



**ESPE**  
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS  
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

1

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA  
Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

# MODELO Y SIMULACIÓN DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE PARA EL FRACCIONAMIENTO DE UNA MEZCLA SINTÉTICA DE HIDROCARBUROS UTILIZANDO EL MÉTODO RIGUROSO DE WANG-HENKE EN MATLAB

Rodrigo Cevallos H.



# CONTENIDO

---

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

MODELACIÓN

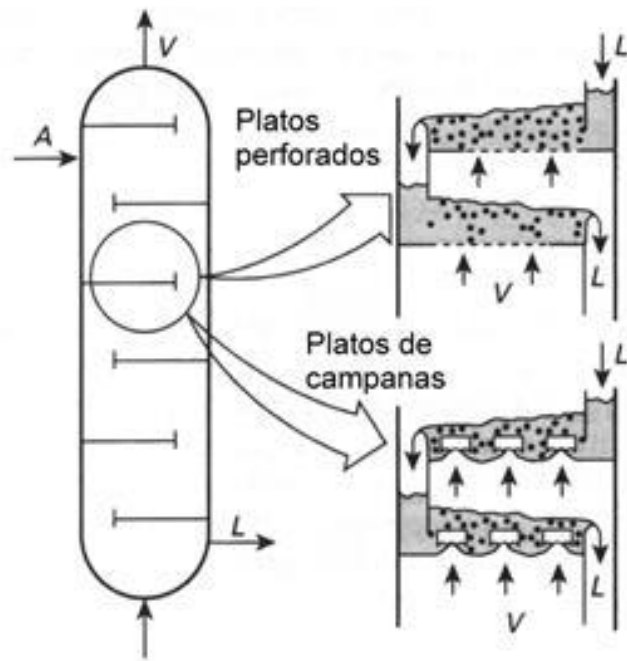
RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

# INTRODUCCIÓN

## Destilación

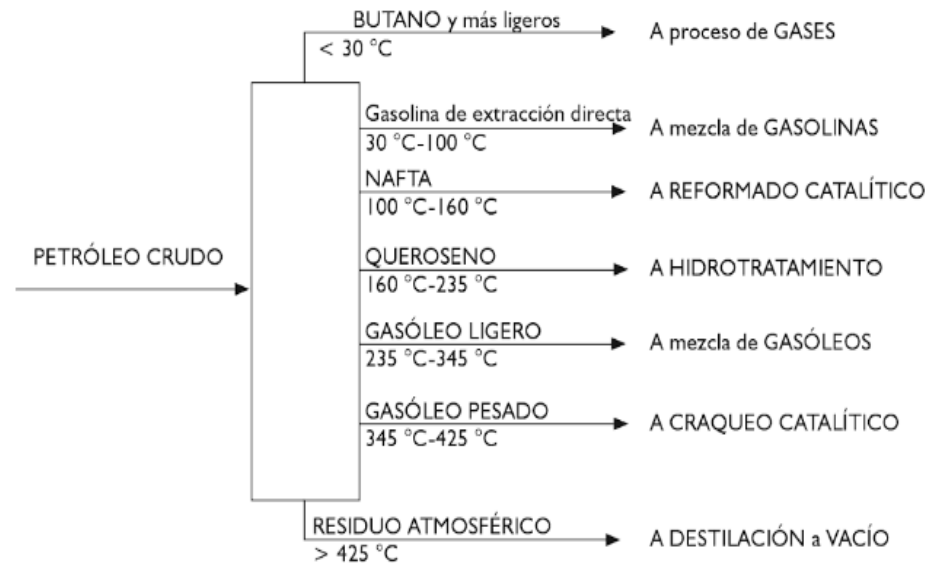
### Destilación fraccionada



Fuente: (Galíndez, 2015)

### Destilación de crudo

#### Destilación atmosférica

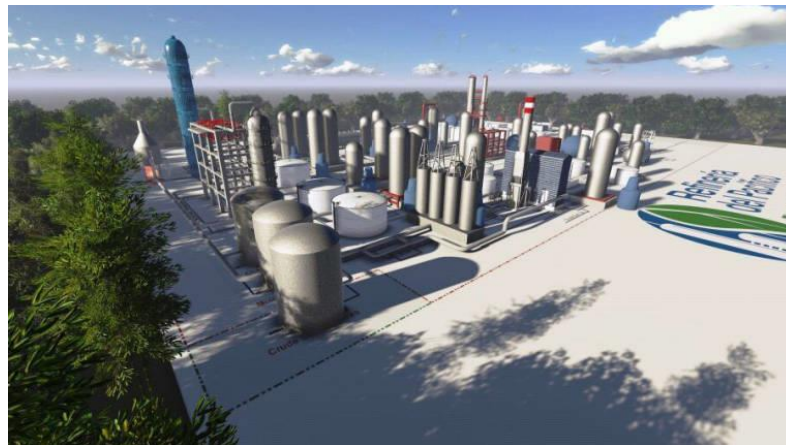


Fuente: (Leffler, 2000)

# INTRODUCCIÓN

## Nafta virgen

- Principales componentes de la nafta ligera son de  $iC_4$ ,  $nC_4$ ,  $iC_5$ ,  $C_6$  y  $C_7$
- Fracciones predominantes: n-butano, i-pentano y n-pentano
- Utilizada para la producción de olefinas y aromáticos como el xileno, tolueno y benceno, así como etileno y propileno.



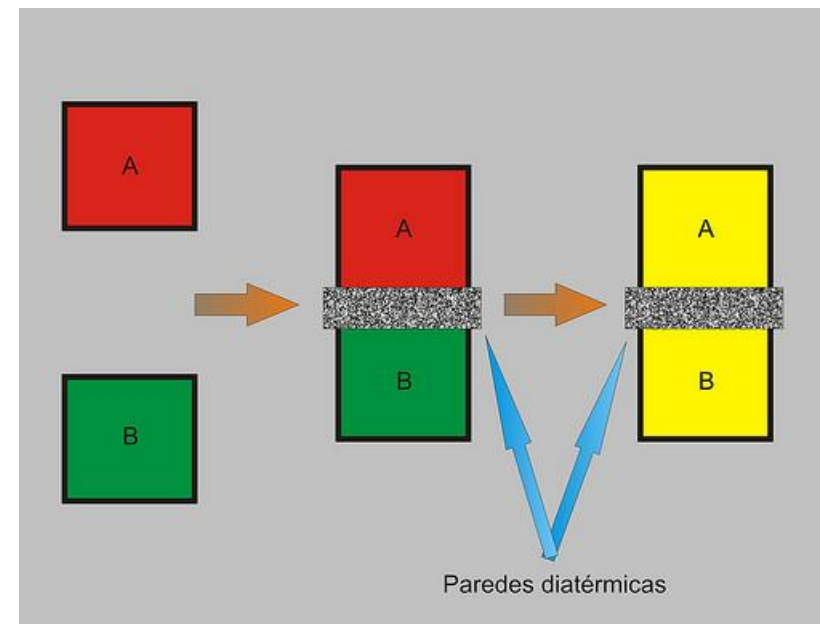
Fuente: Refinería del Pacífico, Ecuador

# INTRODUCCIÓN

## Equilibrio termodinámico

### Equilibrio termodinámico

- Presión y Temperatura iguales en todos los puntos
- No existe cambio en el tiempo
- Equilibrio de potenciales



Fuente: (Ruiz de la Garza, 2011)

# INTRODUCCIÓN

## Representación de equilibrio

### Aproximaciones ideales:

- Ley de Raoult

$$y_i P = x_i P_i^{sat}$$

### Parámetros que definen el comportamiento real:

- Formulación phi-phi

$$y_i \hat{\Phi}_i^v = x_i \hat{\Phi}_i^l$$

- Formulación gamma-phi

$$y_i \Phi_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat}$$

# CONTENIDO

---

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

MODELACIÓN

RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

# OBJETIVOS

## Objetivo general

Desarrollar un programa de simulación de una columna de destilación multicomponente de platos por el método riguroso de Wang-Henke, con el fin de predecir el comportamiento cercano a la realidad del fraccionamiento de la nafta virgen, la cual se presentará en una interfaz gráfica de Matlab.



## Objetivos específicos

- Programar el equilibrio phi-phi para un sistema multicomponente real a presión constante (BUBL T) con el uso de la ecuación de estado cúbica de Swab-Redlink-Kwong, utilizando el lenguaje de programación de Matlab.
- Programar un módulo de resolución para el método riguroso de Wang-Henke de ecuaciones MESH utilizando el lenguaje de programación de Matlab.
- Evaluar los datos obtenidos de la separación de la nafta y las composiciones de salida del destilado y del fondo de la columna de destilación.
- Interpretar los datos obtenidos de la destilación y compararlos con el simulador Aspen Hysys.

