



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO

FACULTADES DE QUÍMICA E INGENIERÍA

Maestría en Ciencias de la Energía

“Uso de columnas de destilación reactiva para la producción de combustible renovable de aviación”

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de:
Maestra en Ciencias de la Energía

Presenta: IBQ. Maritza Lisette Soria Ornelas

Dirigido por: Dra. Claudia Gutiérrez Antonio
Co-dirigido por: Dr. Fernando Israel Gómez Castro

Santiago de Querétaro, Qro. Octubre 2016.



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultades de Química e Ingeniería
Maestría en Ciencias de la Energía

Tema de Tesis:

“Uso de columnas de destilación reactiva para la producción de combustible renovable de aviación”

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de maestra en ciencias de la energía

Presenta:

IBQ. Maritza Lisette Soria Ornelas

Dirigido por:

Dra. Claudia Gutiérrez Antonio

Co-director:

Dr. Fernando Israel Gómez Castro

Dra. Claudia Gutiérrez Antonio
Presidente



Firma



Firma

Dr. Fernando Israel Gómez Castro
Secretario

Dra. Sandra Andrea Mayén Hernández
Vocal

Mayén Adz S.A.

Firma

Dr. José Santos Cruz
Suplente

Rubrica

Firma

Dr. Jorge Noel Gracida Rodríguez
Suplente



Firma



M.S.P. Sergio Pacheco Hernández
Director de la Facultad de Química

Guana

Dra. Ma. Guadalupe Flavia Loarca Piña
Directora de Investigación y Posgrado

Centro Universitario
Querétaro, Qro.
Noviembre del 2016

RESUMEN

En la actualidad, la búsqueda de fuentes alternas de energía renovable se ve motivada principalmente por dos razones: el decremento en la producción de hidrocarburos fósiles, y el cambio climático provocado por las emisiones de gases de efecto invernadero, parcialmente derivadas de las actividades antropogénicas. Particularmente, en el sector transporte se ha buscado garantizar la sostenibilidad mediante el desarrollo de biocombustibles, que puedan sustituir a los combustibles fósiles de manera parcial o total. En este contexto, el sector de la aviación ha establecido estrategias precisas para mitigar el impacto de sus emisiones de CO₂; una de ellas es el desarrollo de un combustible renovable de aviación conocido como bioturbosina, cuyas características y propiedades fisicoquímicas son prácticamente idénticas a las de la turbosina fósil. De los procesos propuestos para su producción se destaca el proceso de hidrotratamiento, patentado por UOP Honeywell; sin embargo, éste presenta interesantes áreas de oportunidad. Una de ellas es la reducción del consumo energético del proceso mediante el uso de estrategias de intensificación de procesos, particularmente columnas de destilación reactiva. En el presente trabajo se propone el uso de columnas de destilación reactiva para la producción de combustible renovable de aviación, considerando *Jatropha curcas* como materia prima. La aplicación de esta estrategia de intensificación permitió reducir los costos de producción en 1.54% así como el impacto ambiental en 25%, e incrementar el rendimiento hacia los hidrocarburos de interés en 5.34%, con respecto al proceso convencional.

Palabras clave: bioturbosina, destilación reactiva, hidrotratamiento, intensificación de procesos.

ABSTRACT

Currently, the search for alternative sources of renewable energy is motivated mainly for two reasons: the decrease in the production of fossil fuels, and climate change caused by emissions of greenhouse gases, partially resulting from human activities. Particularly, the transport sector is interested in ensure its sustainability, through the development of biofuels that can replace fossil fuels, partially or totally. In this context, the aviation sector has established specific strategies to mitigate the impact of CO₂ emissions; one of them is the development of a renewable aviation fuel known as biojet fuel, whose characteristics and physicochemical properties are practically identical to those of the fossil jet fuel. There are several processes to produce biojet fuel, but the hydrotreatment process, patented by Honeywell UOP, is the most promissory; however, it presents interesting opportunity areas. One of them is the reduction of energy consumption in the process by using process intensification strategies, particularly reactive distillation columns. In this work the use of reactive distillation columns for the production of renewable aviation fuel, considering *Jatropha curcas* as raw material, is proposed. The implementation of this intensification strategy enables to reduce production costs, in 1.54%, and environmental impact, in 25%, and increase the yield to hydrocarbons in the range of jet fuel in 5.34%, in comparison with the conventional process.

