas son la ecuación de Peng-Robinson (PR) y la ecuación de Redlich-Kwong-Soave (RKS). Hasta ahora no se ha encontrado ninguna ecuación de estado que prediga correctamente el comportamiento de todas las sustancias en todas las condiciones.
- Además de predecir el comportamiento de gases y líquidos, también hay ecuaciones de estado que predicen el volumen de los sólidos, incluyendo la transición de los sólidos entre los diferentes estados cristalinos.

Entre las ecuaciones de estado más empleadas sobresalen las ecuaciones cúbicas de estado. De ellas, las más conocidas y utilizadas son las ecuaciones de Peng-Robinson y la ecuación de Redlich-Kwong.

2.4.1. ECUACIÓN REDLICH-KWONG (RK)

Esta ecuación de origen semi empírico que predice tres raíces para el volumen. La expresión de esta ecuación es:

$$P = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a}{T^{1/2}\bar{V}(\bar{V} + b)} \quad (2)$$



Donde a y b son las constantes de Redlich-Kwong; a representa las fuerzas atractivas y b las fuerzas repulsivas.

Los valores de las constantes son:

$$a = 0.42748 \frac{R^2 T_c^{5/2}}{P_c} \quad (3)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (4)$$

Introducida en 1949, la ecuación de Redlich-Kwong fue una mejora considerable sobre las otras ecuaciones de la época. Aún goza de bastante interés debido a su expresión relativamente simple. Aunque es mejor que la ecuación de Van Der Waals, no da buenos resultados sobre la fase líquida y por ello no puede usarse para calcular precisamente los equilibrios líquido-vapor. Sin embargo, puede usarse conjuntamente con expresiones concretas para la fase líquida en tal caso. La ecuación de Redlich-Kwong es adecuada para calcular las propiedades de la fase gaseosa cuando el cociente entre la presión y la presión crítica es menor que la mitad del cociente entre la temperatura y la temperatura crítica.

2.4.2. ECUACIÓN SOAVE-REDLICH-KWONG (SRK)

La ecuación de SRK fue la primera modificación de la forma simple de la ecuación de Redlich-Kwong donde el parámetro a fue hecho dependiente de la temperatura de modo que la curva de presión de vapor pueda ser reproducida correctamente. La ecuación de estado requiere del ingreso de tres parámetros por compuesto puro: T_c , P_c y ω .

La forma explícita de la ecuación es:

$$P = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a(T, \omega)}{\bar{V}(\bar{V} + b)} \quad (5)$$

Los valores de las constantes son:

$$a(T, \omega) = a_c \alpha \quad (6)$$

$$\alpha = [1 + (1 - Tr^{0.5})(0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)]^2 \quad (7)$$



$$Tr = \frac{T}{T_c} \quad (8)$$

$$a_c = \frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c} \quad (9)$$

$$b = \frac{0.08664RT_c}{P_c} \quad (10)$$

La ecuación SRK original puede usarse para hidrocarburos y gases livianos a presión atmosférica o superior. Los valores obtenidos para distintas propiedades termodinámicas son razonablemente precisos para su uso ingenieril, por lo que goza de una amplia aceptación en el campo de la simulación de procesos.

2.5. MÉTODOS APROXIMADOS PARA SEPARACIONES EN MULTIPLE ETAPA DE SISTEMAS MULTICOMPONENTE

En el diseño de cualquier columna de destilación es importante conocer, por lo menos, dos cosas. Una de ellas es el número de platos que se requieren para la separación cuando no se retira producto de la columna. Esta es la condición de reflujo total. La otra cuestión es la relación de reflujo mínima que se puede utilizar para conseguir la separación deseada. Mientras que este caso requiere el mínimo consumo de calor, la altura de la columna necesaria se hace infinita. Es evidente que todos los demás casos prácticos de operación estarán comprendidos entre estas dos condiciones.

En la Figura 1 se muestra un algoritmo del método empírico para una columna de destilación. Este método se conoce habitualmente con el nombre de método de Fenske-Underwood-Gilliland, que son los autores de tres importantes etapas del procedimiento.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

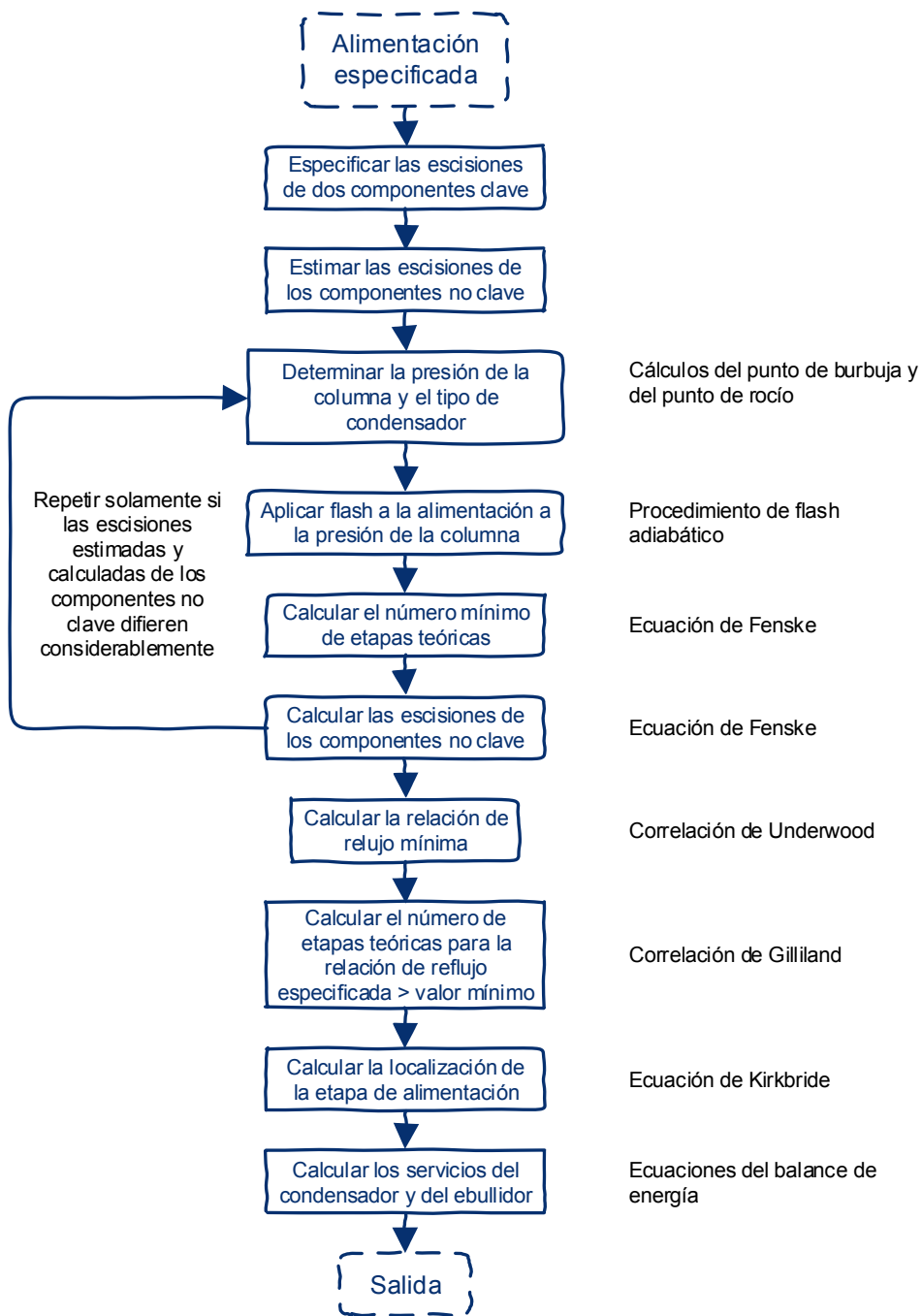


Figura 1 Algoritmo para destilación de sistemas multicomponentes por el método FUG.

2.5.1. DETERMINACIÓN DE LA PRESIÓN DE LA COLUMNA Y EL TIPO DE CONDENSADOR

A continuación se muestra el algoritmo para determinar la presión y el tipo de condensador a utilizar.

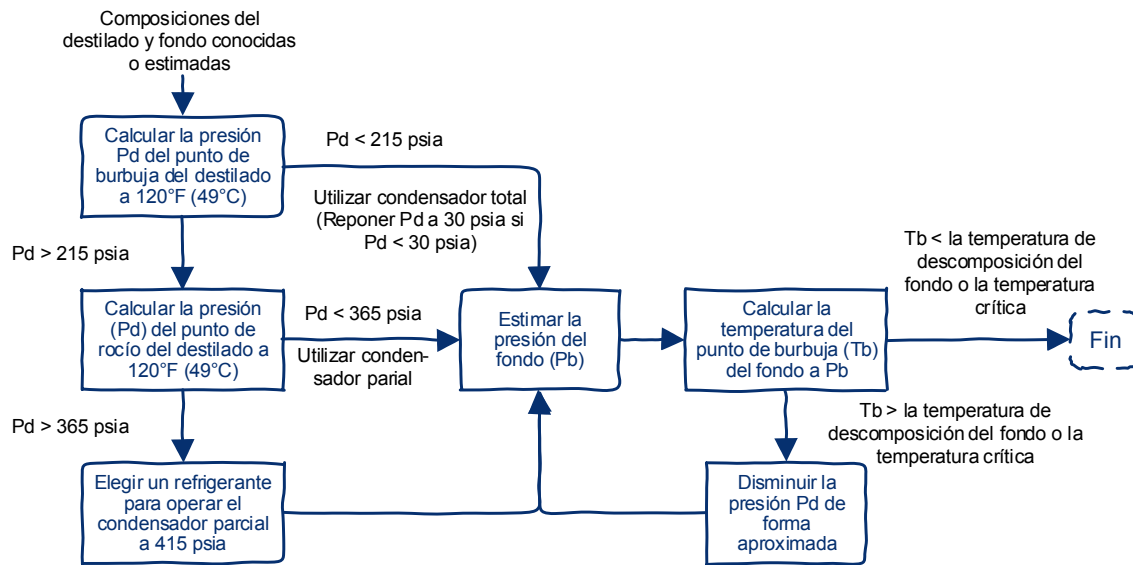


Figura 2 Algoritmo para establecer la presión de la columna de destilación y el tipo de condensador.

Se supone que las caídas de presión en la columna y en el condensador son de 5 psia. Sin embargo, cuando se conozca el número de platos necesarios se realizarán cálculos más refinados para permitir, por lo menos, una caída de presión de 0.1 psi/plato para operación de la columna a presión atmosférica o super atmosférica, y 0.05 psi/plato para operación de la columna a vacío, con una caída de presión en el condensador de 5 a 2 psia. La temperatura en el fondo de la columna no debe dar lugar a descomposición del producto de fondos ni estar próxima a las condiciones críticas. Para presiones del tanque de reflujo de hasta 215 psia se utiliza un condensador total, mientras que entre 215 y 365 psia se utiliza un condensador parcial. Si la presión supera 365 psia, se utiliza un refrigerante para el condensador del domo.

La alimentación puede someterse a una operación adiabática de flash para una presión del plato de alimentación de $P_D + 7.5 \text{ psia}$ con el fin de determinar la condición física de la alimentación.

2.5.2. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR EL NÚMERO MÍNIMO DE ETAPAS TEÓRICAS

El número mínimo de etapas de equilibrio se obtiene cuando la columna proporciona la separación deseada en condiciones de reflujo total. La deducción exacta para el número mínimo de etapas requiere sólo la utilización del valor de la



constante de equilibrio (K) y la consideración de igualdad de fracciones molares entre las etapas. Para operación en estado estacionario, la entrada de calor en el rehervidor y la salida en el condensador son iguales (suponiendo que no hay pérdidas de calor) y, según el balance de materia, las corrientes de vapor y líquido que se cruzan entre dos etapas tienen los mismos caudales y composiciones. Sin embargo, los caudales de vapor y líquido variarán de una etapa a otra, a no ser que se cumpla la condición de flujo molar constante.

Para el componente i de la etapa N (última etapa = rehervidor)

$$y_{i,N} = K_{i,N}x_{i,N} \quad (11)$$

Y para las corrientes que se cruzan entre etapas

$$y_{i,j} = x_{i,j-1} \quad (12)$$

Luego

$$x_{i,N-1} = K_{i,N}x_{i,N} \quad (13)$$

Análogamente, para la etapa $N-1$

$$y_{i,N-1} = K_{i,N-1}x_{i,N-1} = K_{i,N}K_{i,N-1}x_{i,N} \quad (14)$$

Y en general

$$y_{i,1} = K_{i,N}K_{i,N-1} \dots K_{i,2}K_{i,1}x_{i,N} \quad (15)$$

Siendo la etapa 1 la primer etapa de la columna (en el domo), sin contar el condensador. Planteando la expresión análoga para el componente j y dividiendo una por otra

$$\frac{y_{i,1}}{y_{j,1}} = \alpha_{ij,N}\alpha_{ij,N-1} \dots \alpha_{ij,2}\alpha_{ij,1} \left(\frac{X_{i,N}}{X_{j,N}} \right) \quad (16)$$

O bien

$$\left(\frac{X_{i,0}}{X_{i,N}} \right) \left(\frac{X_{j,N}}{X_{j,0}} \right) = \prod_{k=1}^{N_{min}} \alpha_{ij,k} \quad (17)$$



Aunque la ecuación (17) es exacta, no se suele utilizar en la práctica ya que es preciso conocer las condiciones de cada etapa para calcular la serie de volatilidades relativas. Sin embargo, si la volatilidad relativa es constante

$$\left(\frac{x_{i,0}}{x_{i,N}}\right)\left(\frac{x_{j,N}}{x_{j,0}}\right) = \alpha_{ij}^{N_{min}} \quad (18)$$

Y

$$N_{min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{i,0}}{x_{i,N}}\right)\left(\frac{x_{j,N}}{x_{j,0}}\right)\right]}{\log(\alpha_{ij})_m} \quad (19)$$

La ecuación (19) es la ecuación de Fenske. Para el cálculo del número mínimo de etapas, la ecuación de Fenske se aplica haciendo i igual al LK y j igual al HK. Así, puede verse que la influencia de los componentes no clave sobre el valor del número mínimo de etapas de equilibrio sólo se debe a su efecto sobre el valor de la volatilidad relativa de los componentes clave. Si se tiene en cuenta que para la deducción de la ecuación (19) se ha numerado la columna de fondo a domo y que N es el valor asignado al rehervidor y 1 al primer plato de la columna, se puede concluir que el valor de N_{min} calculado incluye las etapas teóricas más el rehervidor, pero no el condensador, que sería la etapa 0. Sin embargo, cuando el condensador es total, la composición del reflujo y la del destilado coinciden, $x_{0i} = x_D$, y la ecuación de Fenske suele formularse de forma que relaciona las composiciones de los componentes clave en el destilado (x_D) y en el residuo (x_B) ecuación (20). Si el condensador es parcial, se puede mantener la misma formulación de la ecuación de Fenske dada por la ecuación 20, pero ahora teniendo en cuenta que el que ahora es el número de etapas calculado sí incluye al condensador parcial, que se trata como una etapa de equilibrio más. $(\alpha_{ij})_m$ representa un valor medio de la volatilidad en la columna:

$$N_{min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{i,D}}{x_{i,N}}\right)\left(\frac{x_{j,N}}{x_{j,D}}\right)\right]}{\log(\alpha_{ij})_m} \quad (20)$$

Una expresión alternativa para la ecuación de Fenske se obtiene multiplicando y dividiendo el producto de las relaciones de fracciones molares en el destilado y en



el residuo por los flujos de destilado y de residuo, para obtener las relaciones equivalentes en función de los flujos de componentes i y j en el destilado y en el fondo. Para el cálculo de la volatilidad relativa media se utiliza la media geométrica de los valores correspondientes en las etapas de domo y fondo

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{d_i}{d_j} \right) \left(\frac{b_j}{b_i} \right) \right]}{\log(\alpha_{ij})_m} \quad (21)$$

Por lo tanto, el número mínimo de etapas de equilibrio depende del grado de separación de los dos componentes clave y de su volatilidad relativa, pero es independiente de la condición física de la alimentación.

La aplicación de la ecuación de Fenske requiere haber realizado previamente el balance preliminar de materia, con el fin de disponer de las composiciones del destilado y del fondo y poder realizar el cálculo de las volatilidades a la temperatura de rocío del destilado y de burbuja del fondo. Si, una vez realizada la comprobación del balance preliminar de materia se observaran discrepancias muy grandes con los valores supuestos, se debe repetir el cálculo.

Como ya se ha dicho, a la hora de calcular la volatilidad relativa media, se utiliza la media geométrica entre los valores correspondientes a:

- *La volatilidad del destilado a la temperatura de rocío del destilado.* Si el condensador es parcial, esta temperatura es la temperatura del condensador, que se encuentra incluido en el valor calculado para $N_{mín}$. Si el condensador es total, esta temperatura es la de la primera etapa de la columna, de la que se obtiene el vapor con la misma composición que el destilado; en este caso, el valor de $N_{mín}$ calculado abarca hasta la primera etapa de la columna y no incluye el condensador total.
- *La volatilidad del fondo a la temperatura de burbuja del fondo.* Que es la temperatura en la caldera, que sí se encuentra contabilizada en $N_{mín}$.

Cuando hay diferencias considerables entre la volatilidad en el domo y en la base de la columna no es adecuado utilizar la volatilidad relativa media en la ecuación de Fenske. En estos casos, se puede calcular el número mínimo de etapas en



cada sector, utilizando la ecuación de Fenske con la composición de la alimentación para la base del sector de enriquecimiento y para la cabeza del sector de agotamiento, y evaluando por separado la volatilidad relativa media en cada sector.

2.5.3. ECUACIÓN DE FENSKE PARA CALCULAR LAS ESCISIONES DE LOS COMPONENTES NO CLAVE.

La comprobación del balance preliminar de materia se lleva a cabo mediante la comparación con la distribución que se obtiene para los componentes no clave a reflujo total, ya que ésta proporciona una buena estimación de la separación que se obtendrá para la columna operando a una razón de reflujo finita, comprendida entre el reflujo total y el reflujo mínimo.

Resulta evidente que la distribución de los componentes clave entre el destilado y el residuo ha de ser la misma independientemente de las condiciones de operación de la columna ya que se trata de una especificación del problema. Sin embargo, la distribución de componentes no clave varía dependiendo de que la columna opere a reflujo total, a reflujo mínimo o a reflujo intermedio. Una vez que se conoce N_{\min} , la ecuación de Fenske permite calcular las fracciones molares x_0 y x_N para todos los componentes no clave. Como ya se ha dicho, estos valores proporcionan una primera aproximación a la distribución real de los productos cuando se utiliza un número de etapas superior al mínimo y, obviamente, permiten calcular las temperaturas de las etapas de domo y de fondo, que deberán compararse con los valores estimados utilizados para el cálculo de las volatilidades en la ecuación de Fenske.

Sea i un componente no clave y j el componente HK, y haciendo $j=r$

$$\left(\frac{d_i}{b_i}\right) = \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{\min}} \quad (22)$$

Y sustituyendo $f_i = d_i + b_i$

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{\min}}} \quad (23)$$

O bien



$$d_i = \frac{f_i \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{min}}}{1 + \left(\frac{d_r}{b_r}\right) (\alpha_{ir})_m^{N_{min}}} \quad (24)$$

Que dan la distribución de los componentes no clave a reflujo total de acuerdo con la ecuación de Fenske.

Estas composiciones calculadas para el destilado y el fondo a reflujo total deben compararse con las procedentes del balance preliminar de materia que han servido para iniciar los cálculos, permitiendo así el cálculo de la volatilidad relativa media necesaria para aplicar la ecuación de Fenske. En caso de que se observen discrepancias considerables, deberá reconsiderarse el balance preliminar de materia y repetirse el cálculo de $N_{mín}$ y, si es necesario, también de la presión de operación.

2.5.4. CORRELACIÓN DE UNDERWOOD

El reflujo mínimo puede calcularse por métodos gráficos, por métodos aproximados o por métodos rigurosos. Los métodos gráficos, estrictamente, sólo son válidos para mezclas binarias. La mayoría de los métodos gráficos y aproximados dan buenos resultados si se puede aplicar la suposición de flujo molar constante, o si el método se corrige incluyendo los balances de energía. Sin embargo, la mayoría de los simuladores comerciales no tienen en cuenta dicha corrección y las predicciones suelen no ser adecuadas. Los métodos rigurosos predicen el reflujo mínimo con precisión, pero son tediosos y dan muchos problemas de convergencia. Un método sencillo para calcular el reflujo mínimo puede consistir en una extrapolación en la representación gráfica del número de etapas teóricas frente a la razón de reflujo.

El cálculo riguroso del reflujo mínimo requiere realizar cálculos etapa a etapa desde el domo y el fondo de la columna hasta la etapa de alimentación, hasta no encontrar cambios en la composición del líquido al pasar de una etapa a otra. Para ello se requiere conocer la composición del destilado y la del fondo, lo que a su vez implica tener que realizar una suposición acerca de la distribución de productos entre el domo y el fondo. Esta distribución puede estimarse, pero es muy difícil de establecer exactamente para una alimentación dada y para una



cierta separación entre componentes claves, por lo que aun tratándose de métodos rigurosos, los resultados seguirán siendo aproximados. Para una distribución de componentes calculada o supuesta, se puede utilizar el siguiente procedimiento:

1. Se supone una razón de reflujo externo mínima, y se calcula la razón de reflujo interno mínima para cada sector de la columna.
2. Se calcula la temperatura de rocío del vapor que sale de la etapa 1.
3. Se calcula la composición del líquido que sale de la etapa 1 (equilibrio).
4. Se calcula la composición del vapor que sale de la etapa 2 (balance de materia)
5. Se continúa de esta manera, repitiendo los cálculos etapa a etapa, hasta que no se observe cambio en la temperatura o en la composición al cambiar de etapa.
6. Se calcula la temperatura de burbuja del fondo y la composición del vapor en equilibrio.
7. Se repiten los cálculos etapa a etapa desde el fondo de la columna, hasta no encontrar cambios en la temperatura o en la composición de las corrientes al pasar de una etapa a otra.
8. Se añade trazas de los componentes LLK a la composición del punto de contacto o infinidad inferior (donde se acumulan las etapas de composición constante) y se continúa hasta la etapa de alimentación (donde las composiciones del alimento coinciden esencialmente con las obtenidas en el cálculo etapa a etapa).
9. Se continúa con el cálculo etapa a etapa hasta que los componentes HHK prácticamente hayan desaparecido.
10. Se comparan las composiciones obtenidas en el paso 9 con las procedentes del cálculo etapa a etapa comenzando en la etapa 1. Si son iguales, el reflujo mínimo supuesto era correcto. En caso contrario, se supone un nuevo reflujo mínimo y se repite todo el cálculo.

Este procedimiento, que se suele calificar como riguroso, sigue siendo aproximado ya que no tiene en cuenta los balances de entalpía en cada etapa. Sin embargo,



aunque éstos sí se considerarán, los resultados seguirían sin ser exactos debido a la incertidumbre asociada con el cálculo de la entalpía de una mezcla multicomponente y también con el hecho de que los cálculos se inician a partir de una composición del producto supuesta.

Shiras, Hanson y Gibson clasifican los sistemas multicomponentes atendiendo a que tengan una clase 1 o una clase 2 que corresponden a las zonas en la columna donde se acumulan las etapas de composición constante, denominadas puntos de contacto o de infinitud, zonas de conjunción o zonas de tangencia (en inglés, pinch point).