# CONTENIDO

---

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

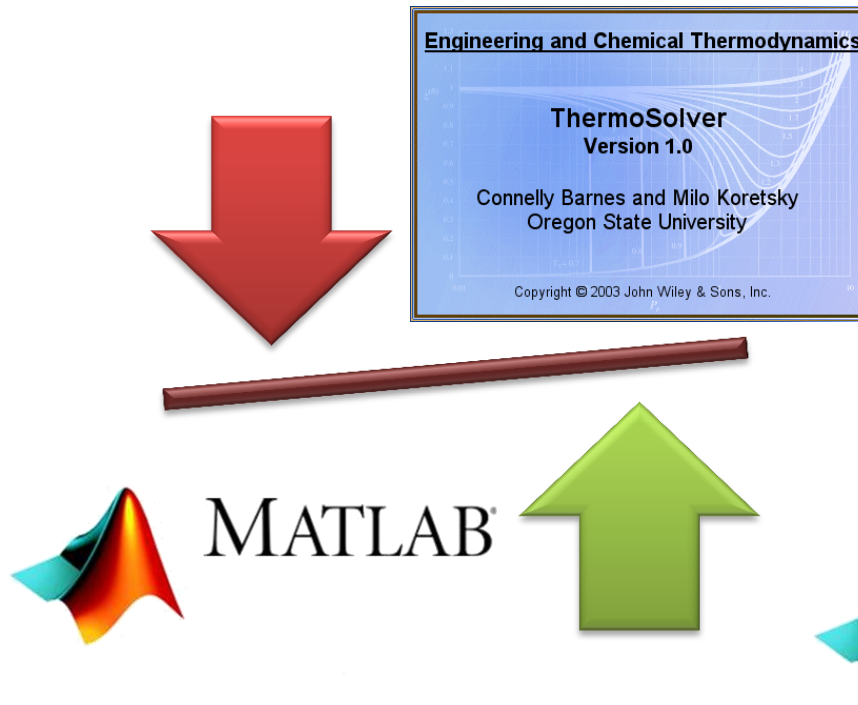
MODELACIÓN

RESULTADOS

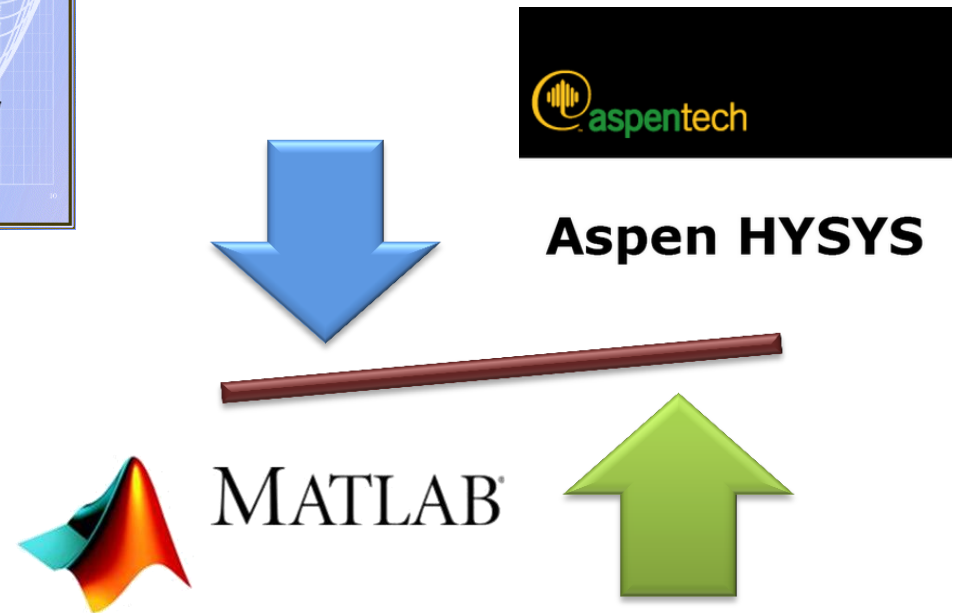
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

# MODELACIÓN

## Equilibrio

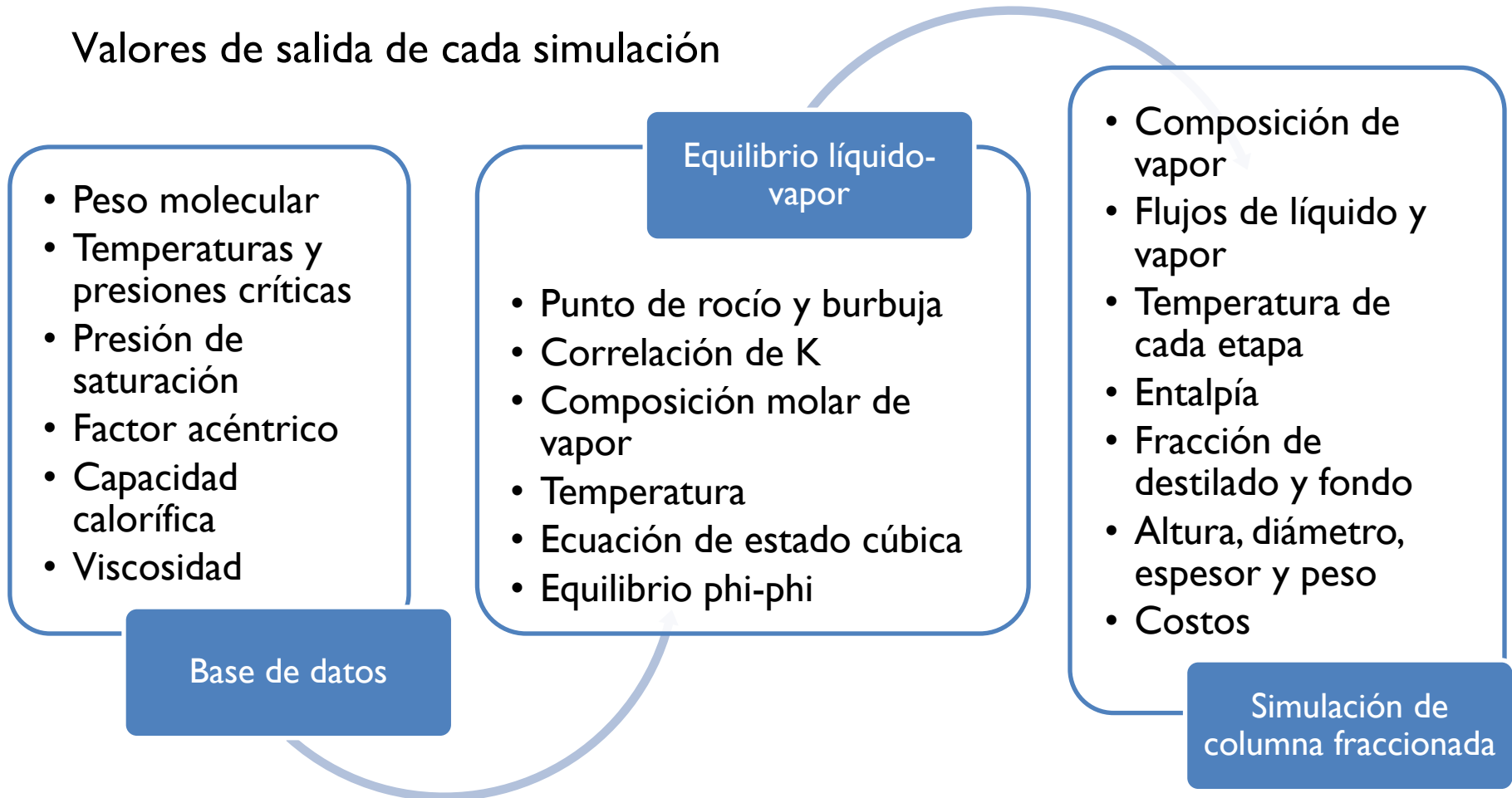


## Destilación



# MODELACIÓN

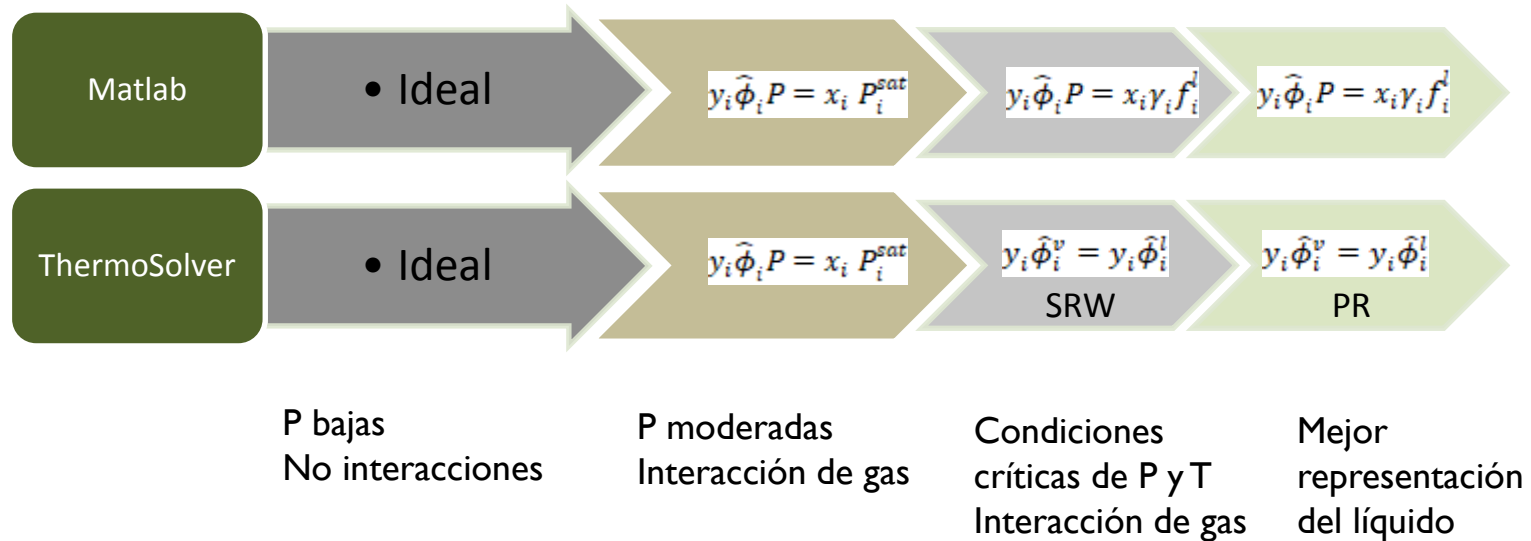
Valores de salida de cada simulación



# MODELACIÓN

## Simulación del equilibrio

Simulación de 4 programas



# MODELACIÓN

## Modelo de Equilibrio

Las incógnitas de las ecuaciones son:  $P_i^{sat}$ ,  $\beta_i$ ,  $Z_i^l$ ,  $Z_i^v$ ,  $I_i^l$ ,  $I_i^v$ ,  $\ln\phi_i^l$  y  $\ln\phi_i^v$

$$\beta_i \equiv \frac{b_i P_i^{sat}}{RT}$$

$$Z_i^l = \beta_i + (Z_i^l + \epsilon\beta_i)(Z_i^l + \sigma\beta_i) \left( \frac{1 + \beta_i - Z_i^l}{q_i\beta_i} \right)$$

$$Z_i^v = 1 + \beta_i - q_i\beta_i \left( \frac{Z_i^v - \beta_i}{(Z_i^v - \epsilon\beta_i)(Z_i^v - \sigma\beta_i)} \right)$$

$$I_i^l = \frac{1}{\sigma - \epsilon} \ln \frac{(Z_i^l - \sigma\beta_i)}{(Z_i^l - \epsilon\beta_i)} \quad I_i^v = \frac{1}{\sigma - \epsilon} \ln \frac{(Z_i^v - \sigma\beta_i)}{(Z_i^v - \epsilon\beta_i)}$$