Keywords: biojet fuel, reactive distillation, hydrotreating, process intensification.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. José Santos Cruz y Dr. Eduardo Castaño Tostado por el voto de confianza e inmejorable apoyo que me han brindado. Por la excelencia y alto grado de compromiso que caracterizan el desempeño de su labor, muchas gracias.

Un especial agradecimiento a la Dra. Claudia Gutiérrez Antonio por su contribución y guía en el desarrollo del presente trabajo de tesis, por su calidad humana, su responsabilidad y compromiso hacia el proyecto, y su invaluable amistad. Ha sido un gran honor trabajar y aprender de ti doctora, gracias por impulsarme a ir más allá y por todo lo que me has enseñado, mil gracias.

Al Dr. Fernando Israel Gómez Castro y MC. Araceli Romero Izquierdo por el apoyo técnico, asesorías y contribuciones a este trabajo de investigación.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el recurso económico otorgado durante el periodo del programa de maestría.

DEDICATORIA

A mi esposo Guillermo por todo el apoyo, los consejos, la amistad y el amor que me brindas. Este logro es nuestro, eres muy importante para mí. Gracias. Te amo.

A mis padres Cosme y Lupita y mis hermanos Carlos Alberto y José Manuel. Gracias por ser mi base, por siempre estar allí. Los amo.

A esas personas increíbles que la vida me ha dado el honor de llamar amigos, con quien he compartido tanto y que me han ayudado a crecer. Un honor cruzar camino en esta vida y contar con ustedes. Alma, Doña Juanita, Atzintli, Ireri, Karla, Lore, Marco Alan, José, Daniela y Bruno. Muchas gracias.

Muchas gracias a todas y cada una de las personas que de una u otra manera se han convertido en parte importante de mi vida y que han contribuido en el logro de mis metas. A la familia de mi esposo, en especial mis cuñadas Chio y Lulú y sus esposos Lalo y Hector. A mis hermosos y chiquitines sobrinos que adoro: Leo, Cris, Marifer, Wendy y Fanny.

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN.....	I
ABSTRACT.....	II
AGRADECIMIENTOS	III
DEDICATORIA	IV
ÍNDICE DE FIGURAS.....	VIII
ÍNDICE DE TABLAS	IX
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1 Descripción del problema.....	2
1.2 Objetivos	2
1.2.1 Objetivo general	2
1.2.2 Objetivos particulares.....	2
1.3 Justificación.....	3
CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES.....	4
2.1 El sector transporte y la aviación	4
2.2 Biocombustibles.....	6
2.3 Bioturbosina	9
2.3.1 Procesos de producción de bioturbosina	10
2.3.1.1 El proceso de hidrotratamiento	10
2.4 Intensificación de procesos: destilación reactiva	15
2.4.1 Fundamentos de la destilación reactiva.....	17
2.4.2 Diseño de procesos de destilación reactiva	19
CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA.....	23
3.1 Selección de la materia prima	23

3.2 Proceso de hidrot ratamiento convencional: escenario base	25
3.2.1 Modelado del sistema reactivo	25
3.2.1.1 Reacciones de hidrod esoxigenación (HDO)	26
3.2.1.2 Reacciones de hidrocraqueo/hidroisomerización	27
3.2.2 Modelado de la zona de separación.....	29
3.3 Proceso intensificado mediante destilación reactiva	30
3.4 Cálculo de costo total anual	33
3.5 Estimación de precios de venta	40
3.6 Estimación de emisiones de CO ₂	41
CAPÍTULO 4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	44
4.1 Escenario base: Proceso de hidrot ratamiento convencional.....	44
4.2 Acondicionamiento de reactivos	44
4.3 Reacciones de hidrod esoxigenación.....	45
4.4 Reacciones de hidrocraqueo/hidroisomerización.....	47
4.5 Escenarios intensificados	53
4.5.1 Modelado de columnas de destilación reactiva.....	54
4.5.2 Definición de los escenarios.....	56
4.5.3 Escenario 1	57
4.5.4 Escenario 2.....	66
4.5.5 Escenario 3.....	75
4.5.6 Escenario 4.....	83
4.6 Resultados del análisis económico	92
4.7 Resultados del cálculo de emisiones de CO ₂	96
CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES.....	98
5.1 Conclusiones	98
5.2 Trabajo futuro.....	99