Son sistemas de clase 1 las mezclas binarias y las mezclas multicomponentes en las que todos los componentes están repartidos a lo largo de toda la columna. La zona de contacto aparece en las etapas adyacentes a la etapa de alimentación, salvo en casos similares al que se da en mezclas binarias no ideales en las que la recta operativa que determina el reflujo mínimo sea una tangente a la curva de equilibrio. En este caso, la zona de composición constante aparece en el sector en el que se encuentre dicho punto de tangencia. Los sistemas de clase 2 son aquellos en los que hay componentes no repartidos. Si hay componentes LLK no distribuidos, aparece una zona de contacto en el sector de agotamiento, separada de la etapa de alimentación, y las etapas comprendido entre la alimentación y la zona de contacto sirven para eliminar los componentes ligeros que no aparecen en el fondo. Si hay componentes HHK no distribuidos, aparece una zona de contacto en el sector de enriquecimiento, y las etapas entre la etapa de alimentación y la zona de contacto sirven para eliminar los componentes pesados que no aparecen en el destilado. Ocurrirán separaciones de clase 1 en el caso de mezclas con un estrecho margen de temperaturas de ebullición, o cuando el grado de separación entre los componentes clave no sea muy grande.

❖ PARA SEPARADORES CLASE 1

Una separación de clase 1 es aquella en la que el punto de contacto aparece en una posición adyacente a la etapa de alimentación. Suelen ser separaciones de



clase 1 las separaciones de mezclas binarias y las separaciones multicomponentes donde todos los componentes se encuentran repartidos.

Sea el caso general de un punto de contacto en la etapa de alimentación. Un balance de componente para todas las etapas entre la zona de contacto y el domo de la columna conduce a:

$$y_{i\infty}V_{\infty} = x_{i\infty}L_{\infty} + x_{iD}D \quad (25)$$

y el balance total

$$V_{\infty} = L_{\infty} + D \quad (26)$$

donde el subíndice ∞ se refiere a las corrientes en la zona de contacto, V y L representan, respectivamente, los flujos de las corrientes de vapor y de líquido y D es el flujo de destilado.

$$\frac{L_{\infty}}{D} = \frac{\left[\frac{x_{iD}}{x_{i\infty}} - (\alpha_{ij})_{\infty} \frac{x_{jD}}{x_{j\infty}} \right]}{(\alpha_{ij})_{\infty} - 1} \quad (27)$$

Para las separaciones de clase 1 puede considerarse que las composiciones de la zona de contacto son idénticas a las de concentraciones en equilibrio con la alimentación, siempre que éste no esté ni sobrecalentado ni subenfriado ya que, en estas condiciones, si sólo hay un punto de contacto, el punto de contacto normalmente aparecerá inmediatamente por encima, inmediatamente por debajo, o inmediatamente por encima y por debajo del piso de alimentación. Por tanto, $x_{i\infty} = x_{iF}$ y la ecuación (27) para LK y HK adquiere la forma:

$$\frac{(L_{\infty})_{min}}{D} = \frac{\left[\frac{x_{LK,D}}{x_{LK,F}} - (\alpha_{LK,HK})_F \frac{x_{HK,D}}{x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \quad (28)$$

O, multiplicando por $\frac{D}{F}$

$$\frac{(L_{\infty})_{min}}{F} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[\frac{Dx_{LK,D}}{L_F x_{LK,F}} - (\alpha_{LK,HK})_F \frac{Dx_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \quad (29)$$

que es la ecuación de Underwood y que también puede aplicarse a los componentes no clave.



Normalmente en una columna de destilación hay dos puntos de conjunción, uno en la zona de enriquecimiento y otro en la de agotamiento y la composición en cada uno de ellos puede ser muy diferente de la alimentación. Sin embargo, puede calcularse un valor muy aproximado de la razón de reflujo mínima haciendo la suposición anterior.

Como puede verse, para aplicar la ecuación de Underwood se necesita la volatilidad relativa correspondiente a la alimentación y al destilado: se requerirá el cálculo de la temperatura de ebullición de la alimentación y a partir de esta temperatura y estimando la presión de la etapa de alimentación, se calcularán K_i , K_j y α_{ij} .

Para una separación especificada de los dos componentes clave, la distribución de los no clave a reflujo mínimo, para separaciones de clase 1, se obtiene combinando (29) con una ecuación análoga para el componente i:

$$\frac{(L_\infty)_{min}}{F} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[\frac{Dx_{i,D}}{L_F x_{i,F}} - (\alpha_{i,HK})_F \frac{Dx_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right]}{(\alpha_{i,HK})_F - 1} \quad (30)$$

Y, despejando, se llega a:

$$\frac{Dx_{iD}}{L_F x_{iF}} = \left[\frac{(\alpha_{i,HK})_F - 1}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \right] \left(\frac{Dx_{LK,D}}{L_F x_{LK,F}} \right) + \left[\frac{(\alpha_{LK,HK})_F - (\alpha_{i,HK})_F}{(\alpha_{LK,HK})_F - 1} \right] \left(\frac{Dx_{HK,D}}{L_F x_{HK,F}} \right) \quad (31)$$

Ecuación que da la distribución de componentes no clave en condiciones de reflujo mínimo.

Para una separación de clase 1:

$$0 < \left(\frac{Dx_{iD}}{F x_{iF}} \right) < 1 \quad (32)$$

Para todos los componentes no clave ya que, como ya se ha dicho, todos los componentes se encuentran repartidos.

❖ PARA SEPARADORES CLASE 2

En la separaciones de clase 2 hay componentes no repartidos, es decir, que solo aparecen en el destilado o en el fondo. Para estas separaciones es también



aplicable la ecuación (29), aunque no se puede utilizar directamente para calcular la relación de reflujo interno mínima ya que los valores de $x_{i\infty}$ no están relacionados de forma sencilla con la composición de la alimentación. Underwood ideó un procedimiento, definiendo para el sector de enriquecimiento la magnitud ϕ :

$$\sum \frac{(\alpha_{ir})_{\infty} x_{iD}}{(\alpha_{ir})_{\infty} - \phi} = 1 + (R_{\infty})_{min} \quad (33)$$

Y para el sector de agotamiento, ϕ :

$$\sum \frac{(\alpha'_{ir})_{\infty} x_{iB}}{(\alpha'_{ir})_{\infty} - \phi} = 1 - (R'_{\infty})_{min} \quad (34)$$

donde $R'_{\infty} = L'_{\infty}/B$, y la hace referencia a condiciones en la zona de contacto en el sector de agotamiento. Se suponen constantes las volatilidades relativas en la sección entre las dos zonas de contacto y que $(R_{\infty})_{min}$ y $(R'_{\infty})_{min}$ están relacionadas por la suposición de flujo molar constante en la región comprendida entre la entrada de la alimentación y el punto de contacto de la sección de rectificación, así como en la región comprendida entre la entrada de la alimentación y el punto de contacto en la sección de agotamiento. Por tanto:

$$(L'_{\infty})_{min} - (L_{\infty}) = \psi F \quad (35)$$

Donde ψ representa la condición térmica de la alimentación.

Underwood demostró que existe, por lo menos, una raíz común, θ ($\theta = \Phi = \Phi'$) entre las ecuaciones (33) y (34), que puede obtenerse resolviendo la siguiente ecuación:

$$\sum \frac{(\alpha_{ir})_{\infty} z_{iF}}{(\alpha_{ir})_{\infty} - \theta} = 1 - \psi \quad (36)$$

Por conveniencia, r se toma como el componente clave pesado, HK. Cuando solamente se distribuyen los dos componentes clave, la raíz ϕ , necesaria para calcular el reflujo mínimo con la ecuación (33) se obtiene resolviendo la ecuación (36) para obtener una solución que cumpla $\alpha_{LK, HK} > \theta > 1$, y se obtiene entonces la relación de reflujo interno $(R_{\infty})_{min}$ sustituyendo el valor obtenido en la ecuación (33):



$$\sum \frac{(\alpha_{ir})_{\infty} x_{iD}}{(\alpha_{ir})_{\infty} - \phi} = 1 + (R_{\infty})_{min} \quad (37)$$

Si se sospecha que hay componentes no clave repartidos, el número de incógnitas en la ecuación (33) aumenta ya que ahora se desconoce, además de $(R_{\infty})_{min}$, el valor de x_{iD} de los componentes no clave repartidos. El problema se resuelve planteando un sistema de ecuaciones, formado por tantas ecuaciones (37) como incógnitas haya, y donde cada ecuación se diferencia del resto únicamente en el valor de la raíz θ utilizada. El número de incógnitas es igual al número de componentes no clave repartidos (x_{iD} desconocidas) más uno ($(R_{\infty})_{min}$), o lo que es lo mismo, al número total de componentes repartidos menos uno (ya que el número total de componentes repartidos es igual al número de componentes no clave repartidos más dos, por los componentes clave, que siempre están repartidos). Por tanto, en este caso, habrá que resolver la ecuación (37) para obtener m soluciones para θ , siendo m el número de componentes distribuidos menos 1. Las soluciones buscadas son las que se encuentran comprendidas entre cada pareja adyacente de volatilidades relativas de componentes repartidos. Con estas m raíces se resuelven simultáneamente las m ecuaciones (37) y se obtiene $(R_{\infty})_{min}$ y los valores desconocidos de las x_{iD} .

La ecuación (36) recibe el nombre de “primera ecuación de Underwood” y permite calcular los valores apropiados de θ , mientras que la ecuación (33) recibe el nombre de “segunda ecuación de Underwood”, y permite calcular el reflujo mínimo.

Las ecuaciones de Underwood para separaciones de clase 2 son ampliamente utilizadas, incluso sin que se llegue a plantear el tipo de separación de que se trata.

Cuando las suposiciones de flujo molar constante no son válidas, el valor obtenido por este procedimiento para el reflujo mínimo puede desviarse mucho del valor real, y cuando las suposiciones del método pueden considerarse aceptables y se obtiene un valor negativo para el reflujo mínimo, debe interpretarse como que la



sección de enriquecimiento no es necesaria para llevar a cabo la separación planteada.

De acuerdo con las ecuaciones de Underwood, el reflujo mínimo depende fundamentalmente de la volatilidad relativa y de la condición térmica de la alimentación, y en menor extensión de la separación entre los componentes clave.

2.5.5. CORRELACIÓN DE GILLILAND

El número de etapas teóricas para llevar a cabo una cierta separación depende de la razón de reflujo de operación. De las infinitas combinaciones posibles, debe elegirse la que haga que el costo total de la destilación sea lo menor posible. La relación de reflujo real se suele expresar como un múltiplo del reflujo mínimo y, en general, el óptimo económico para separaciones que requieren gran número de etapas suele encontrarse en torno a un valor de $R/R_{\text{mín}}$ de aproximadamente 1.10, mientras que aquéllas que requieren pocas etapas se suelen diseñar para valores de $R/R_{\text{mín}}$ de alrededor de 1.50. Para casos intermedios se suelen utilizar valores del orden de $R/R_{\text{mín}} = 1.30$.

La expresión más utilizada para relacionar la razón de reflujo y el número de etapas teóricas es la correlación empírica de Gilliland, que se representa en la Figura 3, y que se obtiene a partir de 61 puntos experimentales que cubren los siguientes intervalos de condiciones:

1. N° de componentes = 4 - 11
2. $\psi = 0.28 - 1.42$
3. Presión = vacío - 600 psia
4. $\alpha_{LK,HK} = 1.1 - 4.05$
5. $R_{\text{mín}} = 0.53 - 9.09$
6. $N_{\text{mín}} = 3.4 - 60$.

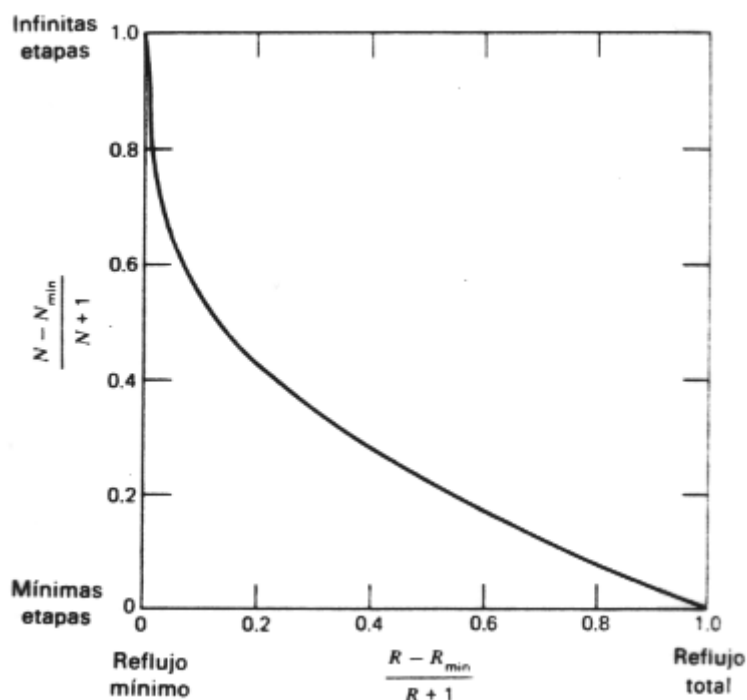


Figura 3 Correlación de Gilliland en coordenadas lineales.

La curva de la Figura 3 ha sido ajustada a la siguiente ecuación, desarrollada por Molokanov y col.:

$$Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left(\frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right] \quad (38)$$

Donde

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (39)$$

Como es usual, el valor de N incluye una etapa para una caldera parcial y una etapa para un condensador parcial.

De acuerdo con la figura 3, un pequeño incremento inicial de R por encima de R_{mín} provoca una gran disminución de N, pero incrementos posteriores ya no tienen tanta influencia sobre el número de etapas. El cambio brusco de pendiente corresponde a la razón de reflujo óptima. En general, la correlación de Gilliland presenta problemas cuando el agotamiento es más importante que la rectificación, debido a que no se tiene en cuenta el flujo de vapor generado en el rehervidor. Por otro lado, esta correlación tampoco tiene en cuenta la condición térmica de la alimentación, y tiende a ser conservadora para alimentaciones con fracciones



líquidas bajas. El efecto de la condición térmica de la alimentación puede llegar a ser importante cuando la volatilidad relativa de LK respecto de HK es alta o cuando la alimentación es pobre en componentes volátiles.

2.5.6. ECUACIÓN DE KIRKBRIDE

Una aproximación razonablemente buena de la localización de la etapa óptima de alimentación puede obtenerse utilizando la ecuación empírica de Kirkbride:

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{z_{HK,F}}{z_{LK,F}} \right) \left(\frac{z_{LK,B}}{z_{HK,D}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} \quad (40)$$

donde N_R y N_S representan, respectivamente, el número de pisos en el sector de enriquecimiento y en el de agotamiento (es decir, $N = N_R + N_S$).

Otra ecuación utilizada con frecuencia es la ecuación de Fenske, que se obtiene cuando se supone que la relación entre el número de etapas por encima y por debajo de la etapa de alimentación es la misma que la determinada por la aplicación de la ecuación de Fenske a ambos sectores por separado (esto no es cierto más que para separaciones y alimentos simétricos):

$$N_{min,S} = \frac{\ln S_s}{\ln \alpha_s} \quad (41)$$

$$S_s = \frac{z_{LK} x_{HK,B}}{z_{HK} x_{LK,B}} \quad (42)$$

Donde α_s es la volatilidad relativa media de LK en la sección inferior de la columna. El número de platos en dicho sector se calcula:

$$\frac{N_S}{N_{min,S}} = \frac{N}{N_{min}}$$

La ecuación de Fenske proporciona resultados no adecuados comparados con los de Kirkbride.

En general, es preferible utilizar la ecuación de Kirkbride ya que, como se ha dicho, la ecuación de Fenske sólo es aplicable para alimentos y separaciones simétricas.



2.5.7. CÁLCULO DE LOS SERVICIOS DEL CONDENSADOR Y EL EBULLIDOR

El flujo de calor en el condensador es calculado por medio de un balance de entalpía aplicado a la etapa del condensador.

$$Q_C = V_1 H_{V1} - D H_D - L_0 H_{L0} \quad (43)$$

A partir de un balance global de entalpía

$$Q_B = D H_D + B H_B + Q_C - F H_F \quad (44)$$

Se obtiene el flujo de calor en la caldera.

2.6. MÉTODOS RIGUROSOS PARA SEPARACIONES MULTICOMPONENTES EN ETAPAS MÚLTIPLES

El diseño de una columna de etapas múltiples para la separación de mezclas multicomponentes requiere una determinación rigurosa de las temperaturas, presiones, flujos de las corrientes, composiciones y rapidez de transferencia de calor para cada etapa. Esta determinación se realiza resolviendo los balances de materia y energía (entalpía), y relaciones de equilibrio para cada etapa.

Cálculos como la densidad, presiones de vapor, entalpías, concentraciones en las fases, etc., requieren disponer de correlaciones exactas para el diseño de equipos de separación multicomponente. Su importancia está bien discutido en la literatura, por ejemplo el efecto del coeficiente de distribución K y de entalpía (H) sobre los requerimientos de calor en el rehervidor (Q_B) y condensador (Q_C) o el efecto de la correlación de la entalpía sobre el consumo de vapor de una columna para separar etano de una mezcla de hidrocarburos.

En el caso del comportamiento termodinámico del equilibrio de fases en un proceso de destilación, su enfoque tradicional ha estado centrado en el uso de correlaciones de la constante de equilibrio K . Sin embargo, este método suele usarse como cálculo preliminar sobre todo cuando la presión tiende a aumentar o cuando los componentes tienen una marcada diferencia en su estructura química.

En la Figura 4 se encuentra representado el esquema de general de una etapa de equilibrio.

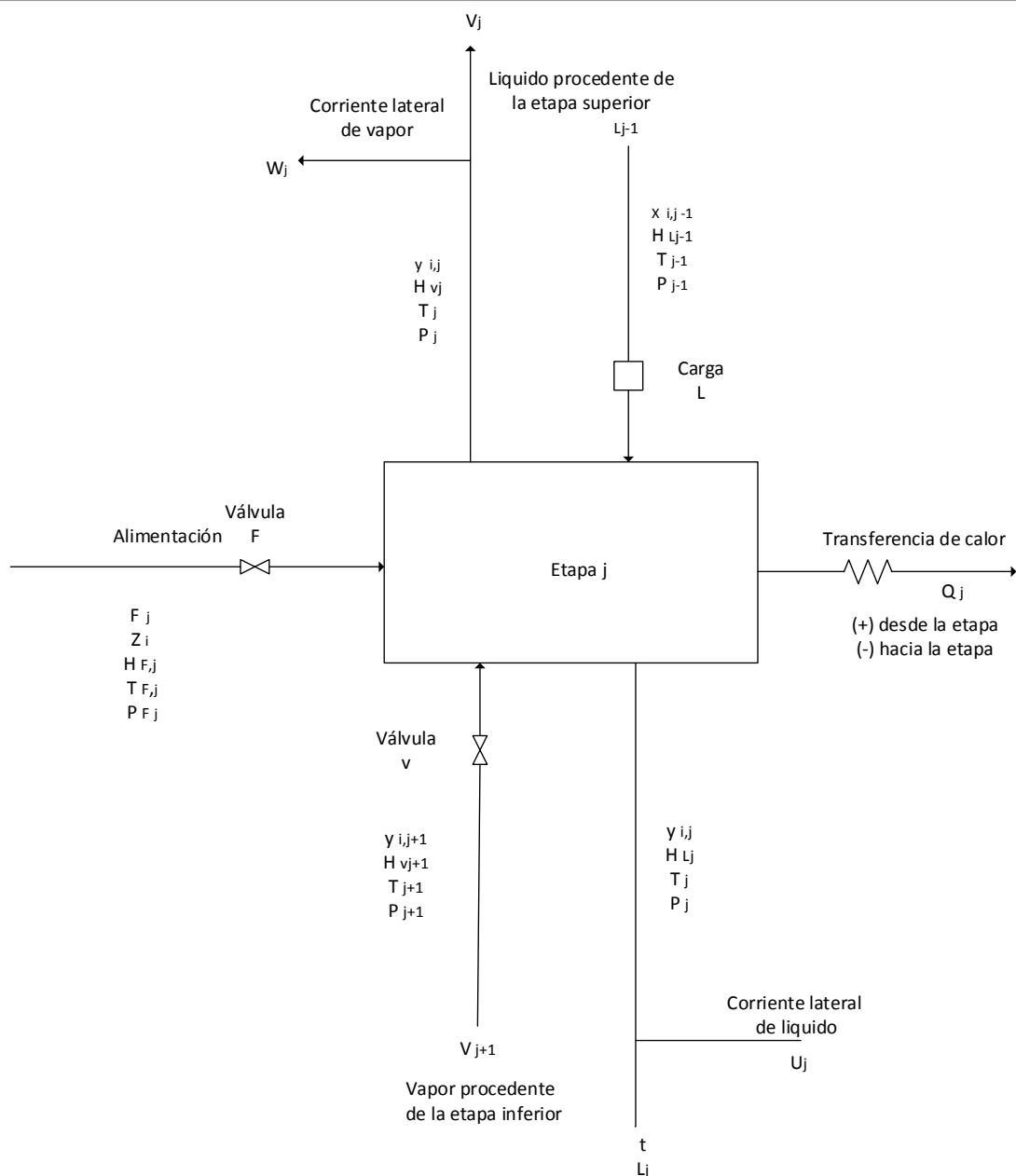


Figura 4 Etapa General de Equilibrio

2.6.1. ECUACIONES MESH

La solución de un problema de separación con múltiples etapas requiere de balances de masa, balances de energía y condiciones adecuadas de equilibrio en cada etapa del proceso. Las ecuaciones simples son a menudo básicas, pero la operación en contracorriente interconecta todas las etapas, originando un sistema de ecuaciones simultáneas no lineales.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

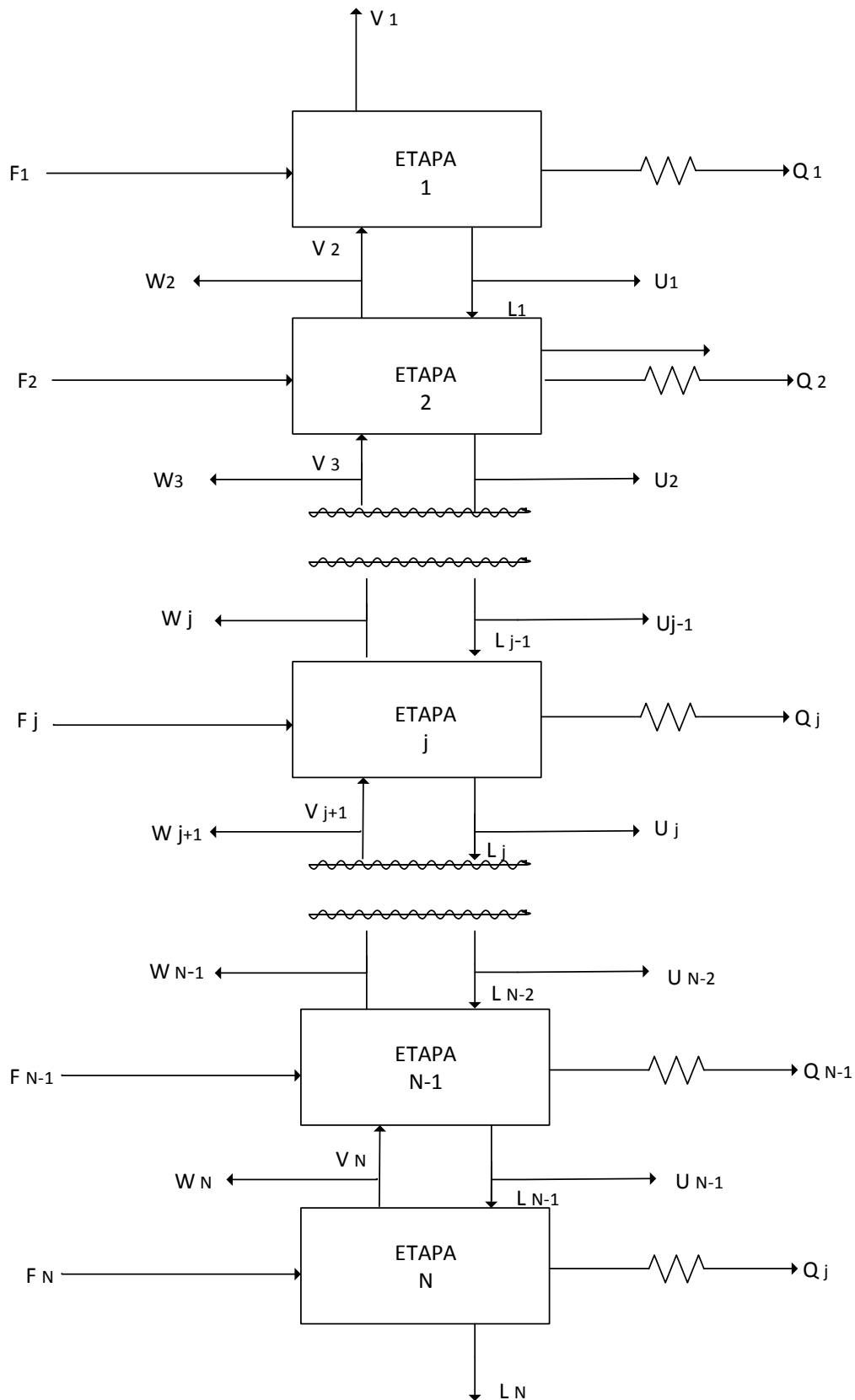


Figura 5 Representación Esquemática de un Proceso en Contracorriente de N Etapas



Para un sistema con N etapas (Figura 5) y C componentes, las expresiones matemáticas que describen los procesos de separación en contracorriente y múltiple etapa son derivados del balance de materia y de energía alrededor del plato j del modelo (Figura 4).