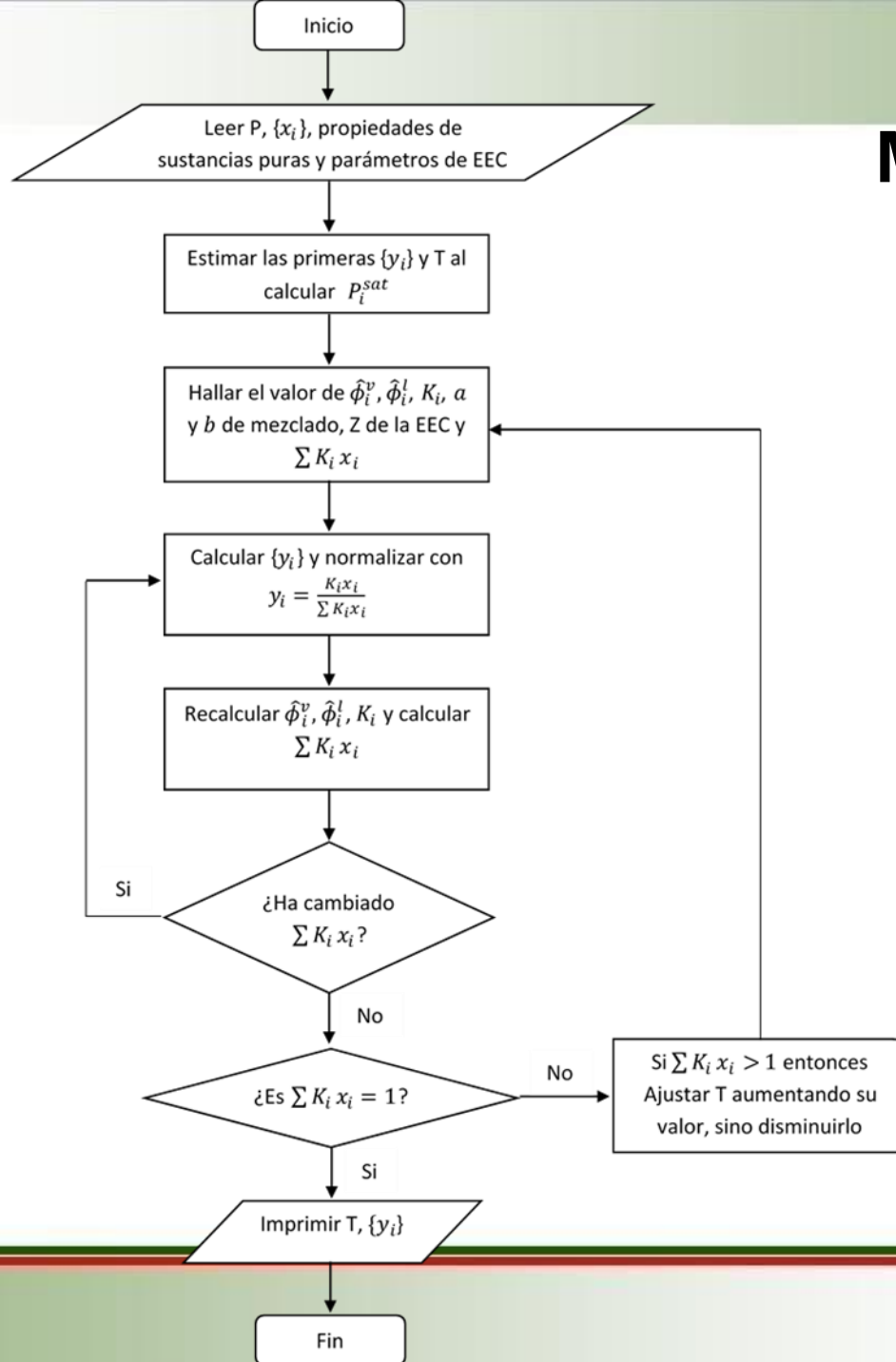
$$\ln \hat{\phi}_i^l = Z_i^l - 1 - \ln(Z_i^l - \beta_i) - q_i I_i^l$$

$$\ln \hat{\phi}_i^v = Z_i^v - 1 - \ln(Z_i^v - \beta_i) - q_i I_i^v$$

Fuente: (Smith, Van Ness, & Abbott, 2007)



# MODELACIÓN



Algoritmo de programación

# MODELACIÓN

## Variables de entrada

#	Compuesto	Composición molar
1	n-butano	0,1473
2	n-pentano	0,2696
3	n-hexano	0,0906
4	n-heptano	0,0215
5	2-metilbutano	0,2466
6	2-metilpentano	0,0938
7	Metilciclopentano	0,0655
8	Ciclopentano	0,0291
9	Ciclohexano	0,0227
10	Benceno	0,0084
11	Tolueno	0,0049

Flujo de alimentación



# MODELACIÓN

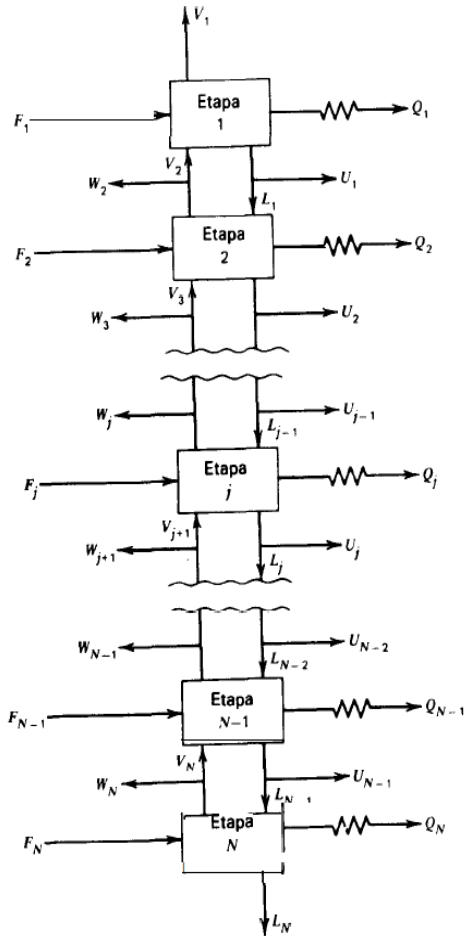
## Variables de entrada

### Parámetros de operación

- La suma de las composiciones de entrada debe ser igual a la unidad.
- La presión de trabajo debe ser entre 1 y 10 bares.
- La temperatura de entrada del fluido debe estar entre los 273 a 500 K.
- El número de etapas mínimas deben ser 5 y el máximo 50.
- El plato de alimentación debe estar entre las etapas establecidas por el usuario y no debe ser ni la primera ni la última.
- La razón de reflujo mínimas es de 0 y la máxima de 5.

# MODELACIÓN

## Ecuaciones



$$A_i x_{ij-1} + B_j x_{ij} + C_j x_{ij+1} = D_j$$

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

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

$$C_j = V_{j+1}K_{ij+1} \quad 1 \leq j \leq N-1$$

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

Estimación inicial del flujo de vapor y temperatura de cada etapa

$$H_v = \sum_{i=1}^C (H_i^o y_i) + RT \left[ Z_v - 1 - \frac{3A^2}{2B} \ln \left( 1 + \frac{BP}{Z_v} \right) \right]$$