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	100
APÉNDICE A	104
Esquema de reacciones HDO.....	104
Esquema de reacciones hidrocraqueo/hidroisomerización.....	105

Índice de Figuras

Figura 1. Clasificación de los biocombustibles de acuerdo a su fuente de obtención.....	7
Figura 2. Cuota estimada de energía renovable en el contexto del consumo mundial final de energía en 2014	7
Figura 3. Producción mundial de biocombustibles, participación por tipo y por país/región, 2015	8
Figura 4. Vías identificadas de la producción de biocombustibles de aviación y el estado de la certificación ASTM.....	11
Figura 6. Esquema de una columna de destilación reactiva ideal	18
Figura 7. Modelo y ecuaciones cinéticas para el hidrot ratamiento de aceite de <i>Jatropha curcas</i>	26
Figura 8. Modelo cinético propuesto para el hidrocraqueo del VGO	27
Figura 9. Modelo cinético modificado para el sistema de estudio	28
Figura 10. Ecuaciones cinéticas para el sistema de estudio	28
Figura 11. Intensificación del proceso de hidrot ratamiento mediante destilación reactiva. Alternativa 1.....	31
Figura 12. Intensificación del proceso de hidrot ratamiento mediante destilación reactiva. Alternativa 2.....	31
Figura 13. Intensificación del proceso de hidrot ratamiento mediante destilación reactiva. Alternativa 3.....	32
Figura 14. Acondicionamiento de corrientes de alimentación de reactivos al reactor HDO	45
Figura 15. Distribución de productos en el reactor de HDO.....	47
Figura 16. Distribución de productos del reactor de hidrocraqueo/hidroisomerización	49
Figura 17. Secuencia de destilación directa convencional para el escenario base	51
Figura 18. Diagrama de proceso del hidrot ratamiento convencional: Escenario base.....	52
Figura 19. Diagrama del proceso de hidrot ratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 1	58
Figura 20. Perfil de composición de la fase líquida de la columna reactiva CR-CRI-1. Escenario 1	60
Figura 21. Perfil de temperatura de columna CR-CRI-1. Escenario 1	60
Figura 22. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-1. Escenario 1.....	61
Figura 23. Diagrama de proceso de hidrot ratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 2	66
Figura 24. Perfil de composición de la fase líquida de la columna reactiva CR-CRI-2. Escenario 2.....	69
Figura 25. Perfil de temperatura de columna CR-CRI-2. Escenario 2.....	70
Figura 26. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-02. Escenario 2.....	70
Figura 27. Diagrama de proceso de hidrot ratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 3	75
Figura 28. Perfil de composición de la fase líquida de la columna reactiva CR-CRI-3. Escenario 3	77
Figura 29. Perfil de temperatura de columna CR-CRI-3. Escenario 3.....	78
Figura 30. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-3. Escenario 3.....	79
Figura 31. Diagrama del proceso de hidrot ratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 4	84
Figura 32. Perfil de composición de la fase líquida de la columna CR-CRI-4. Escenario 4.....	86
Figura 33. Perfil de temperatura de columna reactiva CR-CRI-4. Escenario 4	87
Figura 34. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-4. Escenario 4.....	88