1. Ecuaciones M. balances de materia para cada componente (C ecuaciones para cada etapa).

$$M_{i,j} = V_{j+1}y_{i,j+1} + L_{j-1}x_{i,j-1} - (V_j + W_j)y_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} + F_jz_{ij} = 0 \quad (45)$$

2. Ecuaciones E. Relaciones de equilibrio entre fases para cada componente (C ecuaciones para cada etapa).

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (46)$$

3. Ecuaciones S. Suma de las fracciones molares (una para cada etapa).

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (47)$$

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (48)$$

4. Ecuación H. Balance de energía (uno para cada etapa).

$$H_j = V_{j+1}H_{j+1} + L_{j-1}h_{j-1} - (V_j + W_j)H_j - (L_j + U_j)h_j + F_jH_{F_j} + Q_j = 0 \quad (49)$$

Donde se ignoran las variaciones de energía cinética y potencial.

Estas ecuaciones son convencionalmente llamadas como ecuaciones MESH.

En lugar de (47) y (48) se puede utilizar una ecuación para el balance de materia total. Se obtiene combinando estas dos ecuaciones y $\sum z_{i,j} = 1$ con (45) sumado para los C componentes y a lo largo de las etapas 1 a j para dar:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (50)$$



2.6.2. ALGORITMO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL

Frecuentemente, los sistemas de ecuaciones que resultan al aplicar los métodos componente a componente suelen dar lugar a una matriz de coeficientes en forma de matriz tridiagonal, y se resuelven mediante un método de eliminación progresiva que recibe el nombre de algoritmo de Thomas.

Si se modifican las ecuaciones MESH de forma que en las ecuaciones M se sustituyen los y_{ij} por $K_{ij}x_{ij}$ y los L_j por su valor en función de W_j , U_j y V_j dado por el balance global de materia, se puede obtener la siguiente ecuación para cada componente y etapa, donde se ha omitido el subíndice i para los términos B, C y D:

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad (51)$$

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \quad 2 \leq j \leq N \quad (52)$$

$$B_j = - \left[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) K_{ij} \right] \quad 1 \leq j \leq N \quad (53)$$

$$C_j = V_{j+1} K_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N - 1 \quad (54)$$

$$D_j = -F_j z_{ij} \quad 1 \leq j \leq N \quad (55)$$

Con $x_{i0} = 0$, $V_{N+1} = 0$, $W_1 = 0$ y $U_N = 0$.

Si las ecuaciones M modificadas (51) se agrupan por componentes, pueden escribirse como una serie de c sistemas de ecuaciones, uno para cada componente, en los que las matrices de coeficientes son matrices tridiagonales y donde la variable de salida para cada sistema es la composición x_i para ese componente en toda la cascada en contracorriente de N etapas:



$$\begin{bmatrix}
 B_1 & C_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & & & \dots & 0 \\
 A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \dots & \dots & & & \dots & 0 \\
 0 & A_1 & B_3 & 0 & \dots & \dots & & & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & & & & & & & \dots & \\
 \dots & \dots & & & & & & & \dots & \\
 \dots & & & & & & & & \dots & \\
 \dots & & & & & & & & \dots & \\
 \dots & & & & & & & & \dots & \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 X_1 \\
 X_2 \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 X_N
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 D_1 \\
 D_2 \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 D_N
 \end{bmatrix}
 \quad (56)$$

Si se dispone de los valores de los coeficientes A_j , B_j , C_j y D_j en cada etapa, la resolución de los c sistemas de ecuaciones proporcionará el perfil de composición del líquido en la columna. Mientras que las D_j pueden calcularse a partir de las especificaciones del problema, los coeficientes A_j , B_j y C_j para cada componente pueden evaluarse si se conoce –porque se ha supuesto o bien porque se ha calculado en una iteración previa- el perfil de temperatura, de constantes de equilibrio y de caudales de vapor en la columna. En el caso en que los valores de las constantes de equilibrio, K_{ij} , fueran independientes de la composición, el cálculo se simplificaría ya que entonces el cálculo de los coeficientes B_j y C_j dependería exclusivamente de las variantes de tanteo T_j y V_j , eliminándose de esta manera en el cálculo de los coeficientes la dependencia de la composición.

2.6.3. MÉTODO DEL PUNTO DE BURBUJA (BP) PARA DESTILACIÓN

Es un procedimiento de resolución particularmente efectivo en el caso en que las especies de la mezcla a separar presenten un intervalo estrecho de volatilidades. Fue propuesto por Friday y Smith y desarrollado por Wang y Henke. Se denomina método del punto de burbuja (BP) debido a que en cada iteración se calcula un nuevo conjunto de temperaturas de las etapas a partir de las ecuaciones del punto de burbuja. Las ecuaciones se separan y se resuelven en forma secuencial, excepto las ecuaciones M modificadas, que se resuelven para cada componente por el método de la matriz tridiagonal. El algoritmo de cálculo se muestra en la Figura 6.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

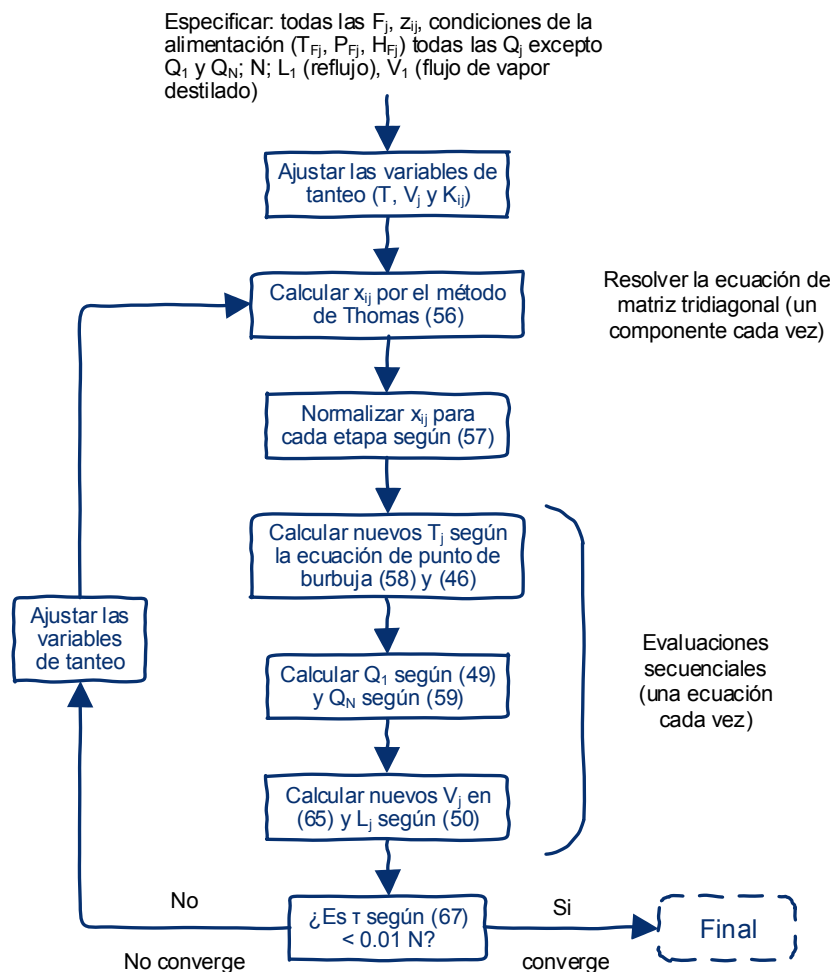


Figura 6 Algoritmo del método Punto de Burbuja (BP)

Para iniciar los cálculos se asignan valores a las variables de tanteo. En la mayoría de los problemas es suficiente con establecer un conjunto inicial de valores V_j basados en la suposición de flujos molares constantes entre etapas, utilizando los flujos de destilado, alimentación, reflujo y corrientes laterales especificadas. Por lo general, se puede obtener un conjunto inicial adecuado de valores de T_j calculando y suponiendo tanto la temperatura de burbuja de un producto de fondo estimado, como la temperatura de rocío de un producto de vapor destilado (o en general, calculando o suponiendo la temperatura del destilado en la condición térmica impuesta por el tipo de condensador) y procediendo después a determinar la temperatura del resto de las etapas admitiendo una variación lineal de la temperatura a lo largo de la columna.



Para obtener x_i a partir de (56) por el método de Thomas se precisan los valores de K_{ij} . Por tanto, cuando éstos dependen de la composición, se necesitan también suposiciones iniciales para todos los x_{ij} e y_{ij} , a no ser que se utilicen en la primera iteración los valores ideales de las K_{ij} . Para cada iteración, el conjunto de valores calculados x_{ij} de cada etapa, por lo general, no satisface la restricción impuesta por las ecuaciones S y es aconsejable normalizar el conjunto de valores calculados x_{ij} mediante:

$$(x_{ij})_{normalizado} = \frac{x_{ij}}{\sum_{i=1}^c x_{ij}} \quad (57)$$

La ecuación necesaria del punto de burbuja se obtiene mediante la combinación de (46) y (47) para eliminar y_{ij} dando:

$$\sum_{i=1}^c K_{i,j} x_{i,j} - 1 = 0 \quad (58)$$

La energía eliminada en el condensador es una cantidad positiva que se obtiene de (49). El servicio del ebullición es una cantidad que se determina sumando (49) en todas las etapas para dar:

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j H_{F_j} - U_j H_{L_j} - W_j H_{V_j}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 H_{V_1} - L_N H_{L_N} \quad (59)$$

Se calcula entonces un nuevo conjunto de variables de tanteo, V_j , mediante la aplicación del siguiente balance de energía modificado, obtenido por combinación de (49) y (50) dos veces para eliminar L_{j-1} y L_j . una vez reordenando:

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j \quad (60)$$

donde:

$$\alpha_j = H_{L_{j-1}} - H_{V_j} \quad (61)$$

$$\beta_j = H_{V_{j+1}} - H_{L_j} \quad (62)$$



$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] (H_{L_j} - H_{L_{j-1}}) + F_j (H_{L_j} - H_{F_j}) + W_j (H_{V_j} - H_{L_j}) + Q_j \quad (63)$$

y las entalpias se evalúan para las últimas temperaturas calculadas para cada etapa en vez de las utilizadas al iniciar la iteración. La ecuación (60) escrita en forma de matriz didiagonal, aplicada a las etapas comprendidas entre 2 y N-1 es:

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \alpha_{N-3} & \beta_{N-3} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \alpha_{N-2} & \beta_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \\ V_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_2 - \alpha_2 V_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \gamma_{N-3} \\ \gamma_{N-2} \\ \gamma_{N-1} \end{bmatrix} \quad (64)$$

que se resuelve de forma inmediata, comenzando por la ecuación superior donde V_2 es conocida, y operando hacia abajo en la misma forma, apoyándose en los resultados anteriores. Esto es:

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad (65)$$

Se considera que el método ha convergido cuando los conjuntos de valores de T_j y de V_j obtenidos se encuentran dentro de un margen preestablecido de tolerancia. Un posible criterio es el siguiente:

$$\sum_{j=1}^N \left[\frac{T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{T_j^{(k)}} \right]^2 + \sum_{j=1}^N \left[\frac{V_j^{(k)} - V_j^{(k-1)}}{V_j^{(k)}} \right]^2 \leq \varepsilon \quad (66)$$

Donde k es el índice de iteración. Wang y Henke sugieren el siguiente criterio basado exclusivamente en los sucesivos valores de T :



$$\tau = \sum_{j=1}^N (T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)})^2 \leq 0.01N \quad (67)$$

La velocidad de convergencia del método BP es impredecible y también suele utilizarse junto con el método θ de convergencia, mostrado en la Figura 7.

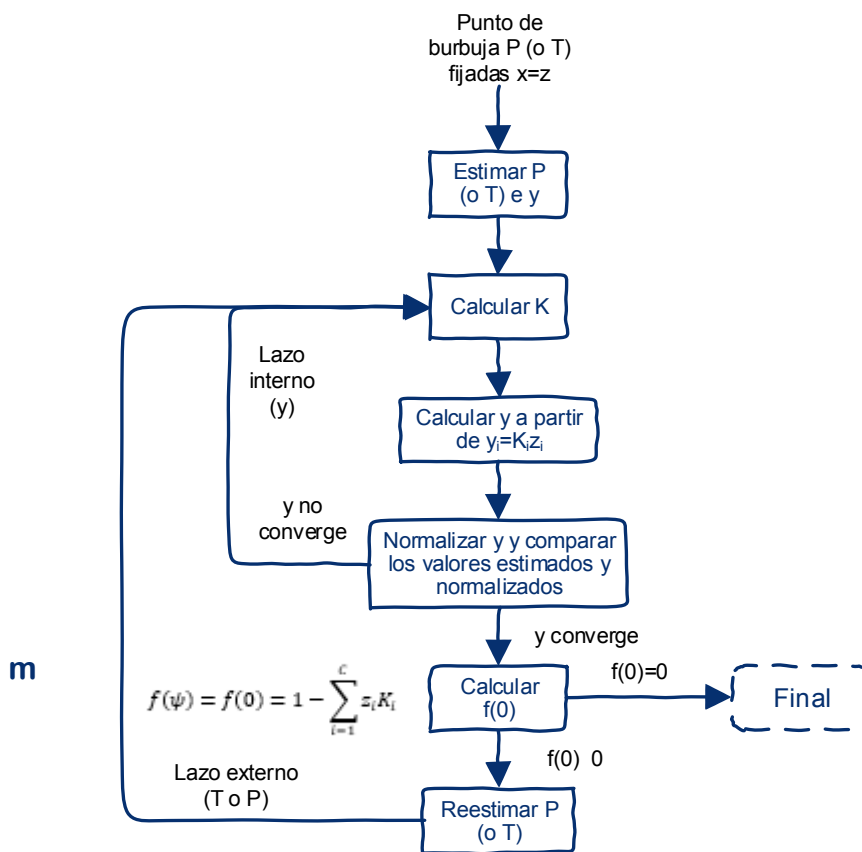


Figura 7 Algoritmo para calcular el Punto de Burbuja



CAPÍTULO 3: DESARROLLO Y RESULTADOS

3.1. COMPOSICIÓN DE LA GASOLINA Y ESPECIFICACIONES

La composición del reformado es la siguiente:

Tabla 2 Composición del reformado, 24-08-2012

COMPUESTO	% MOL
<i>Aromáticos</i>	59
<i>Olefinas</i>	0.7
<i>Benceno</i>	2
<i>Parafinas</i>	12
<i>Isoparafinas</i>	25
<i>Naftenos</i>	1.7

Para efectos del diseño se tomaron las siguientes consideraciones respecto a los compuestos.

Tabla 3 Composición Gasolina para Cálculo

COMPUESTOS DEL REFORMADO	COMPUESTOS PARA CÁLCULO	% MOL
<i>Aromáticos</i>	Tolueno	19
	Xileno	35
	Etilbenceno	5
<i>Olefinas</i>	Hepteno	0.3
<i>Benceno</i>	Benceno	2
<i>Parafinas</i>	Hexano	6
	Octano	6
	Isopentano	5
<i>Isoparafinas</i>	Isohexano	10
	Isoctano	10
	<i>Nafteno</i>	Ciclohexano
	TOTAL	100

La temperatura de alimentación es de 38 °C y la presión es de 1 atm.



3.2. DISEÑO DE PRELIMINAR DE LA COLUMNA

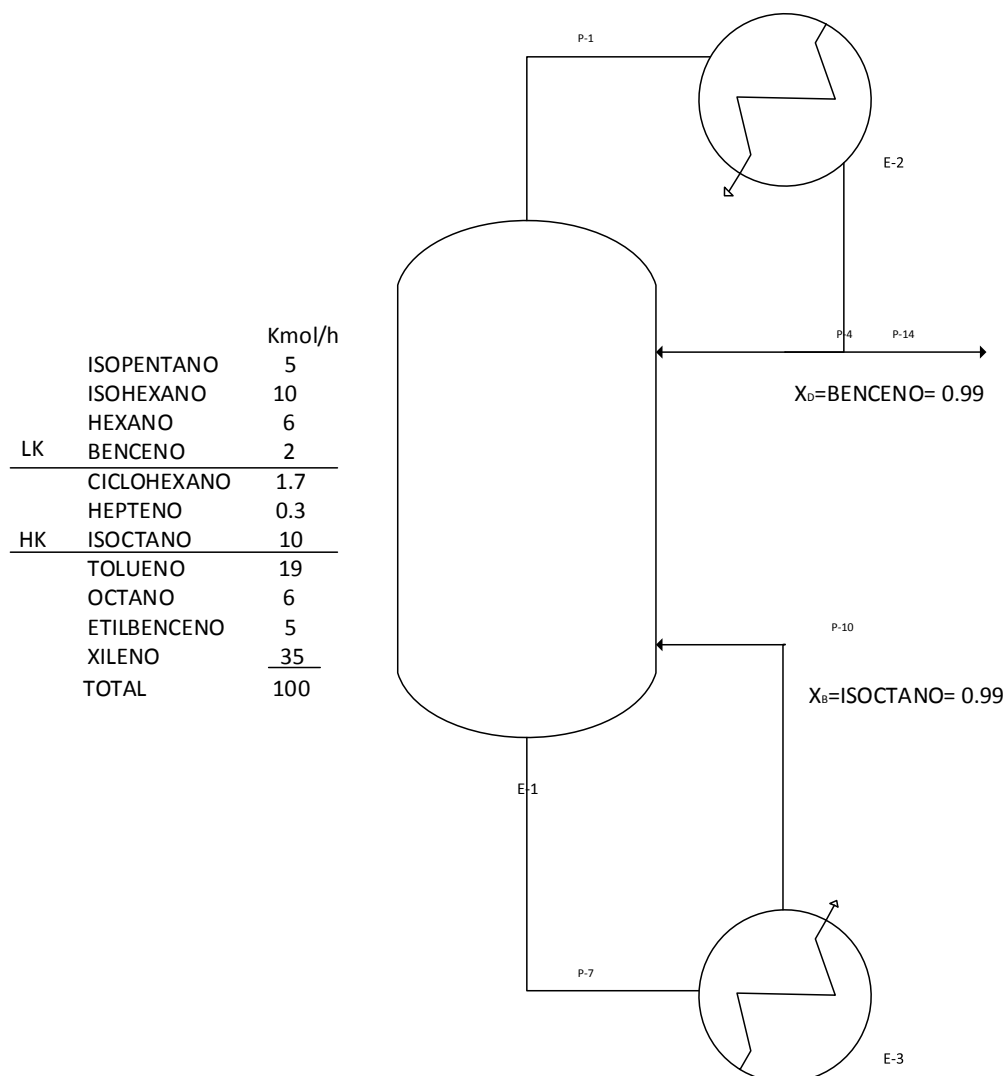


Figura 8 Especificaciones para el Método FUG

Para iniciar con los cálculos y tomando en cuenta que queremos obtener la mayor cantidad de benceno se estableció que este será el componente clave ligero y de manera aleatoria se escogió al isoctano como el componente clave pesado, a su vez se estableció que se obtendría en el domo el 99 % de benceno alimentado y en el fondo el 99% de isoctano alimentado. Con estas afirmaciones se procede a realizar el balance de materia.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 4 Balance de Materia Preliminar

		Kmol/hr			% MOL		
COMPONENTE	ALIMENTACIÓN	DESTILADO	FONDO	Z	X _D	X _B	
1	Isopentano	5	5	0	0.05	0.1993	0
2	Isohexano	10	10	0	0.1	0.3987	0
3	Hexano	6	6	0	0.06	0.2392	0
4	Benceno	2	1.98	0.02	0.02	0.079	0.0002
5	Ciclohexano	1.7	1.7	0	0.017	0.0678	0
6	Hepteno	0.3	0.3	0	0.003	0.0119	0
7	Isoctano	10	0.1	9.9	0.1	0.004	0.1321
8	Tolueno	19	0	19	0.19	0	0.2536
9	Octano	6	0	6	0.06	0	0.0801
10	Etilbenceno	5	0	5	0.05	0	0.0667
11	Xileno	35	0	35	0.35	0	0.4672
TOTAL		100	25.08	74.92	1	1	1

Se calcula la presión del domo P_D del punto de burbuja a una temperatura de 120 °F (49 °C) utilizando las composiciones obtenidas del balance.