# MODELACIÓN

## Condición de convergencia

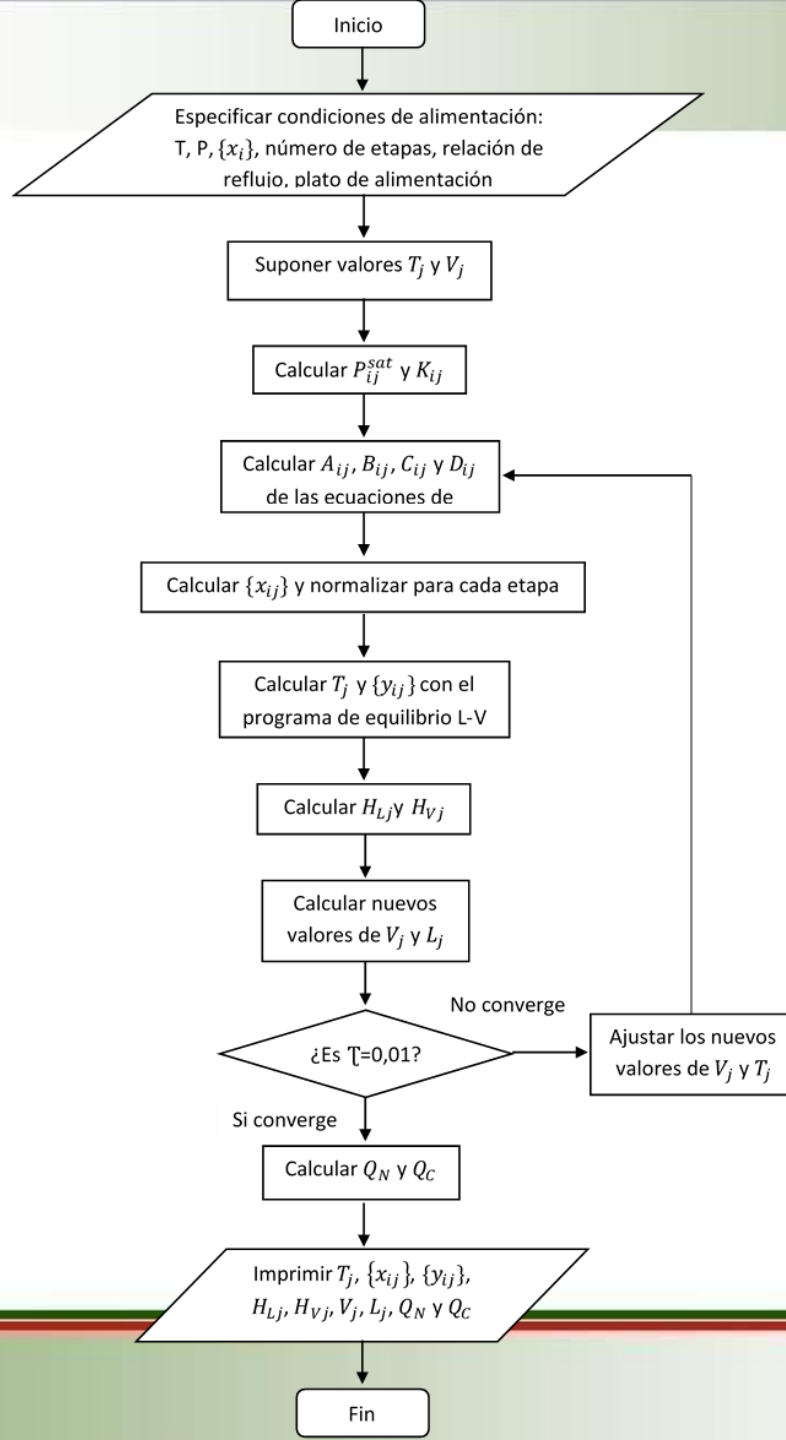
Condición de convergencia

$$\mathcal{T} = \sum_{j=1}^N [T_j^k - T_j^{k-1}]^2 \leq 0.01$$

Calores

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j H_{Fj} - W_j H_{Vj} - U_j H_{Lj}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 H_{V1} - L_N H_{LN}$$

# MODELACIÓN

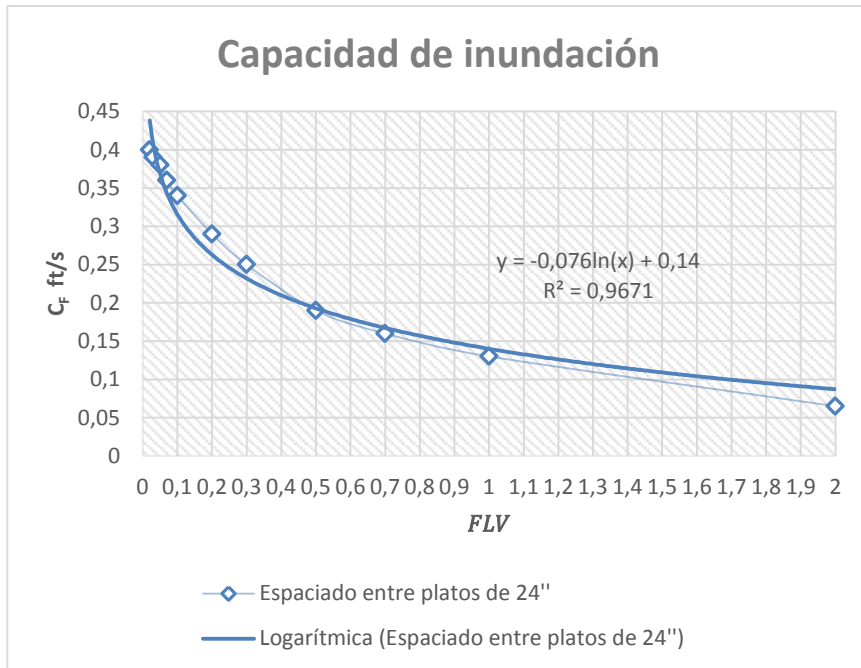


Algoritmo de programación

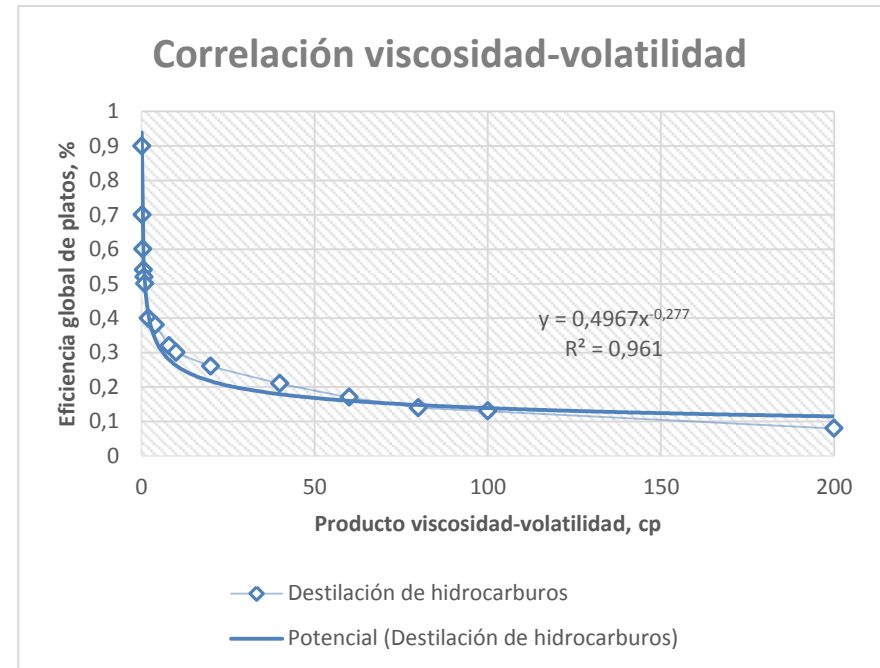
# MODELACIÓN

## Diseño de la columna

### Diámetro de la columna



### Altura de la columna



$$F_{LV} = \frac{LM_L}{VM_V} \left( \frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0.5}$$

$$N_R = \frac{N_T}{E_o}$$

# MODELACIÓN

## Espesor

- Viento
- Terremoto
- Corrosión
- Diferencia de presión a la externa

$$t_p = \frac{Pd D_i}{2SE - 1.2 Pd}$$

## Peso

$$W = \pi(D_i + ts)(L + 0.8D_i)ts\rho_M$$

Material de construcción	Factor de materia $F_M$
Acero al carbón	1
Acero de baja aleación	1.2
Acero inoxidable 304	1.7
Acero inoxidable 316	2.1
Nickel-200	5.4
Titanio	7.7

# MODELACIÓN

## Costos

Costos total:

$$C_p = F_M C_V + C_{PL}$$

Costo del cuerpo de la columna:

$$C_V = \exp[7.2756 + 0.18255 \ln W + 0.02297 (\ln W)^2]$$

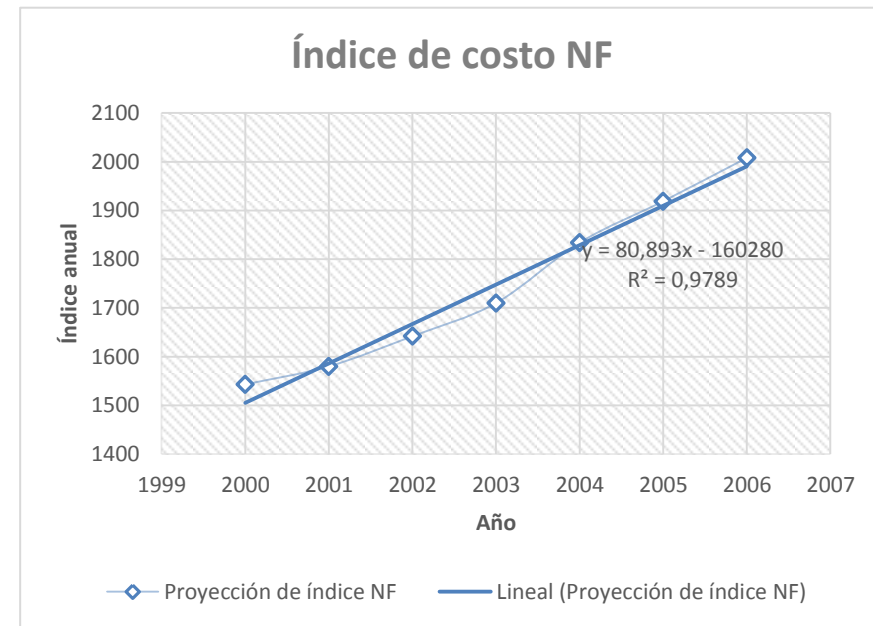
Costo de accesorios:

$$C_{PL} = 300.9(D_i)^{0.63316}(L)^{0.80161}$$

Costo de platos:

$$C_T = N_T F_{NT} F_{TT} F_{TM} C_{BT}$$

$$\text{Costo del equipo} = \text{Costo base} \left( \frac{\text{índice}}{\text{índice base}} \right)$$