Índice de Tablas

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas de la turbosina	5
Tabla 2. Perfil de composición de ácidos grasos del aceite de <i>Jatropha curcas</i>	24
Tabla 3. Composición del flujo de alimentación de aceite de <i>Jatropha</i>	24
Tabla 4. Parámetros cinéticos para el hidrotreamiento de aceite de <i>Jatropha curcas</i>	27
Tabla 5. Datos cinéticos para hidrocrqueo	28
Tabla 6. Parámetros cinéticos para la hidroisomerización del n-C ₁₆	29
Tabla 7. Equipos auxiliares en el acondicionamiento de la corriente de hidrógeno	45
Tabla 8. Equipos auxiliares en el acondicionamiento de la corriente de aceite de <i>Jatropha curcas</i>	45
Tabla 9. Condiciones de operación y resultados del reactor HDO.....	46
Tabla 10. Condiciones de operación y resultados del reactor hidrocrqueo/hidroisomerización	48
Tabla 11. Composición en el reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización y rendimientos	50
Tabla 12. Equipos de acondicionamiento de la corriente de entrada al tren de destilación	50
Tabla 13. Secuencia de separación directa convencional.....	52
Tabla 14. Resumen de equipos de proceso del escenario base.....	53
Tabla 15. Diseño de las configuraciones de destilación reactiva	55
Tabla 16. Equipos auxiliares de acondicionamiento de corrientes de entrada a columna reactiva. Escenario 1	58
Tabla 17. Condiciones de las corrientes de entrada a la columna reactiva. Escenario 1	59
Tabla 18. Composición de flujos de salida y rendimientos de columna reactiva CR-CRI-1. Escenario 1	62
Tabla 19. Características de las corrientes de salida columna CR-CRI-1. Escenario 1	63
Tabla 20. Condiciones de la corriente de entrada a la zona de separación. Escenario 1	63
Tabla 21. Características de la secuencia de separación. Escenario 1	64
Tabla 22. Resumen de equipos de proceso. Escenario 1	65
Tabla 23. Equipos auxiliares y características de las corrientes de entrada a la columna reactiva. Escenario 2	68
Tabla 24. Composición de flujos de salida y rendimientos de la columna reactiva CR-CRI-2. Escenario 2	71
Tabla 25. Características de las corrientes de salida de la columna reactiva CR-CRI-2. Escenario 2	72
Tabla 26. Acondicionamiento de la corriente de entrada a la zona de separación. Escenario 2	72
Tabla 27. Características de la secuencia de separación. Escenario 2.....	73
Tabla 28. Resumen de equipos de proceso. Escenario 2.....	74
Tabla 29. Equipos auxiliares en el acondicionamiento de las corrientes de entrada a columna reactiva. Escenario 3	76
Tabla 30. Composición de los flujos de salida y rendimientos de la columna reactiva CR-CRI-3. Escenario 3	80
Tabla 31. Características de las corrientes de salida columna CR-CRI-2. Escenario 3	80
Tabla 32. Acondicionamiento de corrientes de entrada a la zona de separación. Escenario 3.....	81
Tabla 33. Características de las columnas de destilación convencionales de zona de separación. Escenario 3	82
Tabla 34. Resumen de equipos de proceso. Escenario 3.....	82
Tabla 35. Acondicionamiento de las corrientes de entrada a columna reactiva CR-CRI-4. Escenario 4.....	85
Tabla 36. Composición de los flujos de salida y rendimientos de la columna reactiva CR-CRI-4. Escenario 4	89
Tabla 37. Características de las corrientes de salida columna CR-CRI-4. Escenario 4	89
Tabla 38. Acondicionamiento de la corriente entrada a la zona de separación. Escenario 4	90

Tabla 39. Secuencia de separación para el escenario 4	91
Tabla 40. Resumen de equipos de proceso del escenario 4.....	92
Tabla 41. Estimación de costos por escenario de estudio	93
Tabla 42. Requerimientos energéticos por escenario de estudio.....	94
Tabla 43. Excedente de energía eléctrica producida	95
Tabla 44. Precio de venta estimado para la bioturbosina	96
Tabla 45. Estimación de las emisiones de CO ₂ por escenario de estudio	97
Tabla 46. Estimación por escenario de CO ₂ no emitido.....	97

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

La sostenibilidad es un principio clave en la gestión de los recursos naturales. Es un hecho que la dependencia energética hacia los combustibles fósiles es insostenible en el futuro; tanto por el agotamiento de éstos recursos no renovables como por las emisiones de gases de efecto invernadero asociados con su uso. Otro problema con los combustibles derivados del petróleo es su desigual distribución geográfica. Del total mundial de reservas de crudo, el 77.2 % se encuentra ubicado en los países pertenecientes a la Organización de Países Exportadores de Petróleo (OPEP) (BP, 2014); y de ese 77.2 %, el 56.6 % de las reservas probadas del mundo se localizan en la región de Medio Oriente (Brennan y Owende, 2010; BP, 2014). El nivel de reservas de petróleo crudo existentes en el mundo es de gran importancia para la planeación del desarrollo y las actividades económicas de los países. Su evolución trasciende a los ámbitos de seguridad energética y geopolítica, siendo para algunos países un tema que encabeza las agendas de las relaciones internacionales (SENER, 2010).