Siguiendo el algoritmo de la Figura 7 se hizo una hoja de cálculo en Excel con lo que se obtuvieron los siguientes resultados, mostrados en la Figura 9.

$$P_D = 666.6402 \text{ mmHg}$$

COMP.	Tb [K]	Pc [atm]	Tc [K]	ω	A	B	C	α	β	γ	δ	Hv [KJ/mol]	HI [KJ/mol]	
isopentano	301	33,4	460,4	0,227	15,6338	2348,67	-40,05	-2,275	0,121	-0,00006519	1,367E-08	-153,7	-178,2	
isohexano	333,4	29,7	497,5	0,279	15,7476	2614,38	-46,58	-2,524	0,1477	-0,00008533	1,931E-08	-174,3	-204,3	
hexano	341,9	29,3	507,4	0,296	15,8366	2697,55	-48,78	-1,054	0,139	-0,00007449	1,551E-08	-167,1	-198,7	
benceno	353,3	48,3	562,1	0,2116	15,9008	2788,51	-52,36	-8,101	0,1133	-0,00007206	1,703E-08	82,93	49	
ciclohexano	353,7	40,2	553,4	0,203	15,7527	2766,63	-50,3	-13,027	0,146	-0,00006027	3,156E-09	-124,6	-157,7	
hepteno	366,8	28	537,2	0,358	15,8894	2895,51	-53,97	-0,789	0,1504	-0,00008388	1,817E-08	-63	-97,7	
isooctano	372,4	25,3	543,9	0,303	15,685	2896,28	-52,41	-1,782	0,1858	-0,0001024	2,191E-08	-224,1	-259,3	
tolueno	383,8	40,6	591,7	0,2415	16,0137	3096,52	-53,67	-5,817	0,1224	-0,00006525	1,173E-08	50,1	12	
octano	398,8	24,5	568,8	0,394	15,9426	3120,29	-63,63	-1,456	0,1842	-0,0001002	2,115E-08	-208,7	-250,3	
etilbenceno	409,3	35,6	617,1	0,301	16,0195	3279,47	-59,55	-10,294	0,1689	-0,0001149	3,107E-08	29,8	-12,5	
xileno	412,3	35	617	0,3086	16,139	3366,99	-58,04	-6,966	0,1504	-0,0000895	2,025E-08	17,2	-25,4	
				1551,44521	1939,30651	2068,59361								
Tb [K]	R [atm cm ³ /mol K]	R [J/mol K]	P [mmHg]	P atm	R [atm L/mol K]	R [cal/mol K]	To	Hv mezcla		HI mezcla				
322,15	82,05606	8,314	666,640295	8,7715828	0,082	1,987	298,15	-35048,8318		-41432,03				
Comp.	x _i	Tr	(m ³ /kg)	(ln U) ¹	v _{IL} (cm ³ /mol)	v _i (cm ³ /mol)	Φ _i	λ _i (J/mol)	δ _i (J/cm ³) ^{0.5}	γ _i	P ^o _i (mm Hg)	K _i	y _i	Σ y
isopentano	0,1993	0,69971764	-2,11738928	-0,52542432	120,8175857	129,0564703	0,18657681	23199,2407	13,0326572	1,03858254	1492,391793	2,325050058	0,463382476	1
isohexano	0,3987	0,64753769	-2,16093651	-0,52775448	136,6839288		0,42226385	28099,0872	13,6375168	1,00411127	523,442903	0,788423565	0,314344475	
hexano	0,2392	0,63490343	-2,17072082	-0,52818505	138,6636489		0,25700645	29542,9598	13,9190282	0,99751992	391,0511455	0,585145106	0,139966709	
benceno	0,079	0,57311866	-2,21374111	-0,53224835	93,25018251		0,05708171	31823,2348	17,6789427	1,53779537	261,1111524	0,602327108	0,047583842	
ciclohexano	0,0678	0,58212866	-2,20797076	-0,53127734	111,4745911		0,05856333	30788,3347	15,879701	1,15131934	263,9220607	0,455805891	0,030903639	
hepteno	0,0119	0,59968354	-2,1962399	-0,52985098	144,8417942		0,01335553	34401,0172	14,7991872	1,03033962	162,7979484	0,251615718	0,002994227	
isooctano	0,004	0,59229638	-2,20125604	-0,53038431	166,2347913		0,00515231	33269,2581	13,5654807	0,9757385	140,8502702	0,206157703	0,000824631	
tolueno	0	0,5444482	-2,23105322	-0,53671604	112,839247		0	35456,8123	17,0437111	1,47451587	88,25037543	0,19519759	0	
octano	0	0,56636779	-2,21795717	-0,5331011	168,0496422		0	38846,5102	14,670482	0,99232082	48,0758265	0,071562796	0	
etilbenceno	0	0,52203857	-2,24362995	-0,54189963	128,1685736		0	40047,4651	17,0751922	1,58431887	34,15942245	0,081182338	0	
xileno	0	0,52212318	-2,24358375	-0,54187713	129,8158098		0	40343,1015	17,0334935	1,57400736	29,68262475	0,070083777	0	
											0,9999			1

Figura 9 Presión del condensador hoja de cálculo

Como la presión del condensador es menor a 30 psia se fija P_D=30 psia y se utiliza un condensador total. Por lo que la presión del rehervidor P_B=40 psia; con esta



**DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS**

presión y la composición del destilado calculada en el balance de materia se calcula la temperatura del fondo (T_B) utilizando el algoritmo de punto de burbuja.

Por lo tanto:

$$T_B = 430.9842 \text{ K}$$

5	Tb [K]	R [atm]	r [J/mol K]	P [mmHg]	T _B	R [atm L/mol]	R [cal/mol K]	To	Hv mezcla		Hl mezcla					
	430.984234	82.05606	8.314	2068.59361	2.7218337	0.082	1.987	298.15		-8890.02844		-11256.4055				
8	Comp	x _i	Tr	(ln U) ₀	(ln U) ₁	v _{IL} (cm ³ /mol)	v _L (cm ³ /mol)	Φ _i	λ _i (J/mol)	δ _i (J/cm ³) ^{0.5}	γ _i	P ^s (mm Hg)	K _i	y _i	Σ y	
9	isopentano	0	0.93610824	-1.7956601	-0.49388705	167.8666626	153.8257322	0	12949.7939	7.46979269	5.00851017	15153.10657	36.68893105	0	1	
0	isohexano	0	0.86629997	-1.93822092	-0.50846717	171.7032887		0	19412.5909	9.6015811	1.94234129	7680.794304	7.212012962	0		
1	hexano	0	0.84939739	-1.96218793	-0.51029032	171.7226949		0	21047.9186	10.0847912	1.65192595	6494.586357	5.186410573	0		
2	bencono	0.0002	0.76673943	-2.05506735	-0.51941287	109.5822893		0.00014248	25339.4691	14.090357	0.96621951	5094.678419	2.379673649	0.000475935		
3	ciclohexano	0	0.77879334	-2.04302362	-0.51806186	131.8185775		0	24236.2243	12.5170932	1.0137554	4842.47267	2.373149957	0		
4	hepteno	0	0.80227892	-2.01847931	-0.51538925	173.9173116		0	26175.5578	11.3974933	1.19188446	3674.940044	2.117430859	0		
5	isooctano	0.1321	0.79239609	-2.02900631	-0.51651226	198.3145016		0.17030535	25676.8022	10.5549456	1.48365014	3085.61342	2.213083696	0.292348356		
6	tolueno	0.2536	0.72838302	-2.09158975	-0.52326762	130.1484177		0.21456513	29136.671	14.0121726	1.00313091	2457.646638	1.191795867	0.302239432		
7	octano	0.0801	0.75770787	-2.06389496	-0.52039471	197.0244756		0.10259441	30959.2837	11.7876042	1.10451915	1717.535874	0.917072957	0.073457544		
8	etilbencono	0.0667	0.69840258	-2.118543	-0.52550605	145.9651353		0.06329159	33553.4222	14.3291488	1.03914786	1326.490886	0.666356194	0.044445958		
9	xileno	0.4672	0.69851578	-2.1184438	-0.52549908	147.8666445		0.44910104	33790.2495	14.2928562	1.03727369	1225.20983	0.614368097	0.287032775		
0		0.9999												1		

Figura 10 Temperatura de Fondo Hoja de Calculo

De las Figuras 9 y 10 se obtienen los valores de K_D y K_B para los cálculos de las α 's.

Tabla 5 Valores de K_D y K_B

COMPONENTE	K_D	K_B
1 Isopentano	0.9991	36.6889
2 Isohexano	0.3388	7.212
3 Hexano	0.2514	5.1864
4 Bencono	0.2588	2.3797
5 Ciclohexano	0.1959	2.3731
6 Hepteno	0.1081	2.1174
7 Isooctano	0.0886	2.2131
8 Tolueno	0.0839	1.1918
9 Octano	0.0307	0.9171
10 Etilbencono	0.0349	0.6664
11 Xileno	0.0301	0.6144

Se procede a calcular las $(\alpha_{ij})_m$ con la siguiente ecuación:

$$(\alpha_{ir})_m = \sqrt{\left(\frac{K_{Di}}{K_{Dr}}\right)\left(\frac{K_{Bi}}{K_{Br}}\right)} \tag{68}$$

r=isooctano



Tabla 6 Valores Medios de Volatilidades

$(\alpha_{i,r})_m$	Valor
$(\alpha_{1,7})_m$	13.6727
$(\alpha_{2,7})_m$	3.5301
$(\alpha_{3,7})_m$	2.5787
$(\alpha_{4,7})_m$	1.7722
$(\alpha_{5,7})_m$	1.5397
$(\alpha_{6,7})_m$	1.0804
$(\alpha_{7,8})_m$	0.7141
$(\alpha_{7,9})_m$	0.3789
$(\alpha_{7,10})_m$	0.3444
$(\alpha_{7,11})_m$	0.3071

Utilizando la ecuación (21) y tomando el valor medio de la volatilidad de los componentes clave ligero (benceno) y clave pesado (isooctano) $(\alpha_{4,7})_m = 1.7722$; se calcula el número mínimo de etapas (N_{min}).

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{1.98}{0.1} \right) \left(\frac{9.9}{0.02} \right) \right]}{\log(1.7722)} = \boxed{16.0606 \text{ etapas}}$$

Con el N_{min} se procede a calcular la distribución de los componentes no clave en la columna.

Para la distribución de los componentes no clave en el destilado se utiliza la ecuación (24) con lo que se obtienen los siguientes resultados:

$$d_1 = \frac{5 \text{ Kmol/hr} \left(\frac{0.1 \text{ Kmol/hr}}{9.9 \text{ Kmol/hr}} \right) (13.6727)^{16.0606}}{1 + \left(\frac{0.1 \text{ Kmol/hr}}{9.9 \text{ Kmol/hr}} \right) (13.6727)^{16.0606}} = 5 \text{ Kmol/hr}$$



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 7 Distribución de los Componentes no Clave en el Destilado

COMPONENTE	d_i [Kmol/hr]	
1	Isopentano	5
2	Isohexano	9.9999
3	Hexano	5.9998
5	Ciclohexano	1.5501
6	Hepteno	0.0101
8	Tolueno	0.0008
9	Octano	0
10	Etilbenceno	0
11	Xileno	0

Para la distribución de los componentes no clave en el fondo se utiliza la ecuación (23) con lo que se obtienen los siguientes resultados:

$$b_1 = \frac{5 \text{ Kmol/hr}}{1 + \left(\frac{0.1 \text{ Kmol/hr}}{9.9 \text{ Kmol/hr}}\right) (13.6727)^{16.0606}} = 0 \text{ Kmol/hr}$$

Tabla 8 Distribución de los Componente no Clave en el Fondo

COMPONENTE	b_i [Kmol/hr]	
1	Isopentano	0
2	Isohexano	0.0001
3	Hexano	0.0002
5	Ciclohexano	0.1499
6	Hepteno	0.2899
8	Tolueno	18.9992
9	Octano	6
10	Etilbenceno	5
11	Xileno	35

Como la diferencia entre el balance preliminar y el balance real es muy pequeño se considera que las presiones y temperaturas en domo y fondo son correctas por lo que el balance de materia queda de la siguiente manera:



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 9 Balance de Materia en el Domo y Fondo

COMPONENTE	DESTILADO [Kmol/hr]	FONDO [Kmol/hr]	X _D % mol	X _B % mol	
1	Isopentano	5	0	0.2029	0
2	Isohexano	9.9999	0.0001	0.4058	0.000001
3	Hexano	5.9998	0.0002	0.2435	0.000002
4	Benceno	1.98	0.02	0.0803	0.000265
5	Ciclohexano	1.5501	0.1499	0.0629	0.001989
6	Hepteno	0.0101	0.2899	0.0004	0.003847
7	Isocetano	0.1	9.9	0.004	0.131371
8	Tolueno	0.0008	18.9992	0.00003	0.252114
9	Octano	0	6	0	0.079618
10	Etilbenceno	0	5	0	0.066348
11	Xileno	0	35	0	0.464441
Total	24.6407	75.3593	1	1	

Utilizando la ecuación de Underwood (36) se calcula el valor de ϕ . Como la alimentación es líquido saturado se considera $\psi=1$.

$$\frac{(13.6727)(5)}{13.6727 - \phi} + \frac{(3.5301)(10)}{3.5301 - \phi} + \frac{(2.5787)(6)}{2.5787 - \phi} + \frac{(1.7722)(2)}{1.7722 - \phi} + \frac{(1.5397)(1.7)}{1.5397 - \phi} + \frac{(1.0804)(0.3)}{1.0804 - \phi} + \frac{(1)(10)}{1 - \phi} + \frac{(0.7141)(19)}{0.7141 - \phi} + \frac{(0.3789)(6)}{0.3789 - \phi} + \frac{(0.3444)(5)}{0.3444 - \phi} + \frac{(0.3071)(35)}{0.3071 - \phi} = 0$$

El valor de ϕ se obtuvo utilizando la función solver de Excel (Figura 11) y el resultado obtenido es el siguiente:

	alpha	F	xd	ϕ	x	
1	13.6727	5	0.20289	f(x)	0.00085441	
2	3.5301	10	0.4058	f(x) ²	7.3001E-07	
3	2.5787	6	0.2435			
4	1.7722	2	0.0803			
5	1.5397	1.7	0.0629			
6	1.0804	0.3	0.0004			
7	0.9999999	10	0.004			
8	0.7141	19	0.00003			
9	0.3789	6	0			
10	0.3444	5	0			
11	0.3071	35	0			

Figura 11 Valor ϕ Solver Excel



$$\phi = 1.6409$$

Con este valor de ϕ obtenido se calcula el reflujo mínimo con la ecuación (37).

$$\begin{aligned} & \frac{(13.6727)(0.2029)}{13.6727 - 1.6409} + \frac{(3.5301)(0.4058)}{3.5301 - 1.6409} + \frac{(2.5787)(0.2435)}{2.5787 - 1.6409} + \frac{(1.7722)(0.0803)}{1.7722 - 1.6409} \\ & + \frac{(1.5397)(0.0629)}{1.5397 - 1.6409} + \frac{(1.0804)(0.0004)}{1.0804 - 1.6409} + \frac{(1)(0.004)}{1 - 1.6409} \\ & + \frac{(0.7141)(0.00003)}{0.7141 - 1.6409} + \frac{(0.3789)(0)}{0.3789 - 1.6409} + \frac{(0.3444)(0)}{0.3444 - 1.6409} \\ & + \frac{(0.3071)(0)}{0.3071 - 1.6409} = 1 + R_{min} \end{aligned}$$

$$1.7787 = 1 + R_{min}$$

Por lo tanto.

$$R_{min} = \boxed{0.7787}$$

Como regla de dedo para el diseño de la columna se utiliza $R=1.3R_{min}$; obteniendo:

$$R = 1.3(0.7787) = \boxed{1.0123}$$

Para calcular el número de etapas teóricas utilizaremos la correlación de Gilliland, se necesita tener el valor de X para poder leer el valor de Y de la Figura 3. De la ecuación (39) obtenemos el valor de X.

$$X = \frac{1.0123 - 0.7787}{1.0123 + 1} = 0.116$$

Ahora se lee el valor de Y en la gráfica:

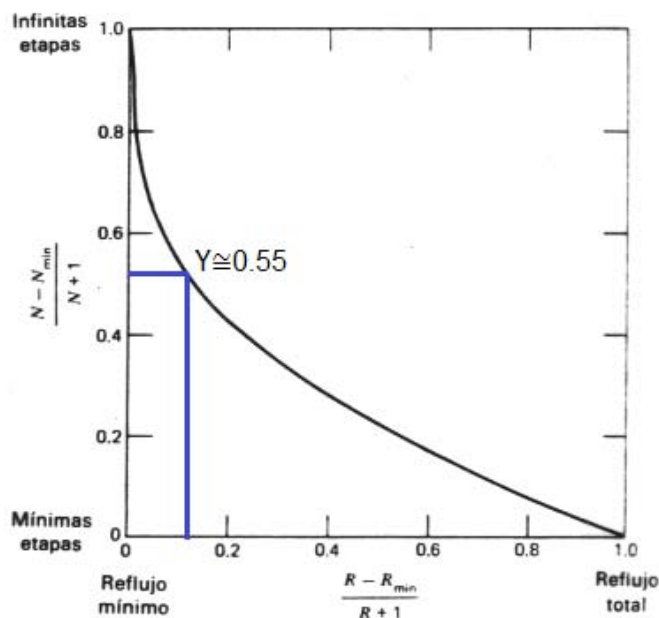


Figura 12 Valor de Y Correlación de Gilliland

De la ecuación (38) se obtiene el valor de etapas teóricas.

$$0.55 = \frac{N - 16.0606}{N + 1}$$

$$0.55N + 0.55 = N - 16.0606$$

$$N = \frac{-16.0606 - 0.55}{0.55 - 1} = 36.9124 \approx \boxed{37 \text{ etapas}}$$

Como se utiliza un condensador total este no está incluido en ese valor por lo que el número de etapas real es $N=38$.

Lo único que falta para tener el diseño preliminar es saber en qué etapa estará la alimentación y para esto utilizamos la ecuación de Kirkbride (40).

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{0.1}{0.02} \right) \left(\frac{0.000265}{0.004} \right)^2 \left(\frac{75.3593}{24.6407} \right) \right]^{0.206}$$

$$N_R = 0.5732N_S$$

Sustituimos N_R en $N=N_R+N_S$

$$N = 0.5732N_S + N_S$$



$$N_S = \frac{38}{1.5732} = 24.1546$$

$$N_R = 38 - 24.1546 = 13.84$$

Por lo tanto la etapa de alimentación es:

$$N_F = \boxed{14}$$

Con estos datos se tiene que el diseño final de la columna es el mostrado en la Figura 13:

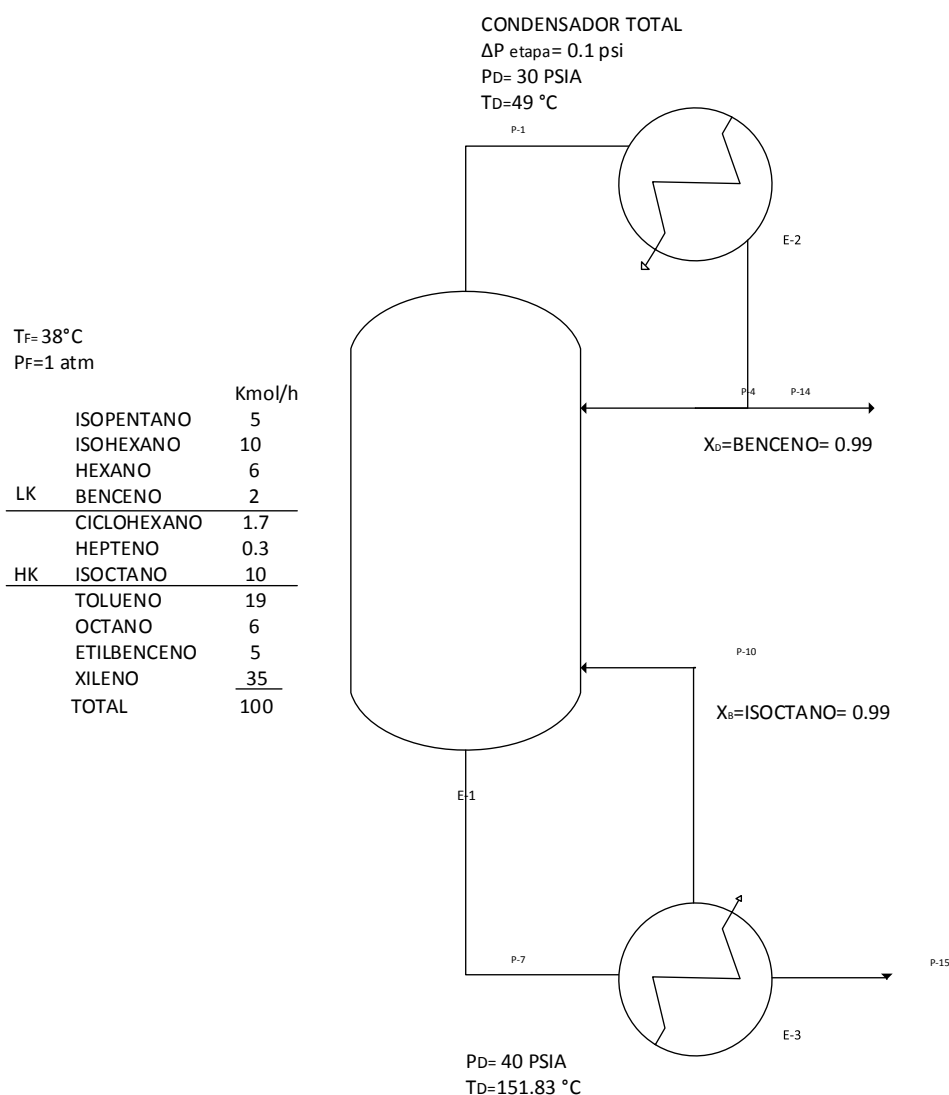


Figura 13 Diseño Preliminar Final de la Columna

3.3. DISEÑO RIGUROSO DE LA COLUMNA

Se utiliza el diseño obtenido con el método FUG para iniciar con los cálculos del método riguroso, en la figura 14 se muestra el diseño de la torre.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

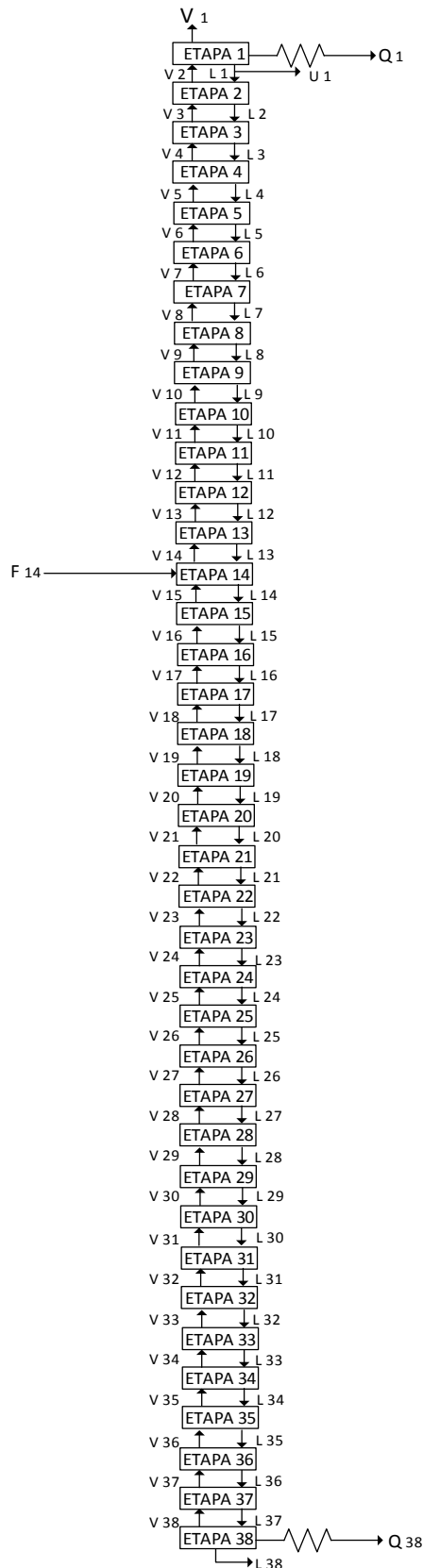


Figura 14 Flujos que Componen la Columna de Destilación



Antes de iniciar con los cálculos se debe realizar el balance en la parte superior de la torre Figura 15 para obtener los valores de L_1 y V_2 .