# CONTENIDO

---

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

MODELACIÓN

RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



# RESULTADOS

## Interfaz gráfica de usuario

Command Window

```
TORRE DE DESTILACIÓN PARA N ETAPAS DE UNA MEZCLA DE HIDROCARBUROS (NAFTA)  
EMPLEANDO LA ECUACIÓN DE ESTADO DE SOAVE/REDLINCH/KWONG  
MEDIANTE EL MÉTODO RIGUROSO DE PUNTO DE BURBUJA DE WANG-HENKE
```

```
Ingrese el Flujo de entrada en kmol/h
```

```
100
```

```
Ingrese la Presión de operación en Bares
```

```
1
```

```
Ingrese la Temperatura de entrada en Kelvin
```

```
319
```

```
Ingrese el Número de Etapas
```

```
20
```

```
Seleccione el plato de alimentación
```

```
10
```

```
Ingrese el Flujo del destilado en Kmol
```

```
60
```

```
Ingrese la Razón de reflujo
```

```
1.5
```

```
fx |
```

Etapa 12: x1: 0.005367 x2: 0.518710 x3: 0.065907 x4: 0.012183 x5: 0.201075 x6: 0.081821 x7: 0.047200 x8: 0.044161 x9: 0.015005 x10: 0.005847 x11: 0.002723 y1: 0.018444 y2: 0.570271 y3: 0.

Etapa 13: x1: 0.001926 x2: 0.543084 x3: 0.066797 x4: 0.012199 x5: 0.170808 x6: 0.084635 x7: 0.047740 x8: 0.049092 x9: 0.015098 x10: 0.005897 x11: 0.002723 y1: 0.006746 y2: 0.610843 y3: 0.

Etapa 14: x1: 0.000679 x2: 0.558524 x3: 0.068451 x4: 0.012238 x5: 0.141910 x6: 0.089734 x7: 0.048746 x8: 0.055732 x9: 0.015268 x10: 0.005990 x11: 0.002729 y1: 0.002420 y2: 0.641213 y3: 0.

Etapa 15: x1: 0.000235 x2: 0.561337 x3: 0.071978 x4: 0.012326 x5: 0.114808 x6: 0.099412 x7: 0.050907 x8: 0.064422 x9: 0.015640 x10: 0.006193 x11: 0.002742 y1: 0.000853 y2: 0.660459 y3: 0.

Etapa 16: x1: 0.000079 x2: 0.544245 x3: 0.079834 x4: 0.012533 x5: 0.089372 x6: 0.117331 x7: 0.055794 x8: 0.074828 x9: 0.016540 x10: 0.006669 x11: 0.002775 y1: 0.000295 y2: 0.663982 y3: 0.

Etapa 17: x1: 0.000025 x2: 0.496443 x3: 0.096717 x4: 0.013074 x5: 0.065387 x6: 0.147479 x7: 0.066561 x8: 0.084881 x9: 0.018792 x10: 0.007783 x11: 0.002858 y1: 0.000099 y2: 0.642808 y3: 0.

Etapa 18: x1: 0.000007 x2: 0.408603 x3: 0.128910 x4: 0.014930 x5: 0.043221 x6: 0.189051 x7: 0.087994 x8: 0.089661 x9: 0.024274 x10: 0.010201 x11: 0.003147 y1: 0.000032 y2: 0.583391 y3: 0.

Etapa 19: x1: 0.000002 x2: 0.286656 x3: 0.177586 x4: 0.022801 x5: 0.024444 x6: 0.227298 x7: 0.122936 x8: 0.082840 x9: 0.036143 x10: 0.014672 x11: 0.004624 y1: 0.000009 y2: 0.473551 y3: 0.

Etapa 20: x1: 0.000000 x2: 0.160220 x3: 0.225960 x4: 0.053629 x5: 0.011052 x6: 0.233421 x7: 0.163359 x8: 0.062565 x9: 0.056621 x10: 0.020951 x11: 0.012222 y1: 0.000002 y2: 0.320091 y3: 0.

Número de iteraciones: 19.000000

Cantidad de destilado: 60.000000 kmol/h a 19.940000 grados celcius.

Con composición del líquido: x1: 0.245871 x2: 0.342796 x3: 0.000019 x4: 0.000000 x5: 0.404226 x6: 0.000368 x7: 0.000014 x8: 0.006705 x9: 0.000001 x10: 0.000001 x11: 0.000000

Cantidad de fondo: 40.000000 kmol/h a 58.450000 grados celcius.

Con composición del líquido: x1: 0.000000 x2: 0.160220 x3: 0.225960 x4: 0.053629 x5: 0.011052 x6: 0.233421 x7: 0.163359 x8: 0.062565 x9: 0.056621 x10: 0.020951 x11: 0.012222

Calor de Condensador: 7589686.650681 KJ/h con una temperatura de: 19.940000 grados celcius.

=====DISEÑO=====

Para una torre de platos perforados o caperuzas de barboteo, con una separación de 0.6096 metros (24 pulgadas) por cada plato y un porcentaje de inundación del 85 por ciento.  
El diámetro de la torre es: 2.072809 metros.

Con una eficiencia global de la columna del 51.430000 por ciento y un número de platos reales igual a 37.000000.

La altura de la torre es: 26.822400 metros.

El espesor de la torre es: 0.009543 metros

El peso de la torre es: 13977.383781 kilogramos

=====COSTOS=====

Costo del cuerpo de la columna para el año 2018 es: 164911.254335 dólares

Costo de los platos de la columna para el año 2018 es: 76982.668144 dólares

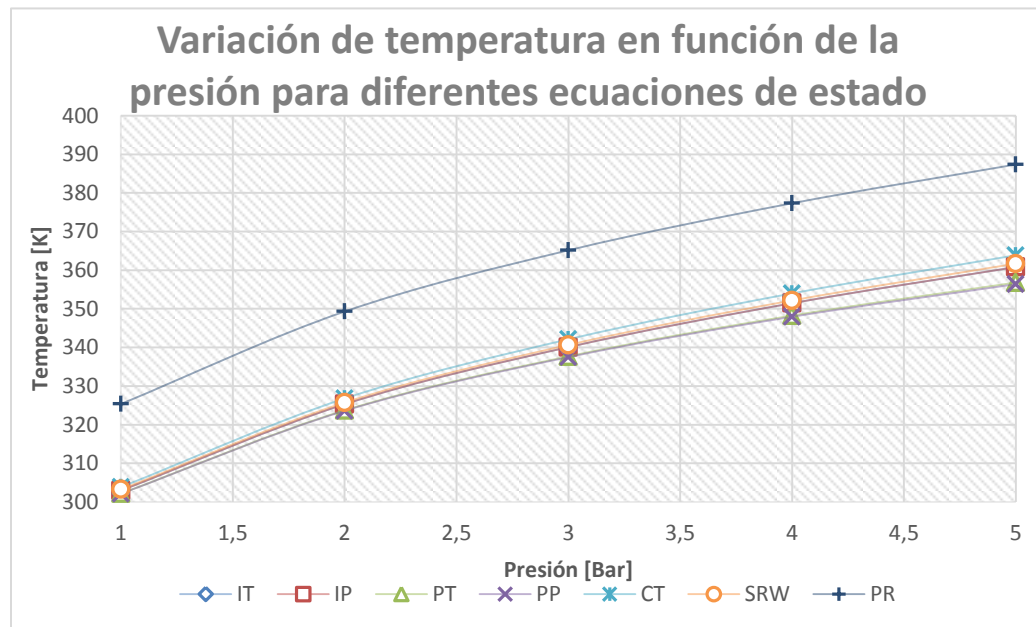
Costo total de la columna para el año 2018 considerando factores de terremoto, carga de viento y corrosión e incluyendo plataformas, escaleras y domo es: 241893.922480 dólares>>