En años recientes, otro aspecto de gran interés que ha provocado un cambio fundamental en las políticas públicas es el impacto ambiental. La promoción del desarrollo sostenible y el combate al cambio climático se han vuelto un aspecto integral de la planeación y del análisis energético en varios países (SENER, 2010). Existe una relación directa entre las emisiones de gases de efecto invernadero y el cambio climático. En particular, la quema de combustibles de origen fósil derivado de las actividades antropogénicas es responsable de la mayor proporción de las emisiones globales de gases de efecto invernadero. De acuerdo al Panel Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático (IPCC), las emisiones anuales de CO₂ se han incrementado en un 80 %, entre 1970 y 2004 (Allali et al., 2007). Este aumento en las emisiones proviene principalmente de la generación de energía y el transporte, sectores que juntos contribuyen con las dos terceras partes del total (IEA, 2014). Las emisiones de estos sectores resultan de la producción, transformación, manejo y consumo de todo tipo de recurso energético (SENER, 2010).

1.1 Descripción del problema

La disponibilidad de los recursos fósiles es cada día más limitada. Sumado a ello, la problemática ambiental derivada de la actividad antropogénica se vuelve más crítica. Consciente de ello, el sector de la aviación ha sido el único en establecer metas claras y acciones precisas para mitigar el impacto de sus emisiones de CO₂, con el objetivo de garantizar su sostenibilidad y crecimiento. Entre las estrategias que ha planteado este sector se encuentra el desarrollo de un combustible renovable para aviación que paulatinamente puede sustituir a la turbosina. Los esfuerzos de investigación y desarrollo del combustible renovable de aviación están todavía en curso, y existen algunos procesos que han sido certificados; sin embargo, el de mayor potencial y más utilizado ha sido el proceso *Ecofining* desarrollado por UOP Honeywell. Este proceso es prometedor, ya que es compatible con la tecnología de refinerías de petróleo existentes, es posible utilizar una amplia variedad de aceites vegetales y grasas animales como materia prima, y, sobretodo, la bioturbosina obtenida cumple con las propiedades especificadas en los estándares. No obstante, el proceso presenta interesantes áreas de mejora, siendo necesario desarrollar estrategias de intensificación con el objetivo de reducir sus requerimientos energéticos. En el proceso de hidrotreatmento ya ha sido investigado el uso de alternativas como las secuencias de destilación térmicamente acopladas o la integración energética de la sección reactiva. Sin embargo, hasta el momento no se ha explorado el uso de columnas de destilación reactiva como una alternativa para reducir el consumo energético del proceso de hidrotreatmento.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo general

Diseñar esquemas de destilación reactiva que permitan intensificar el proceso de producción de combustible renovable de aviación, con la finalidad de disminuir el consumo energético del proceso.

1.2.2 Objetivos particulares

1. Modelar el proceso convencional de hidrotreatmento para producción de bioturbosina considerando como materia prima *Jatropha curcas*.

2. Realizar un análisis de factibilidad entre las etapas de reacción y la separación del proceso de hidrotratamiento.
3. Diseñar mediante métodos cortos las configuraciones de las secuencias de destilación reactiva.
4. Simular los diseños de las secuencias de destilación reactiva con el uso de modelos rigurosos mediante el simulador Aspen Plus V8.7[®].
5. Realizar un análisis comparativo entre el proceso convencional de hidrotratamiento y las secuencias de destilación reactiva en términos de consumo energético, las emisiones de CO₂ generadas, costo total anual (TAC), el porcentaje de conversión y los rendimientos hacia bioturbosina.

1.3 Justificación

La bioturbosina como combustible renovable tiene el potencial de contribuir en el cumplimiento de los objetivos del sector de la aviación, reduciendo el impacto ambiental derivado de esta industria. De los procesos disponibles y aprobados para la producción de bioturbosina, el proceso de hidrotratamiento, desarrollado por UOP Honeywell, es el más prometedor; tanto por su versatilidad con el tipo de las materias primas que pueden emplearse como por su compatibilidad con las instalaciones de las refinerías existentes. Sin embargo, el proceso de hidrotratamiento presenta interesantes áreas de oportunidad. Una de ellas es la posibilidad de llevar a cabo las reacciones de forma simultánea con las separaciones, lo cual podría disminuir tanto los costos de operación como los de inversión.