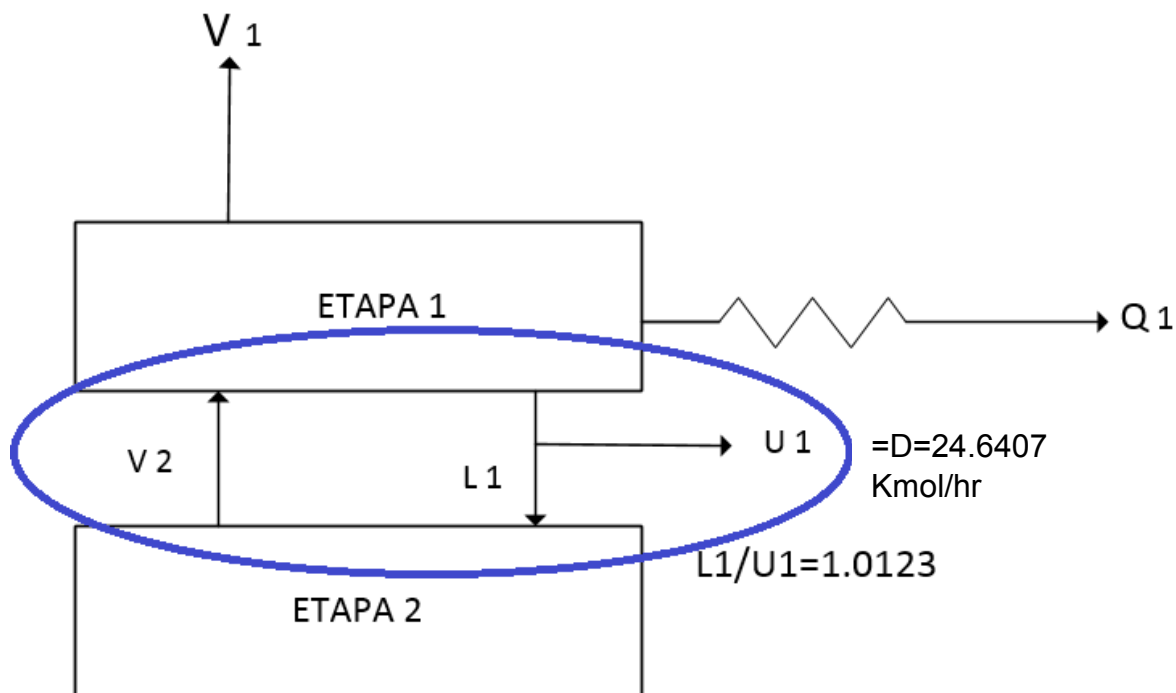


Figura 15 Parte Superior de la Torre

Se realiza el balance de materia del área seleccionada.

$$L_1 = 1.0123(24.6407 \text{ Kmole/hr})$$

$$L_1 = 24.9438 \text{ Kmole/hr}$$

$$V_2 = L_1 + U_1$$

$$V_2 = 24.9438 \text{ Kmole/hr} + 24.6407 \text{ Kmole/hr}$$

$$V_2 = 49.5844 \text{ Kmole/hr}$$

Para la primera iteración se supondrá que el flujo de vapor es constante a lo largo de toda la columna. Para calcular el perfil de temperaturas para cada etapa se tomarán como referencia las temperaturas del domo y el fondo obtenidas por el método FUG.

$$T_D = 322.15 \text{ K}$$

$$T_B = 430.9842 \text{ K}$$



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Teniendo la estimación inicial de la temperatura en el plato 1 y 38 se supuso un comportamiento lineal de las temperaturas a través de toda la columna de la siguiente forma:

$$h = \frac{T_B - T_D}{N - 1} = \frac{430.9842 \text{ K} - 322.15 \text{ K}}{38 - 1} = 2.9414 \text{ K}$$

$$T_j = T_{j-1} + h$$

Se utilizan los datos de V y T de la Tabla 10 para empezar con las iteraciones.

Tabla 10 Valores de V y T iniciales

ETAPA	V [Kmol/hr]	T [K]
1	0	322.15
2	49.5844	325.0914
3	49.5844	328.0328
4	49.5844	330.9742
5	49.5844	333.9156
6	49.5844	336.857
7	49.5844	339.7984
8	49.5844	342.7398
9	49.5844	345.6812
10	49.5844	348.6226
11	49.5844	351.564
12	49.5844	354.5054
13	49.5844	357.4468
14	49.5844	360.3882
15	49.5844	363.3296
16	49.5844	366.271
17	49.5844	369.2124
18	49.5844	372.1538
19	49.5844	375.0952
20	49.5844	378.0366
21	49.5844	380.978
22	49.5844	383.9194
23	49.5844	386.8608
24	49.5844	389.8022
25	49.5844	392.7436
26	49.5844	395.685
27	49.5844	398.6264
28	49.5844	401.5678



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

29	49.5844	404.5092
30	49.5844	407.4506
31	49.5844	410.392
32	49.5844	413.3334
33	49.5844	416.2748
34	49.5844	419.2162
35	49.5844	422.1576
36	49.5844	425.099
37	49.5844	428.0404
38	49.5844	430.9818

Para resolver el método riguroso se utilizaron hojas de cálculo en Excel, se elaboraron 12 iteraciones antes de converger. A continuación se presentan las temperaturas reales en cada plato de la columna:

Tabla 11 Temperaturas Reales a lo Largo de Toda la Columna

ETAPA	T [K]	ETAPA	T [K]
1	351.59625	20	401.989557
2	360.455935	21	403.495412
3	364.533621	22	404.77871
4	367.188704	23	405.878812
5	369.317865	24	406.836273
6	371.075172	25	407.720479
7	372.516172	26	408.554219
8	373.713105	27	409.375868
9	374.776589	28	410.196967
10	375.866655	29	411.022113
11	377.220468	30	411.860276
12	379.222412	31	412.718622
13	382.259188	32	413.612597
14	386.502329	33	414.575644
15	390.417488	34	415.678685
16	393.393777	35	417.06553
17	395.918556	36	419.00916
18	398.196907	37	421.988292
19	400.224769	38	426.66329

Las composiciones obtenidas a lo largo de la columna son las siguientes:



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 12 Composiciones a lo largo de toda la columna

Etapa	% mol [x _i]				
	Isopentano	Isohexano	Hexano	Benceno	Ciclohexano
1	0.414547	0.344272	0.165665	0.045864	0.0194446
2	0.202916	0.405831	0.243449	0.073019	0.0380792
3	0.142793	0.393796	0.262723	0.082877	0.0486315
4	0.129072	0.371221	0.258930	0.084258	0.0530256
5	0.126059	0.352874	0.248676	0.082236	0.0536916
6	0.125296	0.339732	0.238038	0.079185	0.0523230
7	0.125025	0.330523	0.229098	0.076245	0.0501795
8	0.124907	0.324082	0.222208	0.073849	0.0480057
9	0.124894	0.319496	0.217058	0.072056	0.0461260
10	0.125006	0.316075	0.213111	0.070749	0.0445917
11	0.125307	0.313270	0.209790	0.069738	0.0433009
12	0.125927	0.310577	0.206470	0.068799	0.0420676
13	0.126971	0.307528	0.202585	0.067658	0.0406402
14	0.128465	0.303765	0.197722	0.066108	0.0388462
15	0.055377	0.275483	0.218253	0.090723	0.0544082
16	0.022124	0.228370	0.219143	0.114683	0.0719711
17	0.008353	0.177070	0.205055	0.136766	0.0911427
18	0.003008	0.129831	0.180905	0.155405	0.1109820
19	0.001038	0.090592	0.151507	0.169493	0.1300976
20	0.000346	0.060552	0.121303	0.178056	0.1471887
21	0.000111	0.039037	0.093533	0.181027	0.1613374
22	3.53E-05	0.024440	0.069955	0.178952	0.1720877
23	1.09E-05	0.014947	0.051070	0.172699	0.1793243
24	3.32E-06	0.008972	0.036571	0.163052	0.1831134
25	1.00E-06	0.005310	0.025790	0.151124	0.1836917
26	2.99E-07	0.003103	0.017960	0.137690	0.1812161
27	8.84E-08	0.001792	0.012361	0.123357	0.1759142
28	2.59E-08	0.001024	0.008412	0.108631	0.1679734
29	7.55E-09	0.000579	0.005660	0.093998	0.1576538
30	2.18E-09	0.000324	0.003765	0.079835	0.1453059
31	6.25E-10	0.000179	0.002473	0.066478	0.1313354
32	1.78E-10	9.80E-05	0.001602	0.054185	0.1161972
33	5.01E-11	5.28E-05	0.001021	0.043126	0.1003596
34	1.39E-11	2.80E-05	0.000637	0.033385	0.0842624
35	3.83E-12	1.45E-05	0.000386	0.024962	0.0682739
36	1.03E-12	7.19E-06	0.000224	0.017788	0.0526595
37	2.64E-13	3.33E-06	0.000120	0.011746	0.0375907
38	6.05E-14	1.33E-06	5.55E-05	0.006721	0.0232579



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Etapa	% mol [x _i]					
	Hepteno	Isoctano	Tolueno	Octano	Etilbenceno	Xileno
1	0.000561	0.008627	0.001015	3.19E-07	1.99E-08	3.53E-08
2	0.001735	0.030466	0.004498	2.71E-06	1.92E-07	3.82E-07
3	0.002917	0.056350	0.009897	9.76E-06	7.83E-07	1.71E-06
4	0.003914	0.082416	0.017123	2.75E-05	2.54E-06	6.12E-06
5	0.004638	0.105817	0.025911	6.86E-05	7.32E-06	1.94E-05
6	0.005058	0.124268	0.035864	0.000156	1.94E-05	5.69E-05
7	0.005209	0.136731	0.046446	0.000335	4.86E-05	0.000157
8	0.005159	0.143309	0.057263	0.000682	0.000116	0.000414
9	0.004978	0.144706	0.068025	0.001333	0.000268	0.001055
10	0.004716	0.141640	0.078384	0.002508	0.000604	0.002610
11	0.004398	0.134444	0.087642	0.004526	0.001317	0.006263
12	0.004023	0.122884	0.094313	0.007730	0.002764	0.014440
13	0.003574	0.106484	0.095826	0.012127	0.005432	0.031169
14	0.003055	0.085986	0.088949	0.016719	0.009653	0.060725
15	0.003766	0.103028	0.100800	0.019135	0.010828	0.068194
16	0.004524	0.120404	0.111211	0.021308	0.011813	0.074443
17	0.005358	0.138731	0.121179	0.023402	0.012724	0.080215
18	0.006262	0.157801	0.130993	0.025443	0.013600	0.085765
19	0.007200	0.176795	0.140449	0.027391	0.014427	0.091005
20	0.008137	0.194943	0.149313	0.029166	0.015185	0.095805
21	0.009047	0.211791	0.157471	0.030679	0.015864	0.100099
22	0.009916	0.227293	0.164982	0.031949	0.016468	0.103917
23	0.010746	0.241701	0.172049	0.033069	0.017014	0.107366
24	0.011550	0.255886	0.178697	0.034054	0.017523	0.110575
25	0.012319	0.269760	0.185412	0.034964	0.018005	0.113619
26	0.013051	0.283712	0.192344	0.035821	0.018483	0.116616
27	0.013735	0.297770	0.199701	0.036690	0.018975	0.119701
28	0.014347	0.312026	0.207592	0.037601	0.019486	0.122904
29	0.014851	0.326219	0.216179	0.038586	0.020021	0.126249
30	0.015214	0.339904	0.225594	0.039696	0.020586	0.129773
31	0.015394	0.352345	0.236043	0.041011	0.021193	0.133545
32	0.015342	0.362476	0.247817	0.042672	0.021873	0.137734
33	0.015010	0.368766	0.261263	0.044930	0.022698	0.142769
34	0.014342	0.369011	0.276627	0.048206	0.023837	0.149662
35	0.013270	0.359988	0.293584	0.053123	0.025653	0.160742
36	0.011711	0.336981	0.310052	0.060365	0.028917	0.181292
37	0.009566	0.293519	0.319730	0.069960	0.035126	0.222636
38	0.006764	0.222599	0.308110	0.079221	0.046744	0.306522



La Figura 16 esquematiza el comportamiento de la fracción mol de los componentes a través de toda la columna.

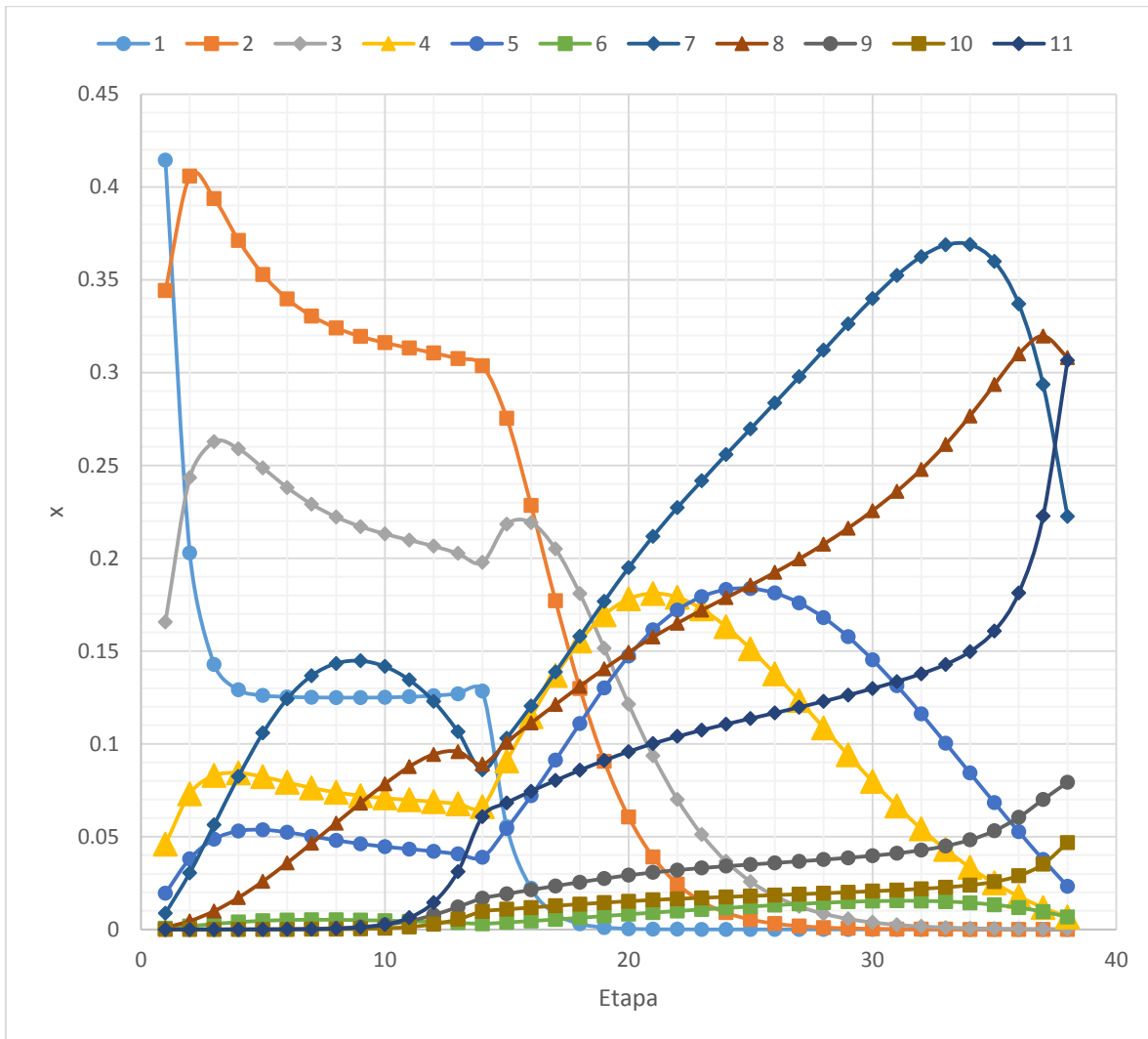


Figura 16 Fracción mol de los componentes en cada plato

Se puede observar en la Figura 16 que la mayor composición de benceno se encuentra en la etapa 21 por lo que ahí sería conveniente colocar la salida lateral.

La Figura 17 presenta el comportamiento de las constantes de equilibrio K a través de todos los platos de la columna diseñada.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

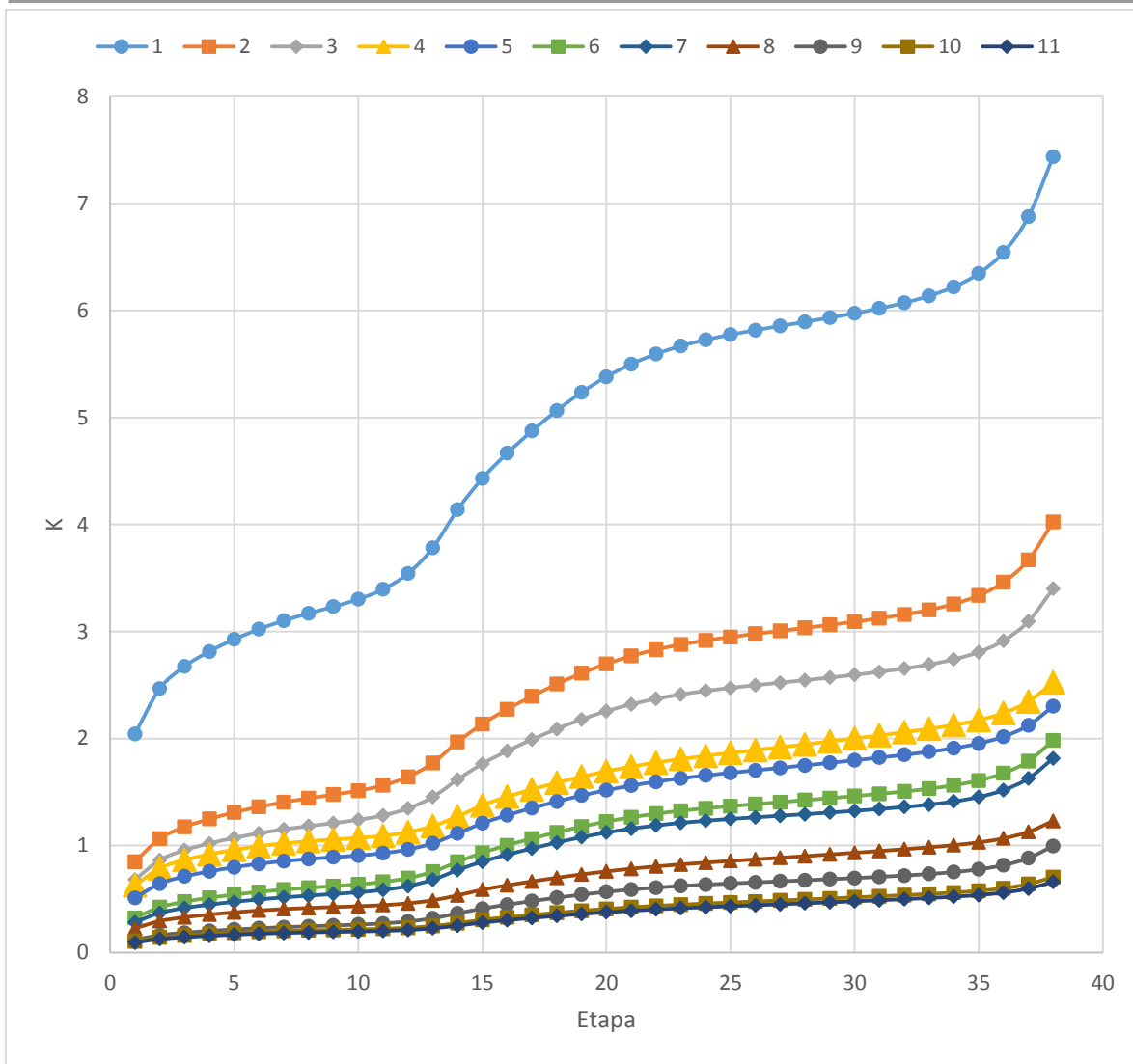


Figura 17 Comportamiento de las constantes de equilibrio K en la columna

En la Figura 17 se observa que el benceno es uno de los componentes que tiene la mayor constante de equilibrio K, esto muestra que la separación del benceno de los demás componentes mediante la destilación es viable.

En la Tabla 13 se muestran los valores de los flujos de vapor V_j y de líquido L_j para cada etapa.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

Tabla 13 Flujos de líquido y vapor en cada etapa

Etapa	Lj [Kmol/hr]	Vj [Kmol/hr]
1	24.943785	0
2	24.492954	49.5844806
3	24.0442873	49.133654
4	23.6192239	48.6849873
5	23.2607747	48.2599239
6	22.9690911	47.9014747
7	22.722508	47.6097911
8	22.4889525	47.363208
9	22.2245827	47.1296525
10	21.8650956	46.8652827
11	21.3080522	46.5057956
12	20.4661192	45.9487522
13	19.3314653	45.1068192
14	171.434308	43.9721653
15	173.129876	96.075008
16	174.1929	97.7705755
17	174.982862	98.8336005
18	175.725681	99.6235618
19	176.441504	100.366381
20	177.11751	101.082204
21	177.727549	101.75821
22	178.269792	102.368249
23	178.744654	102.910492
24	179.144952	103.385354
25	179.506409	103.785652
26	179.82605	104.147109
27	180.132675	104.46675
28	180.430416	104.773375
29	180.71357	105.071116
30	180.980255	105.35427
31	181.217235	105.620955
32	181.400278	105.857935
33	181.485096	106.040978
34	181.393598	106.125796
35	180.997935	106.034298
36	180.115495	105.638635
37	178.625701	104.756195
38	75.3593	103.266401

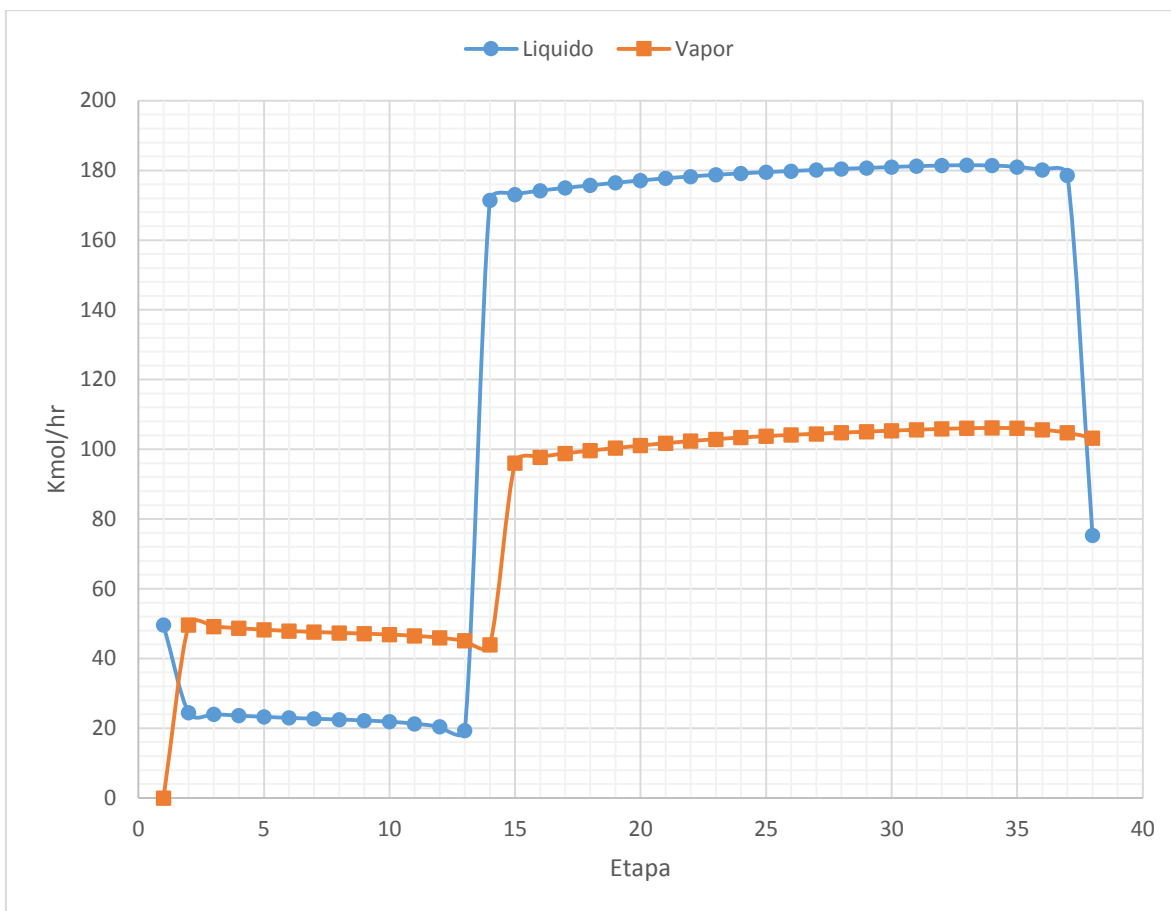


Figura 18 Comportamiento de los flujos de líquido y vapor en la columna

En la Figura 18 se puede notar que hay un gran salto en ambos flujos esto es debido al ingreso de la alimentación.