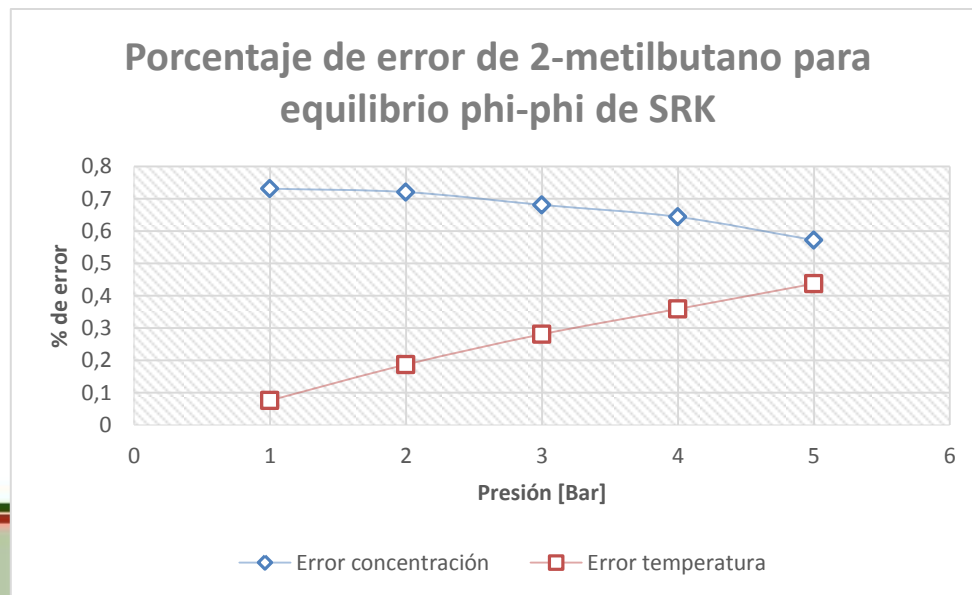
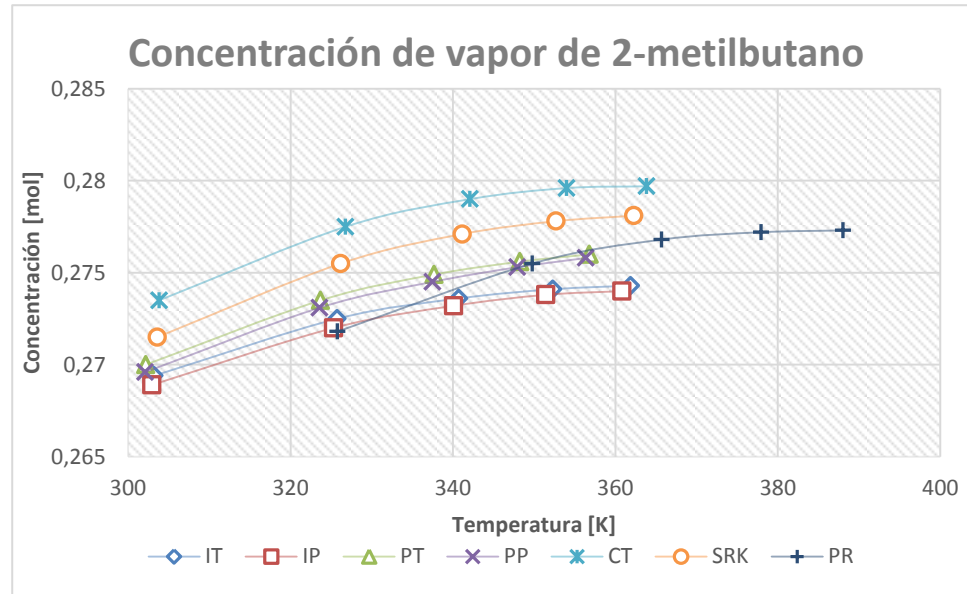
# RESULTADOS

## Simulación Equilibrio

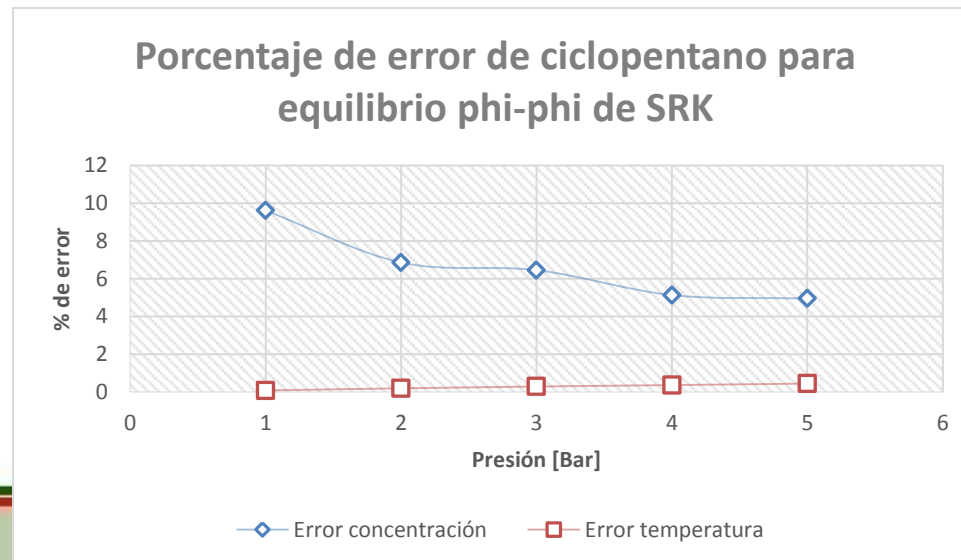
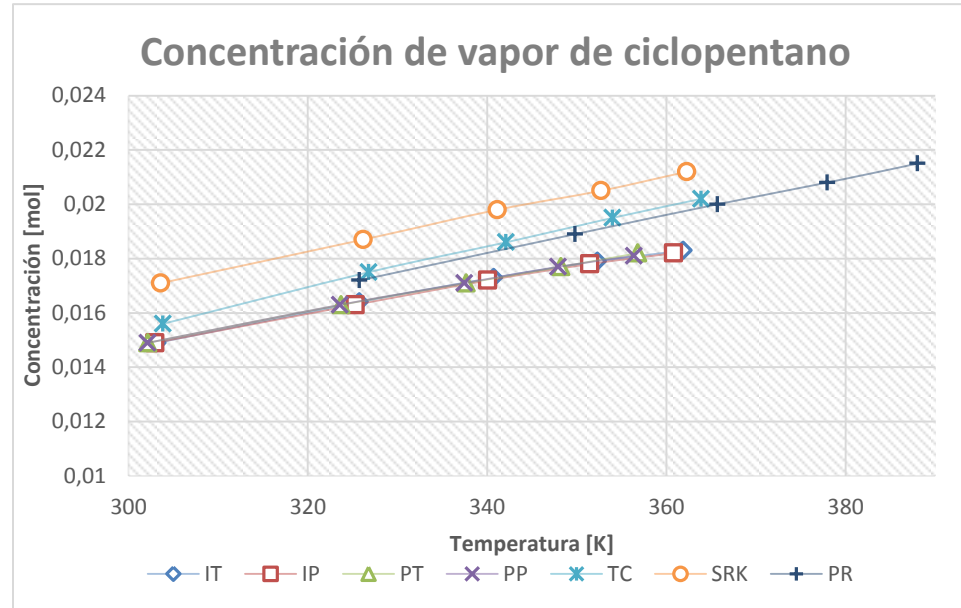
- IT e IP: comparación de la simulación ideal y de ThermoSolver
- PT y PP: comparación de simulación y de ThermoSolver representación phi
- CT y SRK: comparación de simulación con la ecuación de estado Soave-Redlinch-Kwong y de ThermoSolver