Una vez expuesto el panorama general y objetivos del presente trabajo, a continuación se muestra la organización del documento de tesis. En el capítulo 2 se introducen las generalidades respecto al combustible renovable de aviación, procesos de producción, la revisión del estado del arte así como los conceptos básicos de destilación reactiva. Por otro lado, la metodología a seguir para el logro de dichos objetivos es presentada en el capítulo 3. En el capítulo 4 se presentan y discuten los resultados obtenidos, mientras que las conclusiones y trabajo futuro se exponen en el capítulo 5.

CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES

En este capítulo se presentan los antecedentes de la investigación. Se comienza exponiendo las generalidades del sector aviación; posteriormente se introduce al tema de los biocombustibles haciendo énfasis en la bioturbosina y sus procesos de producción. Específicamente se describe el proceso de hidrotratamiento donde se mencionan sus principales áreas de oportunidad, así como los trabajos previos que se han realizado en torno a este proceso. Asimismo, se introduce el concepto de destilación reactiva, fundamentos, aplicaciones y algunas estrategias para su diseño.

2.1 El sector transporte y la aviación

Según la Agencia Internacional de Energía (IEA), el sistema de transporte contribuye con alrededor del 23 % de las emisiones de dióxido de carbono (CO₂) en todo el mundo, y esta proporción probablemente aumentará en el futuro (Chávez-Rodríguez y Nebra, 2010). El sector de transporte global se enfrentará a varios retos sin precedentes durante las próximas cuatro décadas. Para el año 2030, la población mundial alcanzará los 8 mil millones, mientras que para el año 2050 el número de habitantes estará cercano a 9.2 mil millones (World Energy Council, 2011; BP, 2015). Durante este período, los viajes y el transporte de mercancías por carretera serán al menos el doble, debido al aumento de la demanda de transporte. Entre 2010 y 2050, la demanda total de combustible del sector transporte se incrementará en un 30 % - 82 % sobre los niveles de 2010, principalmente por los camiones, trenes, barcos y aviones que estarán en circulación (World Energy Council, 2011). En términos de impacto ambiental, en 2012 el transporte aéreo produjo 689 millones de toneladas de CO₂, alrededor del 2 % de las emisiones globales de CO₂ (34 mil millones de toneladas) (REN21, 2016). También se pronostica una tasa de crecimiento anual del 4.8 % para el tráfico aéreo hasta 2036 (IATA, 2009; OACI, 2011; IATA y OACI, 2013).

En la actualidad, el único sector industrial en establecer metas globales y una estrategia clara para mitigar sus emisiones de CO₂ es la aviación. Las metas establecidas incluyen mejorar el rendimiento de los motores en un promedio del 1.5 % anual hasta 2020, y a partir de este año limitar sus emisiones netas a través del crecimiento neutro en carbono;

consecuentemente para el año 2050 se espera reducir las emisiones en un 50 %, en comparación con 2005 (World Energy Council, 2011).

Con la finalidad de alcanzar las metas establecidas, las industrias de la aviación y la Asociación Internacional de Transporte Aéreo (IATA) en trabajo conjunto con la Organización de Aviación Civil Internacional (OACI) han trazado una estrategia de acción para hacer frente al cambio climático, estableciendo cuatro pilares fundamentales, de los cuales uno de ellos es el desarrollo de combustibles alternativos.

El combustible de aviación por excelencia ha sido la turbosina de origen fósil. La turbosina es un líquido inflamable constituido por hidrocarburos, que se obtienen como destilado intermedio del petróleo. Existen otras fuentes de combustibles fósiles que podrían ser utilizados para fabricar turbosina, como el gas natural, el gas de esquisto y el carbón.