La Figura 19 muestra la columna de 38 platos ya con todos los flujos completos de vapor y líquido.

La carga térmica de la etapa 1 Q_1 (condensador) obtenida es de -1,647,162.993 Btu/hr y la carga térmica del rehervidor Q_{38} fue de 3,621,937.667 Btu/hr.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

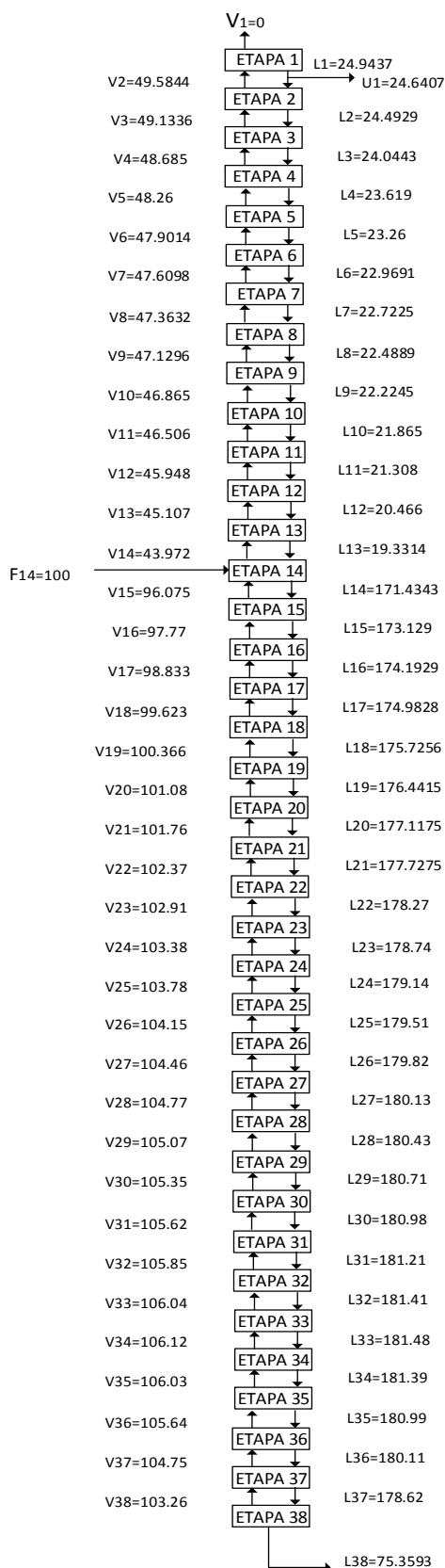


Figura 19 Flujos calculados para la columna de destilación (las unidades de los flujos son Kmol/hr)



3.4. SIMULACIÓN DE LA COLUMNA

Para realizar la simulación se utilizó el programa Aspen Plus V8. Lo que se quiere es optimizar gastos de energía obteniendo la cantidad de benceno que se especificó en el balance de materia preliminar.

Al cargar el programa con los datos obtenidos con el método FUG se obtiene en el destilado los flujos mostrados en la Figura 20:

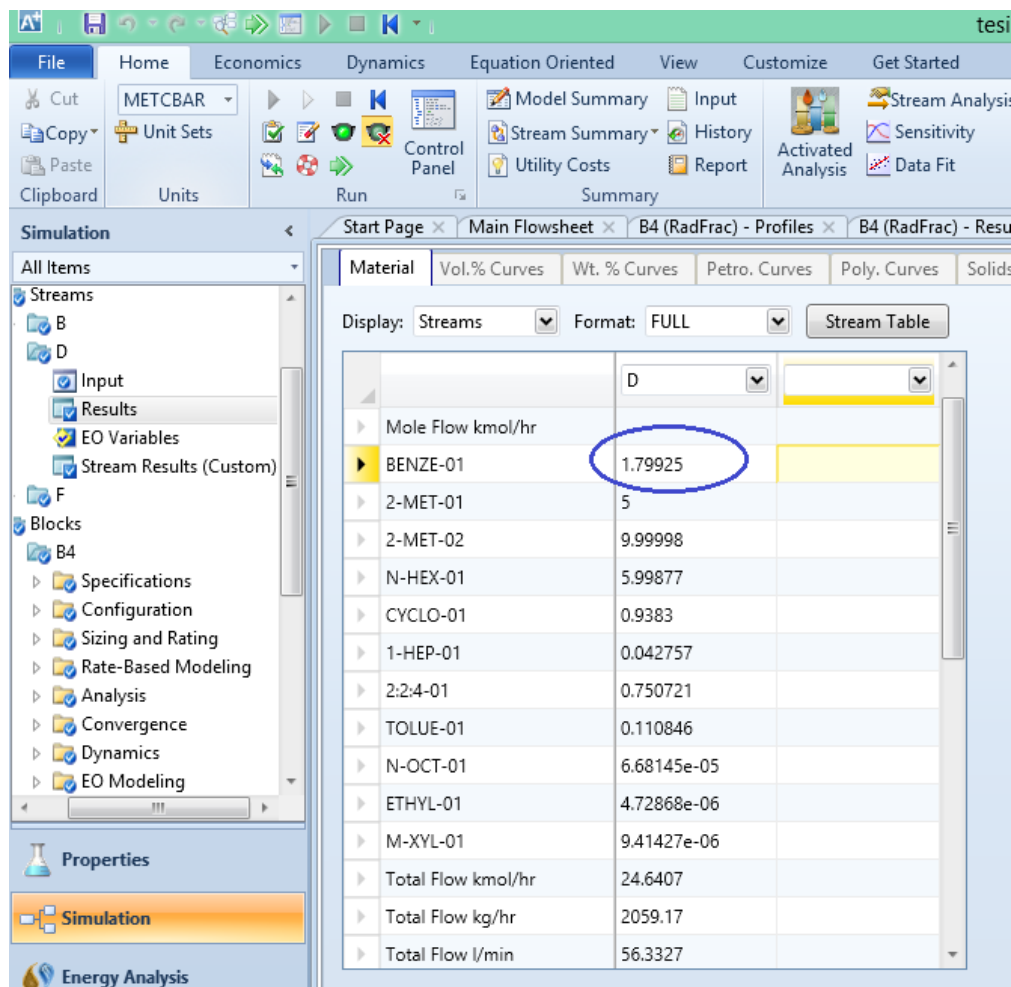


Figura 20 Resultados del destilado Aspen Plus

El valor resaltado es la cantidad de benceno que el programa obtiene en el destilado. Como se planteó en el diseño preliminar se quiere obtener en el destilado el 99% de benceno alimentado que sería de 1.98 Kmol/hr.

Para conseguir ese flujo se introdujo en 2 especificaciones de diseño. La primera es para el destilado donde se indica lo que se quiere obtener 1.98 Kmol/hr de benceno.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

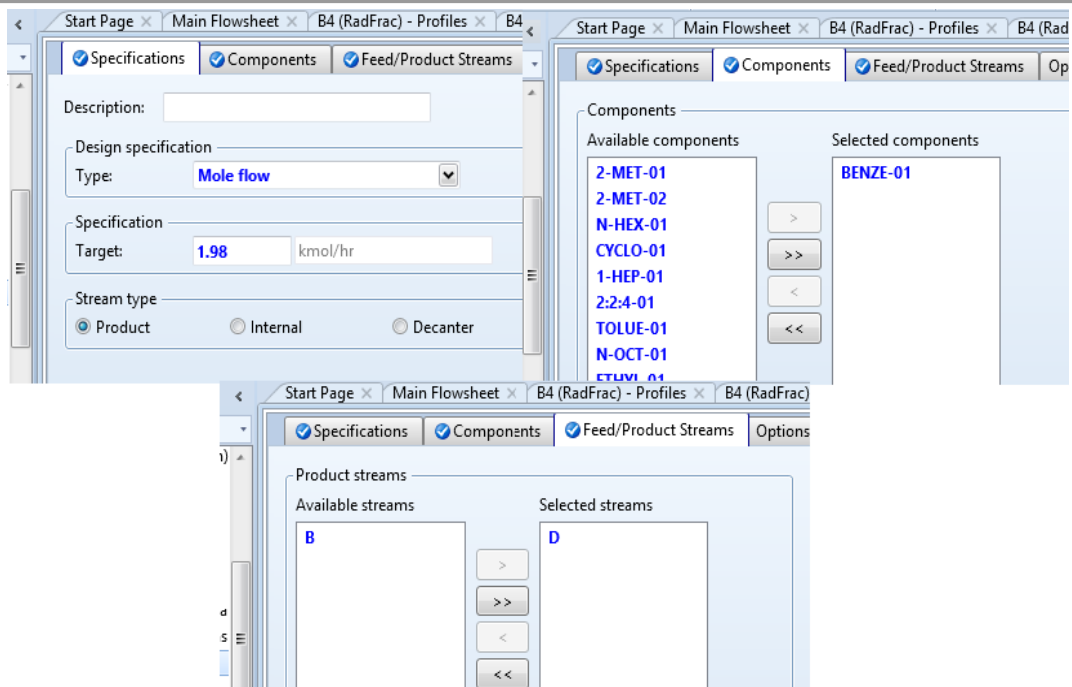


Figura 21 Especificaciones de diseño en el destilado

La segunda es para el domo donde se introduce lo que se quiere obtener 0.02 Kmol/hr de benceno.

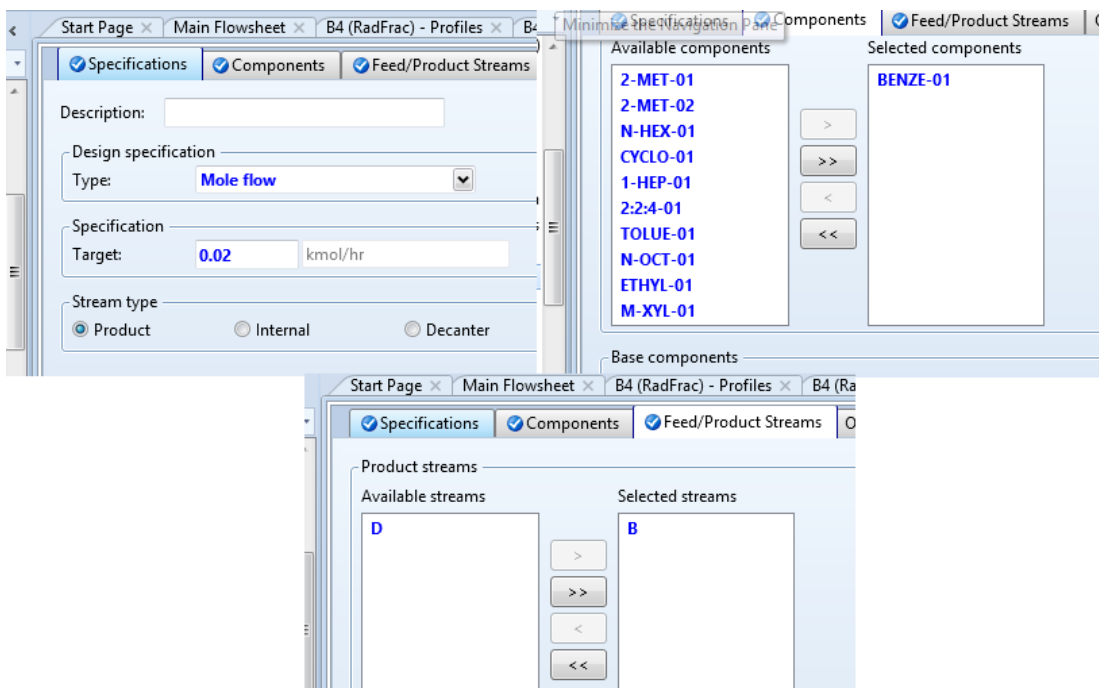


Figura 22 Especificaciones de diseño en el fondo

Lo que se va a variar será la relación de reflujo como se observa en la Figura 23.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

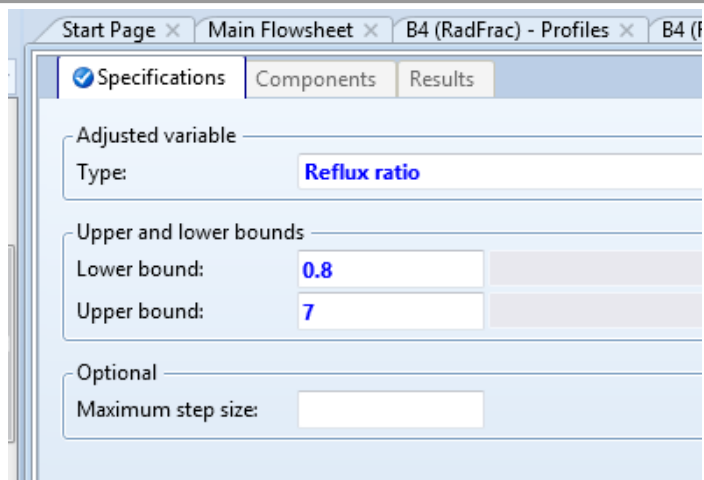


Figura 23 Variación en la relación de reflujo

Al correr el programa da como resultado una relación de reflujo de 1.5108 y se obtiene la cantidad de benceno en el destilado y en el fondo que se especificó.

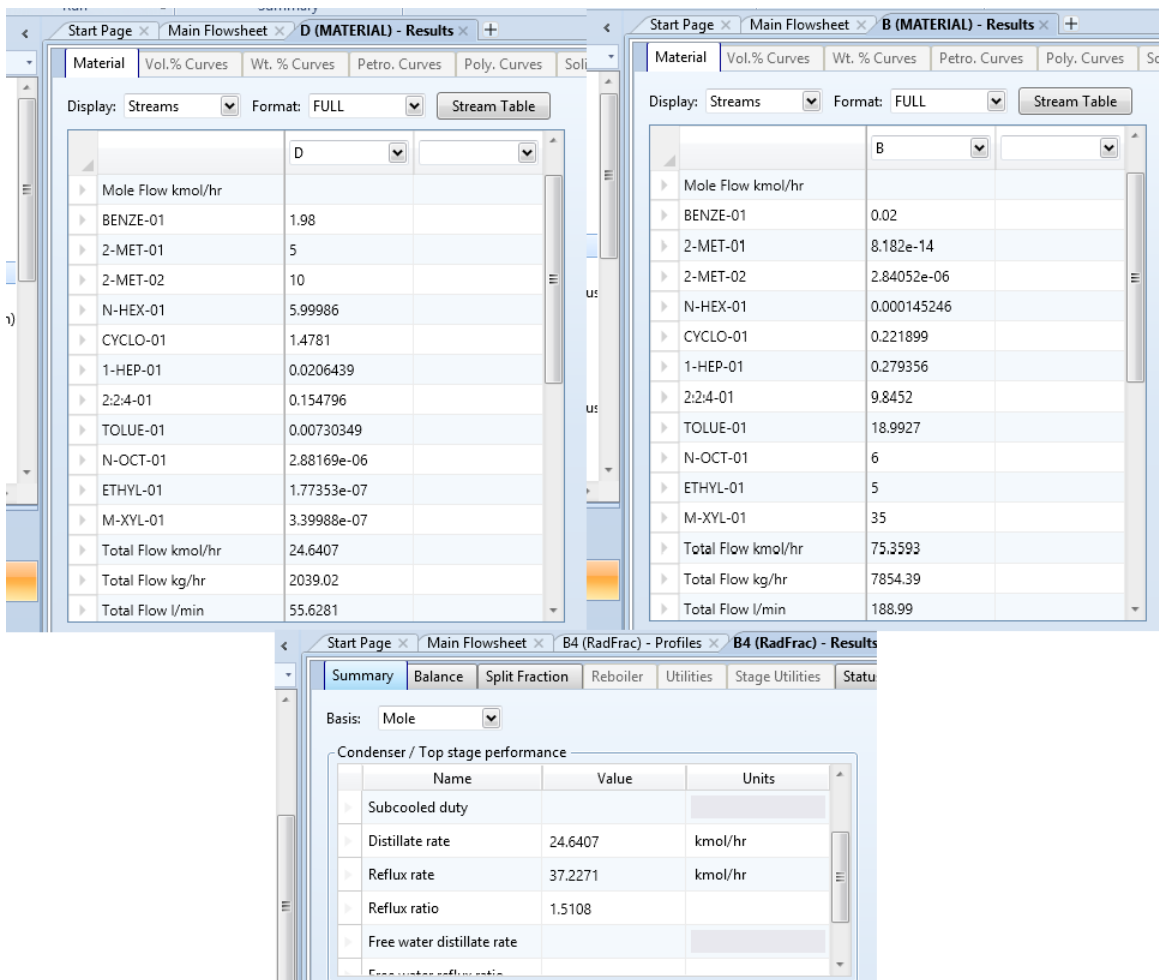


Figura 24 Resultado de la variación del reflujo



Con esas especificaciones de diseño establecidas no importa que cambios se hagan siempre se conseguirá obtener esa cantidad de benceno en el destilado y en el fondo.

Ahora se tienen que optimizar los gastos de energía, esto se logrará cambiando la etapa de alimentación. Para hacer esto el programa realizará un análisis de sensibilidad. Este análisis se realiza declarando que variable vamos a modificar, que para este caso es la etapa de alimentación, y estableciendo la variable a monitorear que es el calor suministrado al rehervidor.

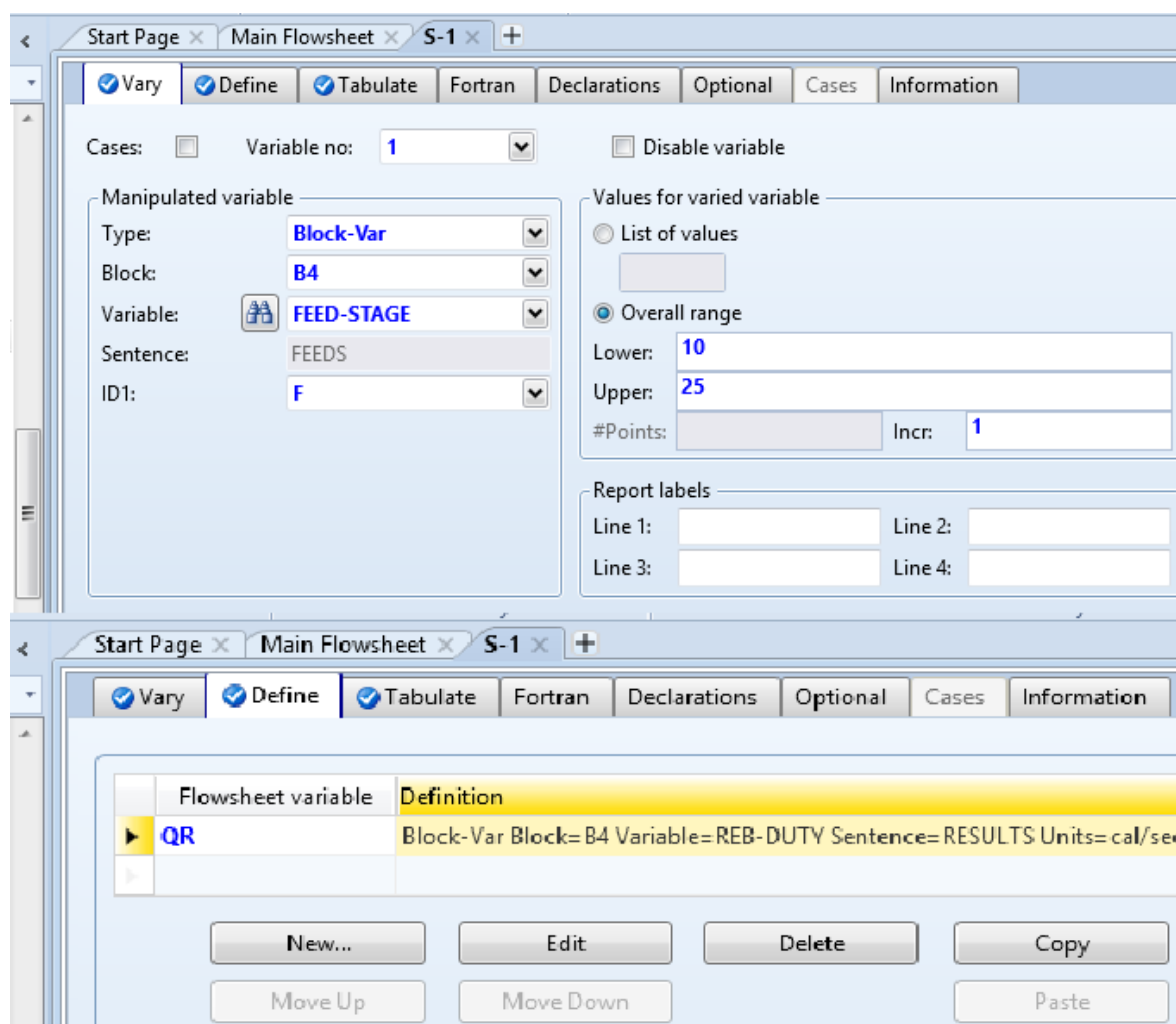


Figura 25 Variable a modificar y variable a monitorear

Al volver a correr el programa da como resultado que la etapa óptima de alimentación es la 13.



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

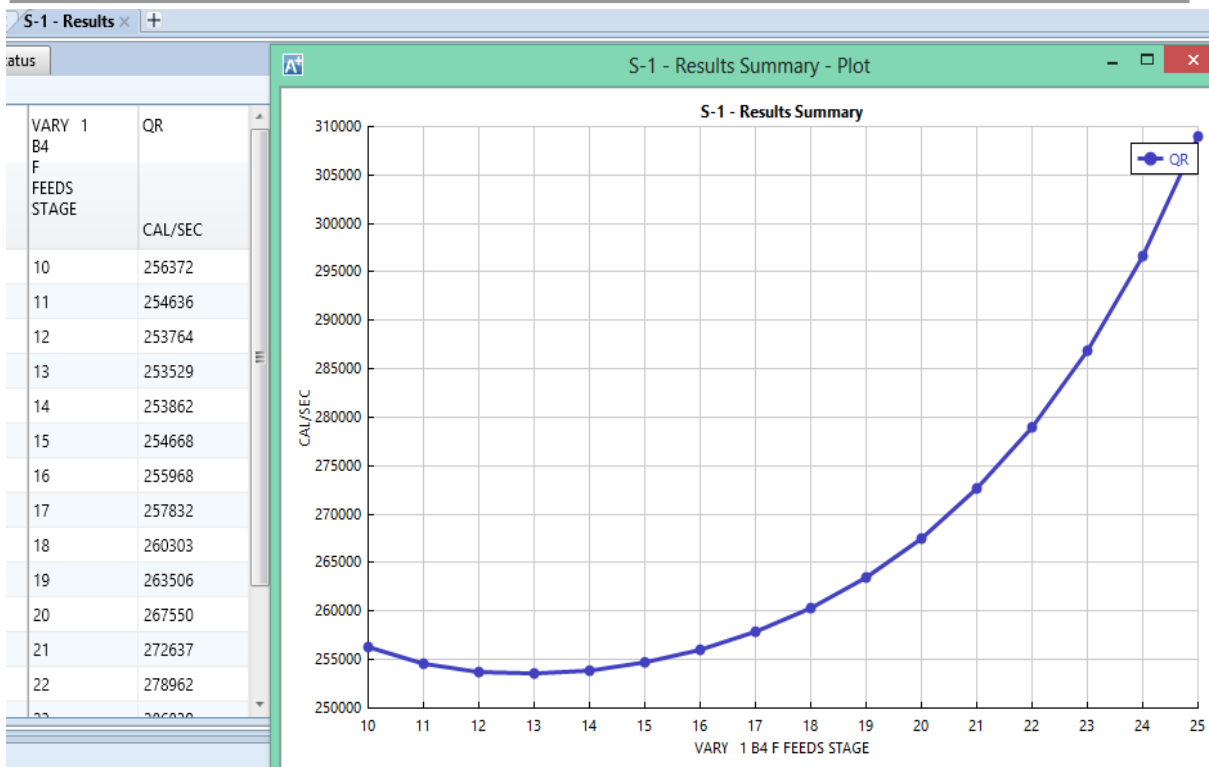


Figura 26 Resultados análisis de sensibilidad.