# RESULTADOS



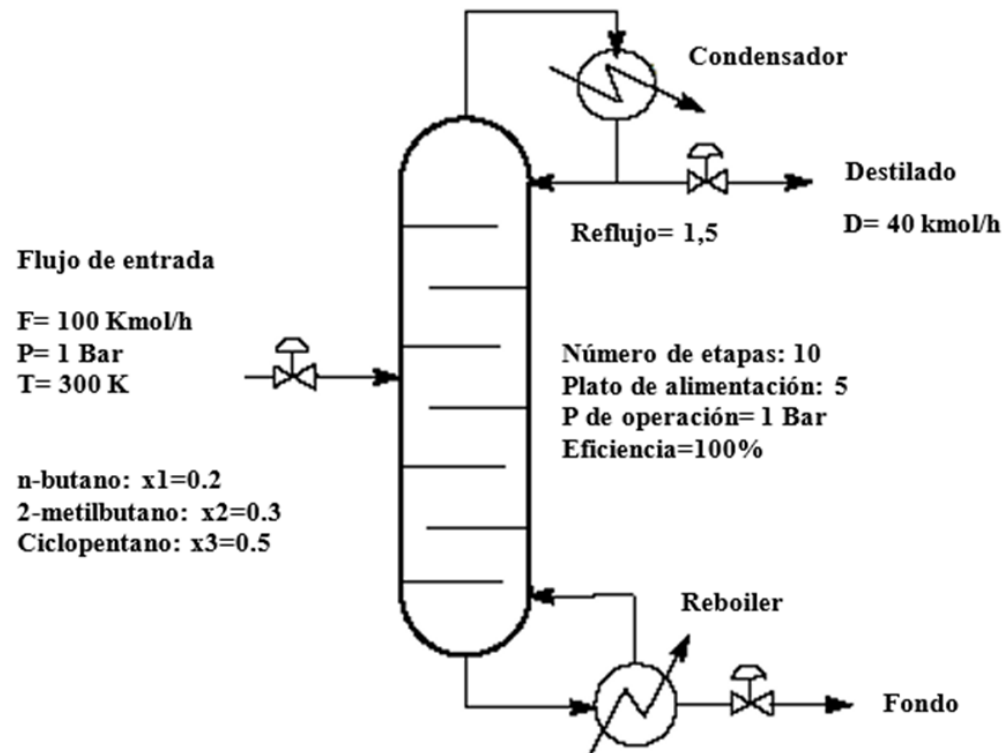
# RESULTADOS



# RESULTADOS

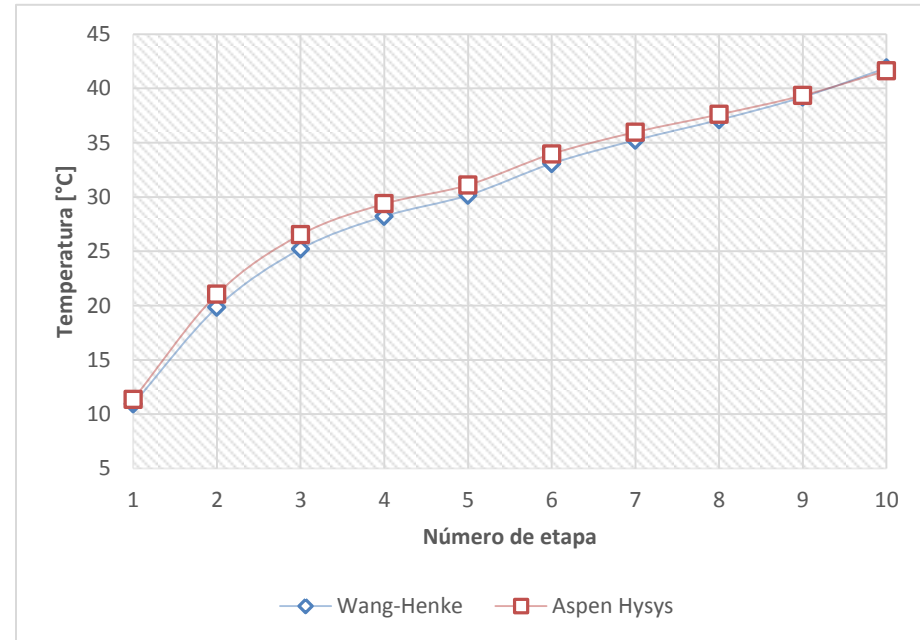
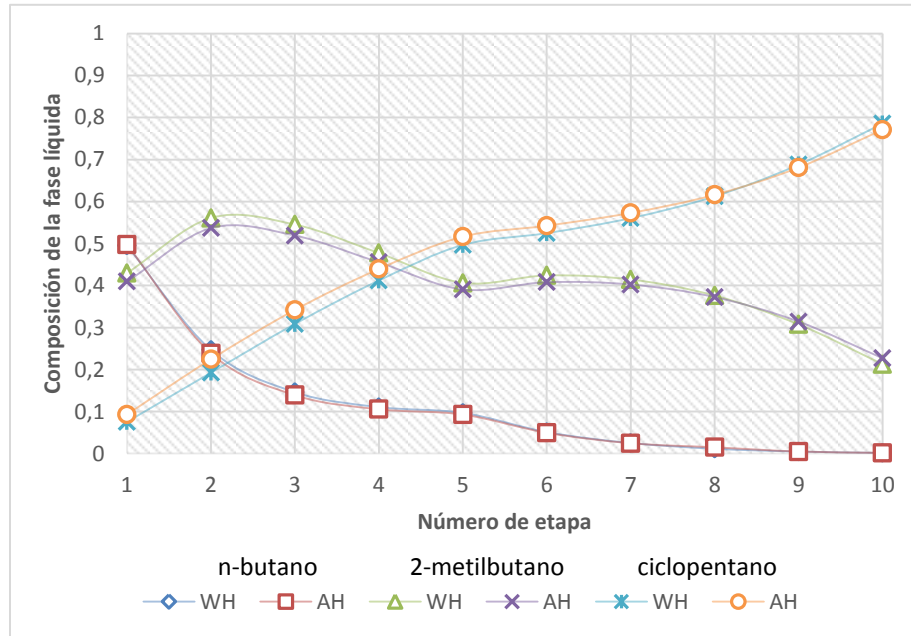
## Simulación Destilación

### Ejemplo I



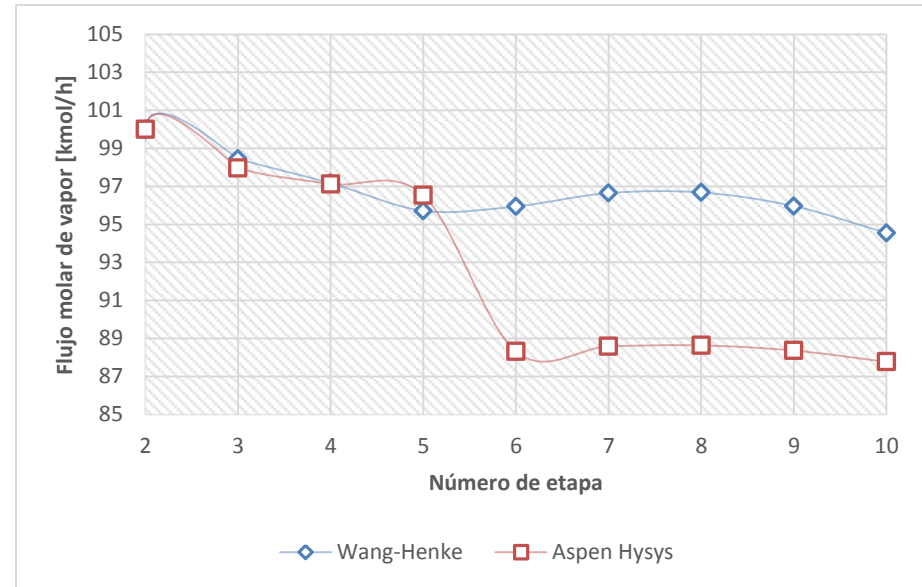
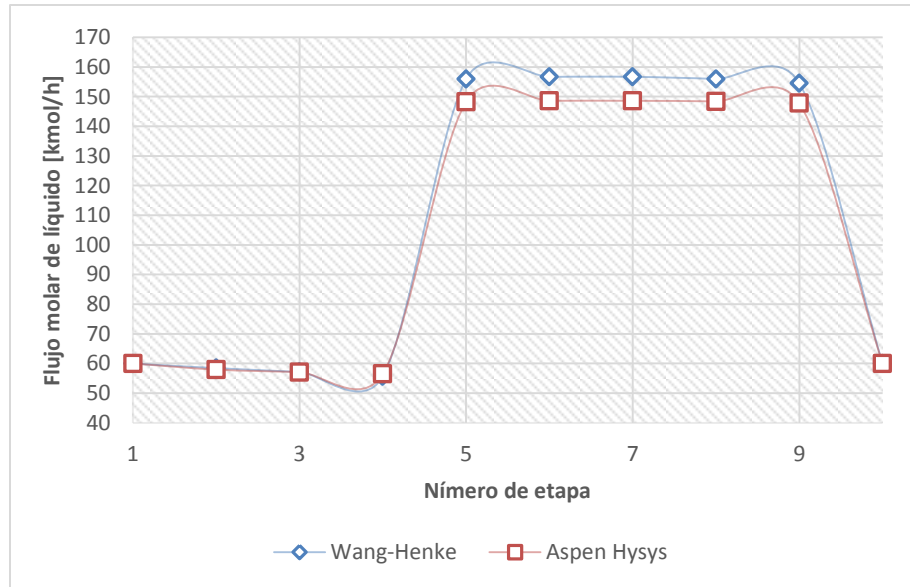
# RESULTADOS

## Ejemplo I



# RESULTADOS

## Ejemplo I





# RESULTADOS

Interacciones: 7 en menos de 30 segundos

Calor:

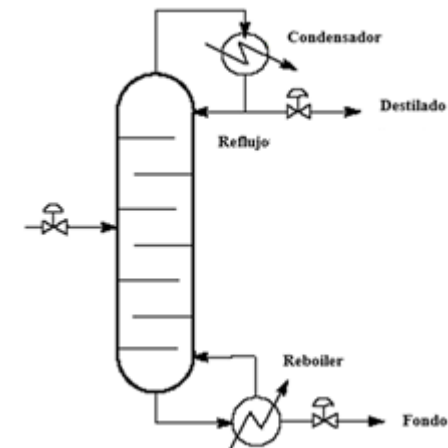
Equipo	Modelo	Wang-Henke	Aspen Hysys
Condensador	$Q_c$ ( $\times 10^5$ KJ/h)	50,44	25,52
Reboiler	$Q_b$ ( $\times 10^5$ KJ/h)	51,65	23,74

Diseño

- Eficiencia global de platos del 54%
- Altura de 14,63 metros con 17 platos reales
- Diámetro de 1,64 metros.
- Espesor de 5,4 milímetros
- Peso total de la columna de 3518,19 kilogramos

Costos

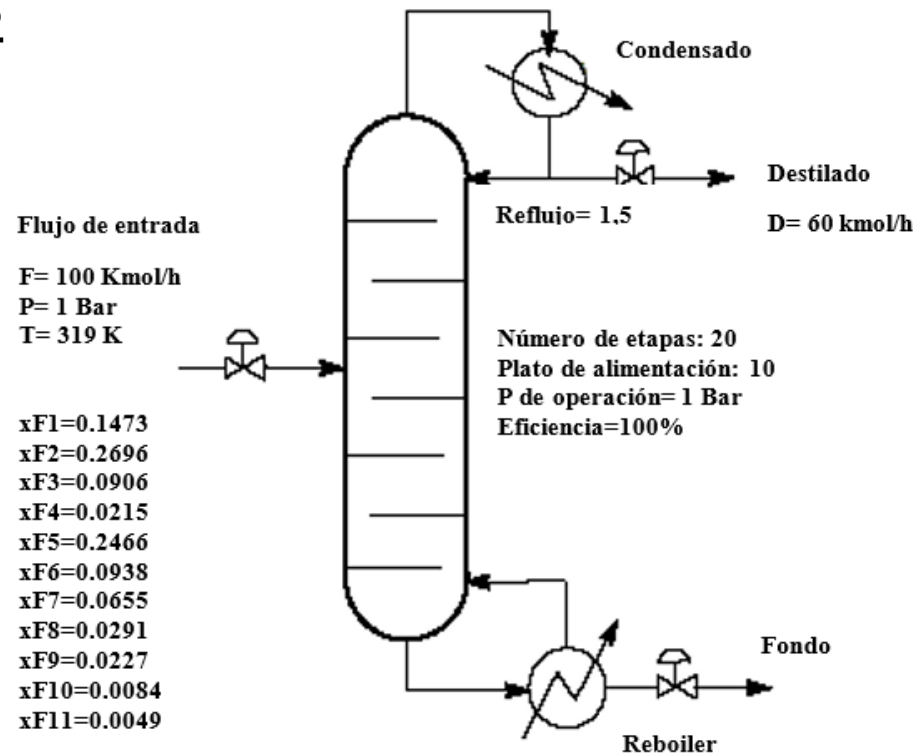
- Valor total de la columna de 141166,53 dólares
- Costo del cuerpo de la columna de 69713,88 dólares y de 71452,64 dólares para el relleno de platos.



# RESULTADOS

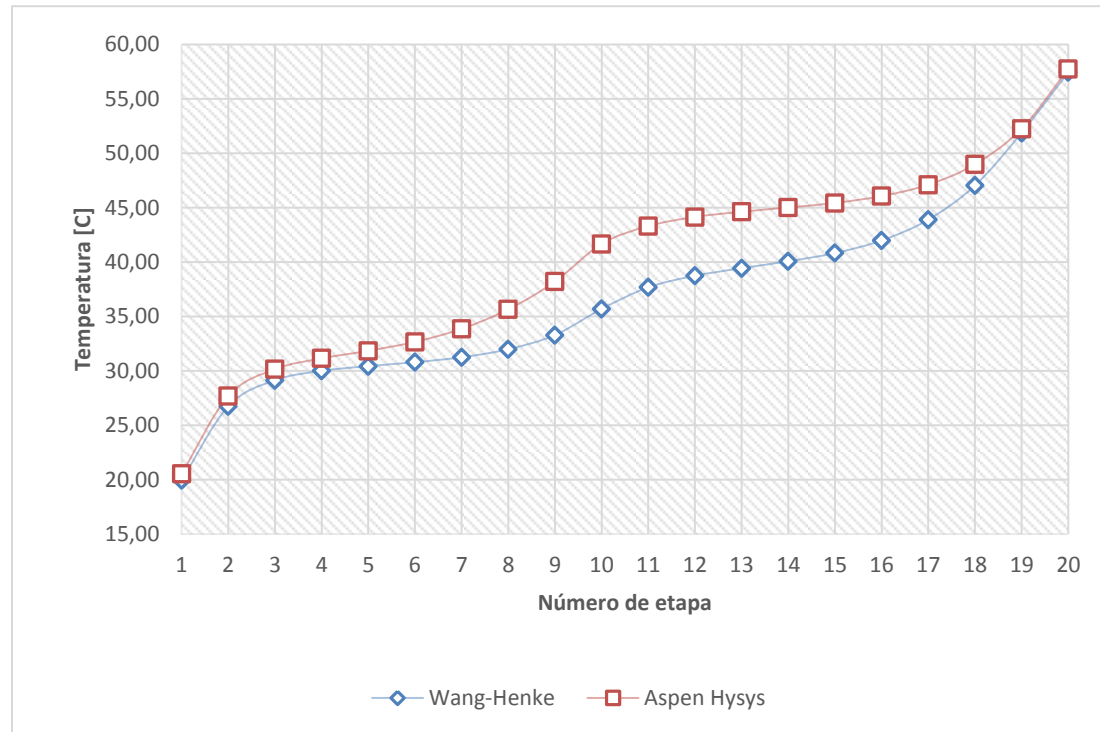
## Simulación Destilación

### Ejemplo 2



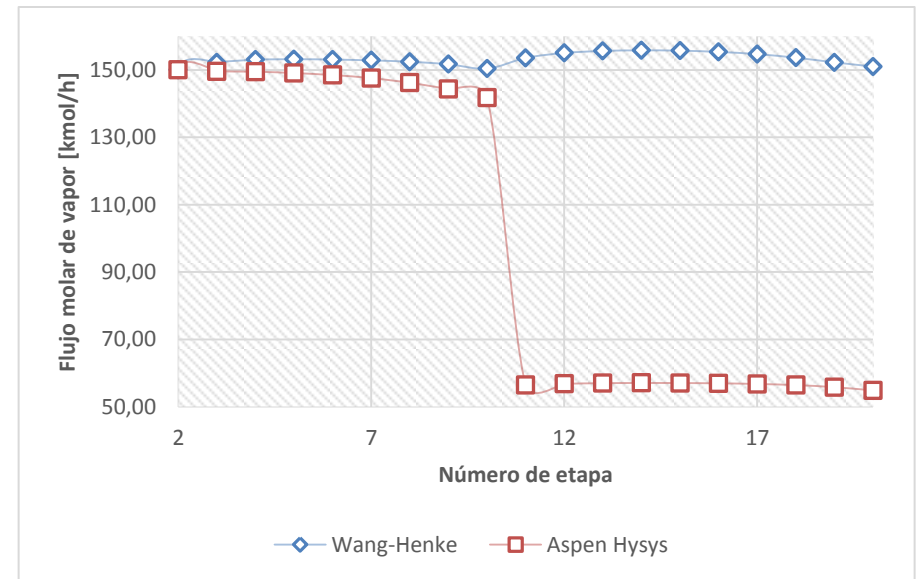
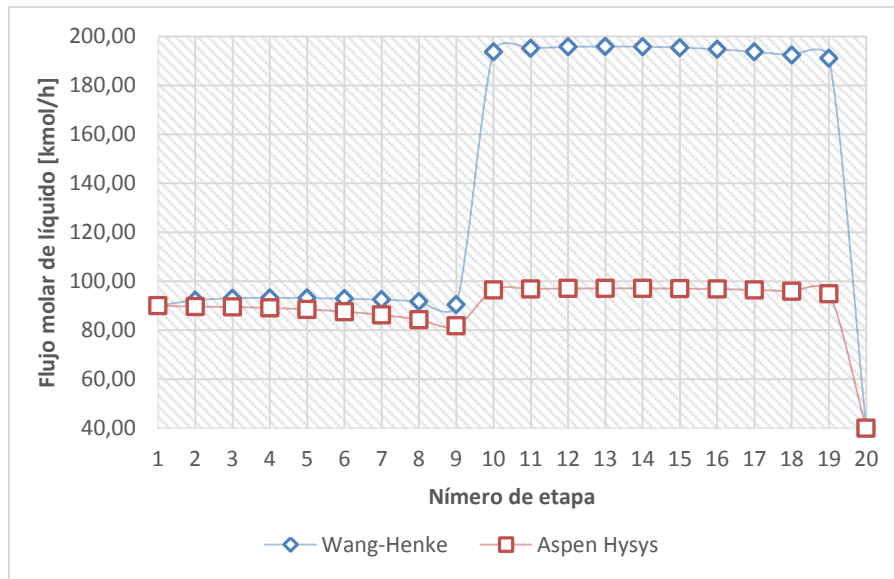
# RESULTADOS

## Ejemplo 2



# RESULTADOS

## Ejemplo 2



# RESULTADOS

Interacciones: 19 en menos de 2 minutos

Calor:

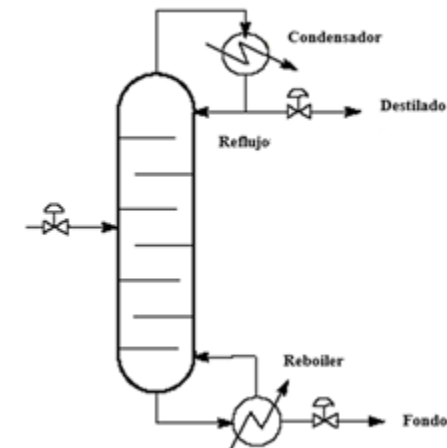
Equipo	Modelo	Wang-Henke	Aspen Hysys
Condensador	$Q_c$ ( $\times 10^6$ KJ/h)	75,89	39,21
Reboiler	$Q_b$ ( $\times 10^6$ KJ/h)	78,60	16,12

Diseño

- Eficiencia global de platos del 51,43%
- Altura de 26,82 metros con 37 platos reales
- Diámetro de 2,07 metros.
- Espesor de 9,5 milímetros
- Peso total de la columna de 13977,38 kilogramos

Costos

- Valor total de la columna de 241893,92 dólares
- Costo del cuerpo de la columna de 164911,25 dólares y de 76982,66 dólares para el relleno de platos.



# CONTENIDO

---

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

MODELACIÓN

RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

# CONCLUSIONES

- Los modelos idealizados presentaron una diferencia porcentual menor al 1%.
- Soave-Redlich-Kwong una diferencia porcentual del 3,25% para la concentración de vapor y de 0,267% para la temperatura.
- La simulación por el método de Wang-Henke es favorable a presiones moderadas y número de etapas inferiores a 30
- La concentración y temperatura poseen una diferencia porcentual menor al 20% para fracciones molares de baja concentración y menor al 5% para fracciones molares de alta concentración
- La temperatura la diferencia porcentual máxima establecida en el fondo y el destilado fue del 5%.

# CONCLUSIONES

Las corrientes de líquido y vapor que circulan a lo largo de la columna mostraron un incremento considerable a partir de la etapa de alimentación

La temperatura presentó la misma tendencia de aumento en la etapa de alimentación, pero siendo corregida en fondo y destilado

La eficiencia global de platos fue entre 50% y 60%.

La estimación de costos presentó una diferencia menor al 2% para los valores de construcción de equipos de refinería, con un valor aproximado de 242000 dólares para la construcción de una columna de separación de nafta virgen.



# RECOMENDACIONES

El método de simulación de Wang-Henke presenta un algoritmo que puede ser mejorado con la inclusión de corrección de balances de energía.

En el equilibrio se debe considerar cambios de variable para formulación de ecuaciones más complejas como la de Peng Robinson.

La estimación de costos está sujeta a la inflación de cada país y de impuestos propios de cada región, siendo el valor simulado una aproximación valedera en el mercado internacional y un punto de partida para una estimación inicial de costo de construcción.

---

# GRACIAS