Lo que más interesa saber es qué etapa tiene el mayor contenido de benceno que sería óptima para colocar una salida lateral. Cambiando la etapa de alimentación de 14 a 13 se obtiene que la mayor composición de benceno se encuentra en la etapa 17.

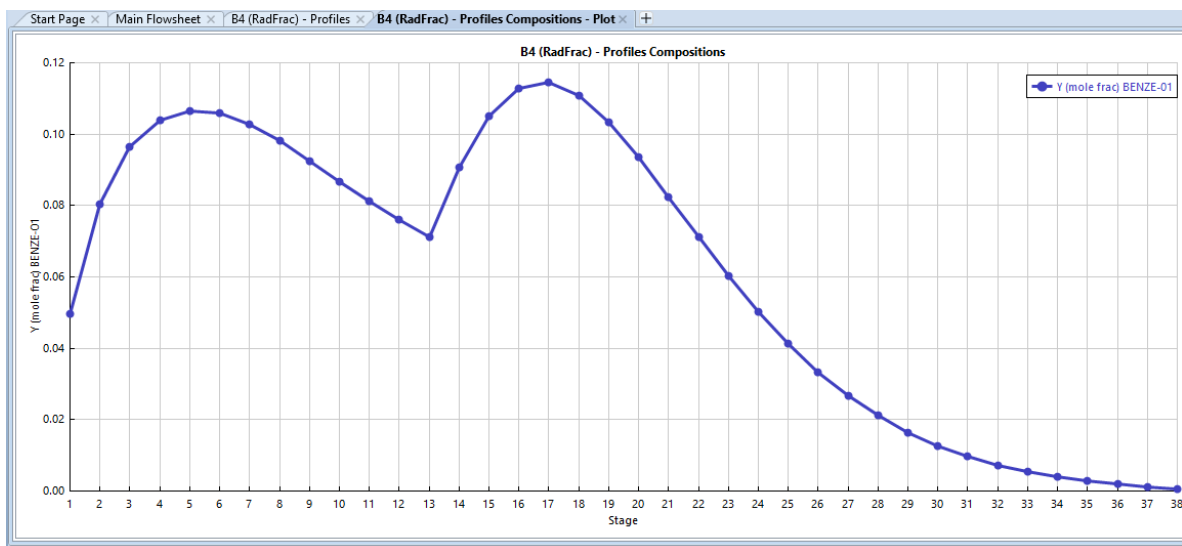


Figura 27 Composición de benceno a lo largo de la columna.



Para finalizar con el simulador se va a dimensionar la columna. Lo único que necesitamos meter es el número de etapas de la siguiente manera:

Trayed section		
Starting stage:	2	Ending stage: 37
Tray type:	Bubble Cap	Number of passes: 1

Tray geometry		
Tray spacing:	2	ft
Minimum column diameter:	0.3048	meter
Cap slot area to active area ratio:	0.12	
Sieve hole area to active area ratio:	0.12	

Figura 28 Especificaciones para el dimensionamiento de la columna

Lo que nos da como resultado un diámetro de columna de 0.8998 m.

Tray sizing results		
Section starting stage:	2	
Section ending stage:	37	
Stage with maximum diameter:	31	
Column diameter:	0.899829	meter
Downcomer area / Column area:	0.1	
Side downcomer velocity:	0.132065	m/sec
Flow path length:	0.618227	meter
Side downcomer width:	0.140801	meter
Side weir length:	0.653826	meter
Center downcomer width:	0	meter
Center weir length:	0	meter
Off-center downcomer width:	0	meter
Off-center short weir length:	0	meter
Off-center long weir length:	0	meter
Tray center to OCDC center:	0	meter

Figura 29 Dimensionamiento de la columna.



3.5 RESULTADOS

Los resultados obtenidos por los 3 métodos se mostraran en la siguiente tabla comparativa.

Tabla 14 Resultados de los 3 métodos

PARÁMETRO	FUG	RIGUROSO	SIMULADOR
<i># Etapas</i>	38	38	38
<i>Flujo de destilado [Kmol/hr]</i>	24.6407	24.943785	24.6407
<i>Flujo en fondo [Kmol/hr]</i>	75.3593		
<i>Presión condensador [psia]</i>	30		
<i>Temperatura condensador [K]</i>	322.15	351.59625	351.2756059
<i>Tipo de condensador</i>	Condensador Total		
<i>Presión rehervidor [psia]</i>	40		33.7
<i>Temperatura rehervidor [K]</i>	430.9842	426.66329	426.962287
<i>Relación de reflujo</i>	1.0123		1.5081
<i>Etapas de alimentación</i>	14		13
<i>Flujo de benceno destilado [Kmol/hr]</i>	1.98	1.7992	1.98
<i>Salida lateral de benceno</i>	-----	21	17
<i>Flujo de calor en el condensador [Btu/hr]</i>	-----	-1333767.65	-1647162.99
<i>Flujo de calor en el rehervidor [Btu/hr]</i>	-----	3299148.29	3621937.667
<i>Díámetro de la columna [m]</i>	-----		0.9

Como se puede observar las diferencias entre un método y otro son muy pequeñas pero el que se adecua a las necesidades es el diseño realizado por el simulador.



CAPÍTULO 4: CONCLUSIONES

Se aplicaron los pasos para realizar el diseño de la columna, teniendo primero que obtener un diseño preliminar mediante un método aproximado (FUG).

La información recopilada por el método aproximado fue la base para poder realizar el cálculo riguroso y la simulación. Datos como el número de etapas, presiones y temperaturas en domo y fondo, así como sus respectivos flujos; fueron los parámetros clave para poder iniciar con los otros dos métodos.

Para la simulación se utilizó el programa “Aspen Plus V8” con el que se pudo realizar un diseño con el que no solo se alcanza el flujo de benceno deseado sino que también se logra minimizar gastos energéticos.

Se examinaron los resultados obtenidos por los tres métodos y se pudo determinar que la variación entre los valores dados no es muy significativa por lo que los tres diseños pueden ser viables.

Sin embargo, las exigencias de la actualidad hacen que sea imperativo cuidar cualquier pérdida tanto económica como energética por mínima que sea por lo que el diseño definitivo de la columna fue el obtenido por el simulador.

Se logró cumplir con los objetivos al conseguir una corriente rica en benceno en el domo y obtener una gasolina que cumpla con las especificaciones ambientales propuestas.

El diseño que mejor satisfago las premisas propuestas fue el siguiente:

- ❖ 38 etapas
- ❖ Etapa de alimentación: etapa 13
- ❖ Salida lateral de benceno: etapa 17
- ❖ Relación de reflujo: 1.5081
- ❖ Presión en el condensador: 30 psia
- ❖ Tipo de condensador: Condensador total
- ❖ Flujo de destilado: 24.6407 Kmol/hr
- ❖ Flujo de reflujo: 37.1612 Kmol/hr
- ❖ Flujo de calor en el condensador: -1,333,767.65 Btu/hr



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN
PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

- ❖ Flujo de calor en el ebullidor: 3,299,148.295 Btu/hr
- ❖ Diámetro de la columna: 0.9 m.



ANEXOS

ANEXO A: VALORES DE K PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 15 Valores de Vj, Tj y Kij de la primera iteración

<i>Etapa</i>	Vj [kmol/h]	Tj [K]	k ISOPENTANO	k ISOHEXANO	k K HEXANO	k BENCENO	k CICLOHEXANO	k HEPTENO	k ISOCTANO	k TOLUENO	k K OCTANO	k ETILBENCENO	k K XILENO
1	0	322.15	0.797857165	0.27082092	0.20111515	0.20822414	0.15722718	0.08665162	0.0707796	0.06747407	0.02464104	0.028082829	0.02424327
2	49.58448061	325.173172	0.872566409	0.30015947	0.2240368	0.23318229	0.176027741	0.09783659	0.07966358	0.07689116	0.02839509	0.032509136	0.02812696
3	49.58448061	328.196344	0.952542836	0.33194212	0.24898935	0.26050844	0.196607876	0.11017662	0.08943417	0.08738859	0.03262034	0.037521709	0.03253532
4	49.58448061	331.219517	1.038028339	0.36630567	0.27609697	0.29036489	0.219089299	0.12375955	0.10015589	0.09906293	0.03736304	0.043183535	0.03752613
5	49.58448061	334.242689	1.129269963	0.40339001	0.30548732	0.32292042	0.243598562	0.13867726	0.11189601	0.1120169	0.04267264	0.049562824	0.04316215
6	49.58448061	337.265861	1.226520243	0.44333787	0.33729144	0.35835039	0.270267128	0.15502573	0.12472456	0.12635962	0.04860199	0.056733338	0.04951141
7	49.58448061	340.289033	1.330037658	0.48629474	0.37164369	0.39683695	0.299231445	0.17290506	0.13871437	0.14220689	0.05520744	0.064774747	0.05664757
8	49.58448061	343.312205	1.440087238	0.53240863	0.40868156	0.43856917	0.330633056	0.19241956	0.15394107	0.15968154	0.06254897	0.073773015	0.06465032
9	49.58448061	346.335378	1.556941352	0.58182996	0.44854561	0.4837433	0.364618735	0.2136778	0.17048315	0.17891374	0.07069041	0.083820819	0.07360574
10	49.58448061	349.35855	1.680880697	0.63471131	0.49137931	0.53256313	0.401340665	0.23679274	0.18842193	0.20004142	0.07969958	0.095018024	0.08360682
11	49.58448061	352.381722	1.812195544	0.69120727	0.53732897	0.58524037	0.440956661	0.26188178	0.20784162	0.22321076	0.08964853	0.107472204	0.09475394
12	49.58448061	355.404894	1.951187274	0.75147426	0.58654355	0.64199517	0.48363046	0.28906696	0.22882943	0.24857671	0.1006137	0.121299248	0.10715546
13	49.58448061	358.428066	2.09817027	0.81567032	0.63917464	0.70305675	0.529532074	0.31847513	0.25147557	0.27630364	0.11267625	0.136624035	0.12092838
14	49.58448061	361.451239	3.243568592	1.12557592	0.83395312	0.5322354	0.485972146	0.34708387	0.35260209	0.21188518	0.12404731	0.099200423	0.08810828
15	49.58448061	364.474411	4.26606383	1.43616782	1.04673604	0.54329755	0.53380791	0.41320011	0.45991698	0.22109878	0.15098683	0.103194519	0.09195389
16	49.58448061	367.497583	4.638114878	1.56172591	1.14045789	0.59102343	0.580868589	0.45278325	0.50233514	0.24328714	0.16727771	0.114698903	0.10238692
17	49.58448061	370.520755	5.041084833	1.69620134	1.2408826	0.64191202	0.631088831	0.49533368	0.54778276	0.2672134	0.18495465	0.127225611	0.11376823
18	49.58448061	373.543927	5.47816707	1.84012362	1.34838356	0.69609765	0.684608221	0.54100887	0.59640824	0.29297202	0.20410147	0.140840678	0.1261611
19	49.58448061	376.5671	5.953085125	1.99406054	1.46335465	0.75371631	0.741568622	0.58997104	0.64836357	0.32065984	0.22480462	0.155612552	0.13963128
20	49.58448061	379.590272	6.470213575	2.15862396	1.5862128	0.81490547	0.802114097	0.64238733	0.70380438	0.35037608	0.24715315	0.171612078	0.15424698
21	49.58448061	382.613444	7.034731113	2.33447692	1.71740108	0.87980399	0.866390847	0.6984299	0.76289002	0.38222221	0.27123867	0.188912486	0.17007889
22	49.58448061	385.636616	7.65281582	2.52234208	1.85739242	0.94855196	0.934547147	0.75827616	0.82578376	0.41630188	0.29715526	0.207589373	0.18720012
23	49.58448061	388.659788	8.33189641	2.72301194	2.0066941	1.02129055	1.006733309	0.822109	0.89265293	0.45272089	0.32499947	0.227720685	0.20568625
24	49.58448061	391.682961	9.0809785	2.9373611	2.16585304	1.09816192	1.083101647	0.89011712	0.96366921	0.49158707	0.35487023	0.249386693	0.22561527
25	49.58448061	394.706133	9.911072713	3.16636109	2.33546225	1.17930905	1.163806474	0.96249541	1.03900894	0.53301022	0.38686881	0.272669976	0.24706759
26	49.58448061	397.729305	10.83576277	3.41109823	2.5161685	1.26487562	1.249004113	1.03944543	1.11885355	0.57710203	0.42109875	0.297655395	0.27012605
27	49.58448061	400.752477	11.87196884	3.67279527	2.70868148	1.35500589	1.338852934	1.12117595	1.20339005	0.62397595	0.45766583	0.324430073	0.29487583
28	49.58448061	403.775649	13.04098722	3.95283768	2.91378484	1.44984459	1.433513429	1.20790375	1.29281164	0.67374719	0.49667799	0.353083375	0.32140452
29	49.58448061	406.798822	14.36992818	4.25280572	3.13234945	1.54953679	1.533148312	1.29985434	1.38731846	0.72653255	0.53824528	0.38370689	0.34980208
30	49.58448061	409.821994	15.89373736	4.5745137	3.36534937	1.65422784	1.63792267	1.39726306	1.48711845	0.7824504	0.58247982	0.416394414	0.38016079



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN TORRE DE DESTILACIÓN PARA LA REDUCCIÓN DEL CONTENIDO DE BENCENO EN LAS GASOLINAS

31	49.58448061	412.845166	17.65809082	4.92005836	3.61388112	1.76406322	1.748004154	1.50037625	1.59242839	0.84162053	0.62949575	0.451241944	0.41257532
32	49.58448061	415.868338	19.72362748	5.29187884	3.87918713	1.87918853	1.863563223	1.60945268	1.70347512	0.90416412	0.67940917	0.48834767	0.44714266
33	49.58448061	418.89151	22.1722814	5.6928314	4.16268427	1.99974938	1.984773458	1.72476526	1.82049696	0.97020362	0.73233812	0.527811979	0.48396217
34	49.58448061	421.914683	25.11700716	6.12628347	4.46599875	2.12589142	2.111811938	1.84660305	1.94374538	1.03986268	0.78840258	0.569737469	0.52313559
35	49.58448061	424.937855	28.71716974	6.59623268	4.79100925	2.25776025	2.244859703	1.97527363	2.07348693	1.11326606	0.84772437	0.614228971	0.56476704
36	49.58448061	427.961027	33.20375379	7.10745915	5.13990021	2.39550151	2.384102303	2.11110596	2.21000552	1.19053956	0.91042722	0.661393583	0.60896309
37	49.58448061	430.984199	38.92235754	7.66572203	5.51522856	2.5392609	2.529730469	2.2544537	2.35360502	1.27180992	0.97663673	0.711340724	0.65583278
38	49.58448061	440	70.52168678	9.68699878	6.82412493	3.00516015	3.00391909	2.73051519	2.82725605	1.53917263	1.19617778	0.877932113	0.81259868



ANEXO B: DATOS DE ISOPENTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 16 Valores A, B, C y D para el isopentano

ISOPENTANO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.94378	43.26575	0	1.21118E+15
2	24.94378	-68.20953	47.23134	0	6.98273E+14
3	24.94378	-72.17512	51.4701	0	3.68771E+14
4	24.94378	-76.41388	55.99426	0	1.78716E+14
5	24.94378	-80.93805	60.81637	0	7.96128E+13
6	24.94378	-85.76015	65.94923	0	3.26531E+13
7	24.94378	-90.89301	71.40598	0	1.23503E+13
8	24.94378	-96.34976	77.20013	0	4.31425E+12
9	24.94378	-102.1439	83.3456	0	1.39396E+12
10	24.94378	-108.2894	89.85677	0	4.17185E+11
11	24.94378	-114.8006	96.74861	0	1.15808E+11
12	24.94378	-121.6924	104.0367	0	29857810348
13	24.94378	-128.9805	160.8307	0	7158692962
14	24.94378	-285.7744	211.5306	-5	1110266303
15	124.9438	-336.4743	229.9785	0	655795880.6
16	124.9438	-354.9223	249.9596	0	356283785.2
17	124.9438	-374.9034	271.6321	0	178090570.9
18	124.9438	-396.5758	295.1806	0	81917092.18
19	124.9438	-420.1244	320.8222	0	34673789.6
20	124.9438	-445.766	348.8135	0	13503662.27
21	124.9438	-473.7573	379.4609	0	4836964.943
22	124.9438	-504.4047	413.1328	0	1592650.759
23	124.9438	-538.0765	450.2756	0	481665.528
24	124.9438	-575.2194	491.4354	0	133653.9482
25	124.9438	-616.3792	537.2857	0	33980.51877
26	124.9438	-662.2294	588.6654	0	7902.043038
27	124.9438	-713.6092	646.6306	0	1677.202563
28	124.9438	-771.5744	712.5254	0	324.0738007
29	124.9438	-837.4692	788.0827	0	56.82745404
30	124.9438	-913.0265	875.5673	0	9.009507304
31	124.9438	-1000.511	977.9858	0	1.28566011
32	124.9438	-1102.93	1099.401	0	0.164251085
33	124.9438	-1224.345	1245.414	0	0.018666663
34	124.9438	-1370.358	1423.926	0	0.001872696
35	124.9438	-1548.87	1646.391	0	0.00016432
36	124.9438	-1771.335	1929.945	0	1.24689E-05
37	124.9438	-2054.889	3496.781	0	8.06129E-07
38	124.9438	-3572.141	0	0	2.81962E-08



ANEXO C: DATOS DE ISOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 18 Valores A, B, C y D para el isohehexano

ISOHEXANO

<i>Etapa</i>	A	B	C	D	X
1	0	-24.943781	14.8832516	0	1181.0782
2	24.9437806	-39.827032	16.4591775	0	1979.4435
3	24.9437806	-41.402958	18.1630766	0	2999.83425
4	24.9437806	-43.106857	20.0018839	0	4119.743
5	24.9437806	-44.945665	21.9826779	0	5137.61434
6	24.9437806	-46.926459	24.1126719	0	5829.65939
7	24.9437806	-49.056453	26.3992056	0	6030.59443
8	24.9437806	-51.342986	28.8497365	0	5698.11936
9	24.9437806	-53.793517	31.4718305	0	4926.65295
10	24.9437806	-56.415611	34.2731534	0	3904.74111
11	24.9437806	-59.216934	37.2614609	0	2841.84546
12	24.9437806	-62.205242	40.4445894	0	1902.40447
13	24.9437806	-65.38837	55.8110974	0	1173.28821
14	24.9437806	-180.75488	71.2116352	-10	524.380364
15	124.943781	-196.15542	77.4373683	0	919.906768
16	124.943781	-202.38115	84.1052624	0	1484.12365
17	124.943781	-209.04904	91.2415741	0	2204.6423
18	124.943781	-216.18535	98.874456	0	3018.86883
19	124.943781	-223.81824	107.034248	0	3814.72526
20	124.943781	-231.97803	115.753826	0	4452.9317
21	124.943781	-240.69761	125.069022	0	4806.37352
22	124.943781	-250.0128	135.019133	0	4801.48057
23	124.943781	-259.96291	145.647524	0	4443.11205
24	124.943781	-270.5913	157.00237	0	3811.45659
25	124.943781	-281.94615	169.137534	0	3033.12489
26	124.943781	-294.08131	182.113646	0	2240.54402
27	124.943781	-307.05743	195.999403	0	1537.12831
28	124.943781	-320.94318	210.873163	0	979.822485
29	124.943781	-335.81694	226.824886	0	580.504052
30	124.943781	-351.76867	243.958539	0	319.71964
31	124.943781	-368.90232	262.395064	0	163.703967
32	124.943781	-387.33884	282.276088	0	77.9122606
33	124.943781	-407.21987	303.768584	0	34.4508543
34	124.943781	-428.71236	327.070772	0	14.1371433
35	124.943781	-452.01455	352.419671	0	5.36993299
36	124.943781	-477.36345	380.100845	0	1.87543371
37	124.943781	-505.04463	480.324803	0	0.59016911
38	124.943781	-555.6841	0	0	0.13269762



ANEXO D: DATOS DE HEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 20 Valores A, B, C y D para el hexano

HEXANO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.943781	11.1087481	0	0.01967145
2	24.9437806	-36.052529	12.3460077	0	0.04417062
3	24.9437806	-37.289788	13.690125	0	0.08924199
4	24.9437806	-38.633906	15.1474299	0	0.16260134
5	24.9437806	-40.091211	16.724421	0	0.26776107
6	24.9437806	-41.668202	18.4277593	0	0.39935453
7	24.9437806	-43.37154	20.2642629	0	0.54056555
8	24.9437806	-45.208044	22.240901	0	0.66539546
9	24.9437806	-47.184682	24.3647881	0	0.74625926
10	24.9437806	-49.308569	26.6431777	0	0.76399299
11	24.9437806	-51.586958	29.0834574	0	0.71526279
12	24.9437806	-54.027238	31.6931424	0	0.61345382
13	24.9437806	-56.636923	41.3511321	0	0.48281288
14	24.9437806	-166.29491	51.9018629	-6	0.29124181
15	124.943781	-176.84564	56.5490122	0	0.58550602
16	124.943781	-181.49279	61.5285192	0	1.18755983
17	124.943781	-186.4723	66.8588986	0	2.31401986
18	124.943781	-191.80268	72.5596804	0	4.2346254
19	124.943781	-197.50346	78.6515378	0	7.20910158
20	124.943781	-203.59532	85.1564403	0	11.3759048
21	124.943781	-210.10022	92.0978385	0	16.6205697
22	124.943781	-217.04162	99.5008845	0	22.4830121
23	124.943781	-224.44467	107.392698	0	28.1717348
24	124.943781	-232.33648	115.802683	0	32.719944
25	124.943781	-240.74646	124.762908	0	35.2509407
26	124.943781	-249.70669	134.308564	0	35.2539537
27	124.943781	-259.25234	144.478508	0	32.7511673
28	124.943781	-269.42229	155.315921	0	28.2814013
29	124.943781	-280.2597	166.8691	0	22.712322
30	124.943781	-291.81288	179.192418	0	16.9699685
31	124.943781	-304.1362	192.347479	0	11.7990038
32	124.943781	-317.29126	206.404537	0	7.63312389
33	124.943781	-331.34832	221.444229	0	4.59152386
34	124.943781	-346.38801	237.559705	0	2.56354547
35	124.943781	-362.50349	254.859282	0	1.32303188
36	124.943781	-379.80306	273.469744	0	0.62506887
37	124.943781	-398.41352	338.37069	0	0.26364331
38	124.943781	-413.72999	0	0	0.07961857



ANEXO E: DATOS DE BENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 22 Valores A, B, C y D para benceno

BENCENO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	11.5622225	0	1.84511E+15
2	24.9437806	-36.5060031	12.9171757	0	3.58402E+14
3	24.9437806	-37.8609563	14.3975924	0	6.26364E+13
4	24.9437806	-39.341373	16.0118411	0	9.87122E+12
5	24.9437806	-40.9556217	17.7686181	0	1.40589E+12
6	24.9437806	-42.7123987	19.6769542	0	1.81339E+11
7	24.9437806	-44.6207348	21.7462243	0	21226499564
8	24.9437806	-46.6900049	23.9861602	0	2259316690
9	24.9437806	-48.9299408	26.4068662	0	219091045.3
10	24.9437806	-51.3506468	29.0188399	0	19392449.65
11	24.9437806	-53.9626205	31.832997	0	1569598.645
12	24.9437806	-56.7767777	34.8607039	0	116374.1186
13	24.9437806	-59.8044845	26.390616	0	7917.310528
14	24.9437806	-151.334397	26.9391267	-2	495.0806256
15	124.943781	-151.882907	29.3055898	0	142.7558082
16	124.943781	-154.24937	31.828874	0	37.95437812
17	124.943781	-156.772655	34.5156404	0	9.318357396
18	124.943781	-159.459421	37.3726316	0	2.115761069
19	124.943781	-162.316412	40.4066644	0	0.444903588
20	124.943781	-165.350445	43.6246239	0	0.086764476
21	124.943781	-168.568405	47.0334561	0	0.015713846
22	124.943781	-171.977237	50.6401616	0	0.002646421
23	124.943781	-175.583942	54.4517886	0	0.000414979
24	124.943781	-179.395569	58.4754267	0	6.06632E-05
25	124.943781	-183.419207	62.7182005	0	8.27714E-06
26	124.943781	-187.661981	67.1872632	0	1.05536E-06
27	124.943781	-192.131044	71.8897908	0	1.25888E-07
28	124.943781	-196.833571	76.8329772	0	1.40642E-08
29	124.943781	-201.776758	82.0240283	0	1.47318E-09
30	124.943781	-206.967809	87.4701586	0	1.44833E-10
31	124.943781	-212.413939	93.1785871	0	1.33779E-11
32	124.943781	-218.122368	99.1565345	0	1.16211E-12
33	124.943781	-224.100315	105.411222	0	9.50306E-14
34	124.943781	-230.355002	111.949869	0	7.32213E-15
35	124.943781	-236.89365	118.779698	0	5.32056E-16
36	124.943781	-243.723479	125.907933	0	3.64877E-17
37	124.943781	-250.851713	149.009305	0	2.35932E-18
38	124.943781	-224.368605	0	0	1.25463E-19



ANEXO F: DATOS DE CICLOHEXANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 24 Valores A, B, C y D para el ciclohexano

CICLOHEXANO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	8.72824411	0	1.56834E+15
2	24.9437806	-33.6720247	9.74869943	0	3.04642E+14
3	24.9437806	-34.69248	10.8634291	0	5.32409E+13
4	24.9437806	-35.8072097	12.0787082	0	8.39054E+12
5	24.9437806	-37.0224888	13.4010552	0	1.19501E+12
6	24.9437806	-38.3448358	14.8372358	0	1.54138E+11
7	24.9437806	-39.7810164	16.3942684	0	18042524629
8	24.9437806	-41.338049	18.0794306	0	1920419186
9	24.9437806	-43.0232112	19.9002684	0	186227388.5
10	24.9437806	-44.844049	21.864607	0	16483582.2
11	24.9437806	-46.8083876	23.9805651	0	1334158.848
12	24.9437806	-48.9243458	26.2565729	0	98918.0008
13	24.9437806	-51.2003535	24.0966765	0	6729.713948
14	24.9437806	-149.040457	26.468588	-1.7	420.8185318
15	124.943781	-151.412369	28.8020673	0	121.342437
16	124.943781	-153.745848	31.2922119	0	32.2612214
17	124.943781	-156.235993	33.9459431	0	7.920603787
18	124.943781	-158.889724	36.770295	0	1.798396909
19	124.943781	-161.714076	39.7724109	0	0.378168049
20	124.943781	-164.716192	42.9595402	0	0.073749804
21	124.943781	-167.903321	46.3390349	0	0.013356769
22	124.943781	-171.282816	49.9183482	0	0.002249458
23	124.943781	-174.862129	53.7050326	0	0.000352733
24	124.943781	-178.648813	57.7067396	0	5.15637E-05
25	124.943781	-182.65052	61.9312202	0	7.03557E-06
26	124.943781	-186.875001	66.3863274	0	8.97059E-07
27	124.943781	-191.330108	71.0800188	0	1.07005E-07
28	124.943781	-196.023799	76.0203628	0	1.19546E-08
29	124.943781	-200.964143	81.2155449	0	1.25221E-09
30	124.943781	-206.159325	86.6738781	0	1.23108E-10
31	124.943781	-211.617659	92.4038145	0	1.13712E-11
32	124.943781	-217.347595	98.413961	0	9.87795E-13
33	124.943781	-223.357742	104.713098	0	8.0776E-14
34	124.943781	-229.656879	111.310202	0	6.22381E-15
35	124.943781	-236.253983	118.214474	0	4.52248E-16
36	124.943781	-243.158255	125.435371	0	3.10146E-17
37	124.943781	-250.379152	148.947768	0	2.00543E-18
38	124.943781	-224.307068	0	0	1.06643E-19



ANEXO G: DATOS DE HEPTENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 26 Valores A, B, C y D para el hepteno

HEPTENO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	4.85117669	0	2.76766E+14
2	24.9437806	-29.7949573	5.46305052	0	5.37603E+13
3	24.9437806	-30.4068311	6.13655294	0	9.39546E+12
4	24.9437806	-31.0803336	6.87623999	0	1.48068E+12
5	24.9437806	-31.8200206	7.68687027	0	2.10884E+11
6	24.9437806	-32.6306509	8.57340759	0	27200857598
7	24.9437806	-33.5171882	9.54102389	0	3183974935
8	24.9437806	-34.4848045	10.5951029	0	338897503.4
9	24.9437806	-35.5388836	11.7412449	0	32863656.79
10	24.9437806	-36.6850255	12.9852718	0	2908867.447
11	24.9437806	-37.9290524	14.333235	0	235439.7967
12	24.9437806	-39.2770156	15.7914238	0	17456.11779
13	24.9437806	-40.7352045	17.2099736	0	1187.596579
14	24.9437806	-142.153754	20.4883128	-0.3	74.26209384
15	124.943781	-145.432093	22.4510224	0	21.41337124
16	124.943781	-147.394803	24.5608634	0	5.693156718
17	124.943781	-149.504644	26.8256436	0	1.397753609
18	124.943781	-151.769424	29.2534075	0	0.31736416
19	124.943781	-154.197188	31.8524419	0	0.066735538
20	124.943781	-156.796223	34.6312837	0	0.013014671
21	124.943781	-159.575064	37.5987294	0	0.002357077
22	124.943781	-162.54251	40.7638478	0	0.000396963
23	124.943781	-165.707628	44.1359953	0	6.22469E-05
24	124.943781	-169.079776	47.7248352	0	9.09948E-06
25	124.943781	-172.668616	51.5403615	0	1.24157E-06
26	124.943781	-176.484142	55.5929274	0	1.58305E-07
27	124.943781	-180.536708	59.89328	0	1.88833E-08
28	124.943781	-184.837061	64.4526023	0	2.10963E-09
29	124.943781	-189.396383	69.2825632	0	2.20977E-10
30	124.943781	-194.226344	74.3953772	0	2.17249E-11
31	124.943781	-199.339158	79.8038754	0	2.00668E-12
32	124.943781	-204.747656	85.5215897	0	1.74317E-13
33	124.943781	-210.46537	91.5628529	0	1.42546E-14
34	124.943781	-216.506634	97.9429168	0	1.09832E-15
35	124.943781	-222.886697	104.678092	0	7.98084E-17
36	124.943781	-229.621873	111.785916	0	5.47316E-18
37	124.943781	-236.729696	135.391178	0	3.53899E-19
38	124.943781	-210.750478	0	0	1.88194E-20



ANEXO H: DATOS DE ISOCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 28 Valores A, B, C y D para el isoctano

ISOCTANO

<i>Etapa</i>	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	3.950077	0	9.22553E+15
2	24.9437806	-28.8938576	4.43454698	0	1.79201E+15
3	24.9437806	-29.3783276	4.96617802	0	3.13182E+14
4	24.9437806	-29.9099586	5.54830549	0	4.93561E+13
5	24.9437806	-30.4920861	6.18440232	0	7.02947E+12
6	24.9437806	-31.1281829	6.87807975	0	9.06695E+11
7	24.9437806	-31.8218604	7.63308823	0	1.06132E+11
8	24.9437806	-32.5768688	8.45331856	0	11296583448
9	24.9437806	-33.3970992	9.34280332	0	1095455226
10	24.9437806	-34.2865839	10.305719	0	96962248.24
11	24.9437806	-35.2494996	11.3463886	0	7847993.224
12	24.9437806	-36.2901692	12.4692856	0	581870.593
13	24.9437806	-37.4130662	17.4835913	0	39586.55264
14	24.9437806	-142.427372	22.8047446	-10	2475.403128
15	124.943781	-147.748525	24.9080269	0	713.7790412
16	124.943781	-149.851808	27.1615234	0	189.7718906
17	124.943781	-152.105304	29.5725927	0	46.59178698
18	124.943781	-154.516373	32.1487709	0	10.57880535
19	124.943781	-157.092551	34.8977744	0	2.224517938
20	124.943781	-159.841555	37.8275055	0	0.433822378
21	124.943781	-162.771286	40.9460589	0	0.078569231
22	124.943781	-165.88984	44.261732	0	0.013232104
23	124.943781	-169.205513	47.7830373	0	0.002074897
24	124.943781	-172.726818	51.5187187	0	0.000303316
25	124.943781	-176.462499	55.4777721	0	4.13857E-05
26	124.943781	-180.421553	59.6694705	0	5.27682E-06
27	124.943781	-184.613251	64.1033936	0	6.29442E-07
28	124.943781	-189.047174	68.7894652	0	7.0321E-08
29	124.943781	-193.733246	73.7379959	0	7.36591E-09
30	124.943781	-198.681777	78.9597347	0	7.24164E-10
31	124.943781	-203.903515	84.4659292	0	6.68895E-11
32	124.943781	-209.40971	90.2683964	0	5.81056E-12
33	124.943781	-215.212177	96.3796051	0	4.75153E-13
34	124.943781	-221.323386	102.812773	0	3.66107E-14
35	124.943781	-227.756553	109.581976	0	2.66028E-15
36	124.943781	-234.525756	116.702283	0	1.82439E-16
37	124.943781	-241.646063	140.188023	0	1.17966E-17
38	124.943781	-215.547323	0	0	6.27313E-19



ANEXO I: DATOS DE TOLUENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 30 Valores A, B, C y D para el tolueno

TOLUENO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	3.81260816	0	1.75285E+16
2	24.9437806	-28.7563888	4.33311777	0	3.40482E+15
3	24.9437806	-29.2768984	4.91198393	0	5.95046E+14
4	24.9437806	-29.8557645	5.55429975	0	9.37766E+13
5	24.9437806	-30.4980804	6.26547594	0	1.3356E+13
6	24.9437806	-31.2092566	7.05125486	0	1.72272E+12
7	24.9437806	-31.9950355	7.91772622	0	2.01652E+11
8	24.9437806	-32.8615068	8.87134468	0	21463508550
9	24.9437806	-33.8151253	9.9189499	0	2081364930
10	24.9437806	-34.8627305	11.0677897	0	184228271.7
11	24.9437806	-36.0115704	12.3255472	0	14911187.13
12	24.9437806	-37.2693278	13.7003722	0	1105554.127
13	24.9437806	-38.6441528	10.5062165	0	75214.45001
14	24.9437806	-135.449997	10.963068	-19	4703.265943
15	124.943781	-135.906849	12.0632665	0	1356.180178
16	124.943781	-137.007047	13.2496377	0	360.5665922
17	124.943781	-138.193418	14.5268652	0	88.52439526
18	124.943781	-139.470646	15.8997518	0	20.09973016
19	124.943781	-140.843532	17.3732161	0	4.226584083
20	124.943781	-142.316997	18.9522896	0	0.824262518
21	124.943781	-143.89607	20.6421124	0	0.149281539
22	124.943781	-145.585893	22.4479301	0	0.025140998
23	124.943781	-147.391711	24.3750896	0	0.003942305
24	124.943781	-149.31887	26.4290352	0	0.000576301
25	124.943781	-151.372816	28.6153042	0	7.86329E-05
26	124.943781	-153.559085	30.9395234	0	1.0026E-05
27	124.943781	-155.883304	33.4074044	0	1.19594E-06
28	124.943781	-158.351185	36.0247392	0	1.3361E-07
29	124.943781	-160.96852	38.7973965	0	1.39952E-08
30	124.943781	-163.741177	41.7313166	0	1.37591E-09
31	124.943781	-166.675097	44.832508	0	1.2709E-10
32	124.943781	-169.776289	48.1070424	0	1.10401E-11
33	124.943781	-173.050823	51.5610509	0	9.02791E-13
34	124.943781	-176.504831	55.2007196	0	6.95603E-14
35	124.943781	-180.1445	59.0322859	0	5.05453E-15
36	124.943781	-183.976067	63.0620345	0	3.46633E-16
37	124.943781	-188.005815	76.3190756	0	2.24136E-17
38	124.943781	-151.678376	0	0	1.1919E-18



ANEXO J: DATOS DE OCTANO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 32 Valores A, B, C y D para el octano

OCTANO

<i>Etapa</i>	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	1.40795585	0	5.53532E+15
2	24.9437806	-26.3517365	1.61746273	0	1.07521E+15
3	24.9437806	-26.5612433	1.8526267	0	1.87909E+14
4	24.9437806	-26.7964073	2.11590074	0	2.96137E+13
5	24.9437806	-27.0596813	2.40990462	0	4.21768E+12
6	24.9437806	-27.3536852	2.737432	0	5.44017E+11
7	24.9437806	-27.6812126	3.10145796	0	63679498692
8	24.9437806	-28.0452386	3.50514711	0	6777950069
9	24.9437806	-28.4489277	3.95186252	0	657273135.8
10	24.9437806	-28.8956431	4.44517574	0	58177348.94
11	24.9437806	-29.3889563	4.988878	0	4708795.935
12	24.9437806	-29.9326586	5.58699331	0	349122.3558
13	24.9437806	-30.5307739	6.15082138	0	23751.93158
14	24.9437806	-131.094602	7.48660343	-6	1485.241877
15	124.943781	-132.430384	8.29437855	0	428.2674247
16	124.943781	-133.238159	9.17088041	0	113.8631344
17	124.943781	-134.114661	10.1202653	0	27.95507219
18	124.943781	-135.064046	11.1468203	0	6.347283208
19	124.943781	-136.090601	12.2549608	0	1.334710763
20	124.943781	-137.198741	13.4492286	0	0.260293427
21	124.943781	-138.393009	14.7342894	0	0.047141539
22	124.943781	-139.67807	16.1149301	0	0.007939262
23	124.943781	-141.058711	17.5960562	0	0.001244938
24	124.943781	-142.539837	19.182689	0	0.00018199
25	124.943781	-144.12647	20.8799629	0	2.48314E-05
26	124.943781	-145.823744	22.6931227	0	3.16609E-06
27	124.943781	-147.636903	24.6275203	0	3.77665E-07
28	124.943781	-149.571301	26.6886128	0	4.21926E-08
29	124.943781	-151.632393	28.8819595	0	4.41955E-09
30	124.943781	-153.82574	31.2132197	0	4.34498E-10
31	124.943781	-156.157	33.6881506	0	4.01337E-11
32	124.943781	-158.631931	36.3126055	0	3.48633E-12
33	124.943781	-161.256386	39.0925323	0	2.85092E-13
34	124.943781	-164.036313	42.0339725	0	2.19664E-14
35	124.943781	-166.977753	45.1430609	0	1.59617E-15
36	124.943781	-170.086841	48.4260248	0	1.09463E-16
37	124.943781	-173.369805	59.3118538	0	7.07797E-18
38	124.943781	-134.671154	0	0	3.76388E-19



ANEXO K: DATOS DE ETILBENCENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 34 Valores A, B, C y D para el etilbenceno

ETILBENCENO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	1.61194862	0	4.61276E+15
2	24.9437806	-26.5557292	1.86049447	0	8.96005E+14
3	24.9437806	-26.8042751	2.14123317	0	1.56591E+14
4	24.9437806	-27.0850138	2.45754687	0	2.4678E+13
5	24.9437806	-27.4013275	2.81309308	0	3.51473E+12
6	24.9437806	-27.7568737	3.2118222	0	4.53348E+11
7	24.9437806	-28.1556028	3.65799664	0	53066248910
8	24.9437806	-28.6017773	4.1562118	0	5648291724
9	24.9437806	-29.0999924	4.71141936	0	547727613.1
10	24.9437806	-29.6552	5.32895343	0	48481124.12
11	24.9437806	-30.272734	6.01456019	0	3923996.612
12	24.9437806	-30.9583408	6.77443181	0	290935.2965
13	24.9437806	-31.7182124	4.91880144	0	19793.27632
14	24.9437806	-129.862582	5.11684661	-5	1237.701564
15	124.943781	-130.060627	5.68728555	0	356.8895206
16	124.943781	-130.631066	6.30841585	0	94.88594531
17	124.943781	-131.252196	6.98351189	0	23.29589349
18	124.943781	-131.927292	7.71596758	0	5.289402673
19	124.943781	-132.659748	8.50929577	0	1.112258969
20	124.943781	-133.453076	9.36712751	0	0.216911189
21	124.943781	-134.310908	10.2932113	0	0.039284616
22	124.943781	-135.236992	11.2914119	0	0.006616052
23	124.943781	-136.235192	12.3657096	0	0.001037449
24	124.943781	-137.30949	13.5201991	0	0.000151658
25	124.943781	-138.46398	14.7590882	0	2.06929E-05
26	124.943781	-139.702869	16.0866967	0	2.63841E-06
27	124.943781	-141.030477	17.5074558	0	3.14721E-07
28	124.943781	-142.451236	19.0259069	0	3.51605E-08
29	124.943781	-143.969687	20.6467008	0	3.68296E-09
30	124.943781	-145.590481	22.3745974	0	3.62082E-10
31	124.943781	-147.318378	24.2144656	0	3.34447E-11
32	124.943781	-149.158246	26.1712828	0	2.90528E-12
33	124.943781	-151.115063	28.2501365	0	2.37576E-13
34	124.943781	-153.193917	30.4562245	0	1.83053E-14
35	124.943781	-155.400005	32.7948573	0	1.33014E-15
36	124.943781	-157.738638	35.2714603	0	9.12193E-17
37	124.943781	-160.215241	43.5318078	0	5.89831E-18
38	124.943781	-118.891108	0	0	3.13657E-19



ANEXO L: DATOS DE XILENO PARA LA PRIMERA ITERACIÓN

Tabla 36 Valores A, B, C y D para el xileno

XILENO

Etapa	A	B	C	D	X
1	0	-24.9437806	1.39466079	0	3.22893E+16
2	24.9437806	-26.3384414	1.61324675	0	6.27203E+15
3	24.9437806	-26.5570274	1.8607135	0	1.09614E+15
4	24.9437806	-26.8044941	2.14017259	0	1.72746E+14
5	24.9437806	-27.0839532	2.45499742	0	2.46031E+13
6	24.9437806	-27.398778	2.80884054	0	3.17343E+12
7	24.9437806	-27.7526211	3.20565247	0	3.71464E+11
8	24.9437806	-28.1494331	3.64970233	0	39538042067
9	24.9437806	-28.5934829	4.1456006	0	3834093292
10	24.9437806	-29.0893812	4.69832466	0	339367868.8
11	24.9437806	-29.6421053	5.31324761	0	27467976.29
12	24.9437806	-30.2570282	5.99617109	0	2036547.075
13	24.9437806	-30.9399517	4.36880315	0	138552.9342
14	24.9437806	-129.312584	4.55948593	-35	8663.910948
15	124.943781	-129.503267	5.07680239	0	2498.226644
16	124.943781	-130.020583	5.6411386	0	664.2016171
17	124.943781	-130.584919	6.25563252	0	163.0712544
18	124.943781	-131.199413	6.92354436	0	37.02581871
19	124.943781	-131.867325	7.64825652	0	7.785812784
20	124.943781	-132.592037	8.43327336	0	1.518378322
21	124.943781	-133.377054	9.28222077	0	0.274992309
22	124.943781	-134.226001	10.1988458	0	0.046312364
23	124.943781	-135.142626	11.1870159	0	0.00726214
24	124.943781	-136.130796	12.2507183	0	0.001061606
25	124.943781	-137.194499	13.3940597	0	0.00014485
26	124.943781	-138.33784	14.6212648	0	1.84689E-05
27	124.943781	-139.565045	15.9366763	0	2.20305E-06
28	124.943781	-140.880457	17.3447543	0	2.46123E-07
29	124.943781	-142.288535	18.8500754	0	2.57807E-08
30	124.943781	-143.793856	20.4573328	0	2.53457E-09
31	124.943781	-145.401113	22.1713364	0	2.34113E-10
32	124.943781	-147.115117	23.9970128	0	2.03369E-11
33	124.943781	-148.940793	25.9394064	0	1.66304E-12
34	124.943781	-150.883187	28.0036803	0	1.28137E-13
35	124.943781	-152.947461	30.1951183	0	9.31098E-15
36	124.943781	-155.138899	32.5191275	0	6.38535E-16
37	124.943781	-157.462908	40.2922833	0	4.12882E-17
38	124.943781	-115.651583	0	0	2.1956E-18



BIBLIOGRAFÍA

- ATSDR. (20 de Enero de 2016). *Toxic Substances Portal* . Obtenido de <http://www.atsdr.cdc.gov/substances/toxsubstance.asp?toxid=14>
- Balzhiser, R., Samuels, M., & Eliassen, J. (1974). *Termodinámica Química para Ingenieros*. Prentice Hall.
- EPA. (Octubre de 2005). *United States Environment Protection Agency*. Obtenido de www.epa.gov/iris/subst/index.html
- GeoSalud. (20 de Enero de 2016). *Benceno y su Impacto en la Salud Humana*. Obtenido de <http://www.geosalud.com/Ambiente/benceno.htm>
- Henley, E. J., & Seader, J. D. (1994). *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. España: Editorial Reverté.
- King, C. J. (1988). *Separation Processes. Chemical Engineering Series*. Nueva York: McGraw-Hill.
- Kister, H. Z. (1992). *Distillation Design*. McGraw-Hill.
- Kyle, B. G. (1992). *Chemical and Process Thermodynamics*. USA: Prentice Hall.
- NORMA OFICIAL MEXICANA. (30 de enero de 2005). Especificaciones de los combustibles fosiles para la proteccion ambiental. *NOM-086-SEMARNAT-SENER-SCFI-2005*. México.
- Pemex, R. (2004). *Auditoria de seguridad industrial y proteccion ambiental, Gasolina Pemex Magna*.
- Pemex, R. (07 de 2010). *Pemex refinacion. Terminal de almacenamiento y distribución en Toluca*. Obtenido de <http://www.ref.pemex.com/octanaje/octa29/29termi.htm>
- Prosen, E. J., & Rossini, F. D. (1945). *Heats of combustion and formation of the paraffin hydrocarbons at 25° C*. J. Res. NBS.
- Smith, J., & Ness, H. V. (1989). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. México: McGraw-Hill.



webbook. (25 de enero de 2016). *webbook*. Obtenido de
<http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C540841&Units=SI&Mask=7FF>

Wiberg, K. B., Wasserman, D. J., & Martin, E. (1984). *Enthalpies of hydration of alkenes. 2. The n-heptenes and n-pentenes*. Phys. Chem.