El tamaño de las moléculas de hidrocarburos presentes en la turbosina es restringido principalmente por la especificación de destilación y el punto de congelación; siendo comunes las familias de parafinas, naftenos y aromáticos de entre 8 y 16 átomos de carbono (PEMEX, 2014). La turbosina de origen fósil consiste aproximadamente en un 20 % de parafinas, 40 % de isoparafinas, 20 % de naftenos y 20 % de aromáticos (Bernabei et al., 2002). La turbosina se comercializa en dos variantes: Jet-A y Jet-A1 (ultra bajo en azufre); sus principales propiedades fisicoquímicas se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas de la turbosina (PEMEX, 2014)

Propiedad (unidades)	Jet-A1	Jet-A
Compuestos aromáticos (% volumen máximo)	25	25
Temperatura máxima para el 10% de destilación (°C)	205	205
Temperatura máxima de congelación (°C)	-47	-40
Temperatura de flash (mínimo, °C)	38	38
Gravedad específica 20/4 °C	0.772-0.837	0.772-0.837
Densidad a 15 °C (kg/m ³)	775-840	775-840
Límite de explosividad	1.3 inferior- 8	1.3 inferior- 8
Solubilidad en agua (g/100 ml a 20 °C)	Insoluble	Insoluble
Contenido energético (MJ/kg)	43.28	43.28

En la actualidad existen dos principales especificaciones para la turbosina comercial. La primera es la Norma DEF STAN 91-91, que integra los requisitos del

combustible para aviones en el Reino Unido; más tarde se convirtió en la especificación para el combustible de uso comercial. La segunda especificación es la norma D1655 desarrollada por la ASTM. Muchos países mantienen sus propias especificaciones, pero apegadas a las antes mencionadas (Chevron, 2006; Liu et al., 2013a). Entre las propiedades que son evaluadas en las especificaciones están: punto de congelación, calor de combustión, punto flash, contenido de azufre, gravedad específica, densidad cinemática y dinámica, estabilidad del combustible ante la oxidación térmica, entre otros.

Los derivados del petróleo han sido los combustibles de transporte preferidos, ya que ofrecen la mejor combinación de contenido de energía, rendimiento, disponibilidad, facilidad de manejo y precio (Chevron, 2006). Por consecuencia, los biocombustibles enfrentan el reto de mantener estas características para ser considerados sustitutos viables de los hidrocarburos fósiles. Cualquier nuevo candidato a combustible para aviones tendrá que ser compatible con todos los materiales que se encuentran en los sistemas de combustible de los aviones, incluyendo diversos metales, revestimientos de tipo epoxi y sellos elastoméricos (Chevron Product Company U.S.A. Inc., 2000; Mendes et al., 2015).

El desarrollo de biocombustibles con propiedades fisicoquímicas idénticas o muy cercanas a las de los combustibles fósiles se proyecta como la mejor solución, en el corto y mediano plazo para todo el sector transporte. En el corto plazo los biocombustibles han sido utilizados en mezclas como un primer avance en la transición energética; sin embargo, lo deseable es el desarrollo de combustibles renovables con propiedades idénticas que puedan reemplazar en su totalidad a los combustibles fósiles.

2.2 Biocombustibles

De acuerdo con la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO) los biocombustibles son aquellos producidos directa o indirectamente a partir de la biomasa. Existen biocombustibles sólidos (leña, carbón vegetal, residuos agrícolas y forestales, pellets, briquetas), líquidos (bioetanol, biodiésel, bioturbosina, biobutanol) y gaseosos (biogás, gas de síntesis, biohidrógeno). Para el sector transporte, los biocombustibles líquidos son los que más se utilizan. Con base en la fuente o materia de la que provienen, los biocombustibles se pueden clasificar en biocombustibles de primera,

segunda o tercera generación tal como se muestra en la Figura 2 (FAO y RLC-Caribe, 2013).



Figura 1. Clasificación de los biocombustibles de acuerdo a su fuente de obtención

En la Figura 3 se puede observar que los combustibles fósiles siguen siendo el principal recurso energético a nivel mundial, con un porcentaje del 78.3 % en el año 2014; sin embargo, las energías renovables comienzan a ganar terreno. Se estima que los biocombustibles para el sector transporte jugarán un papel más importante en el suministro mundial, pasando de poco menos de 2 % de petróleo equivalente a cerca del 30 % para mediados de siglo (World Energy Council, 2011; Mendes et al., 2015).

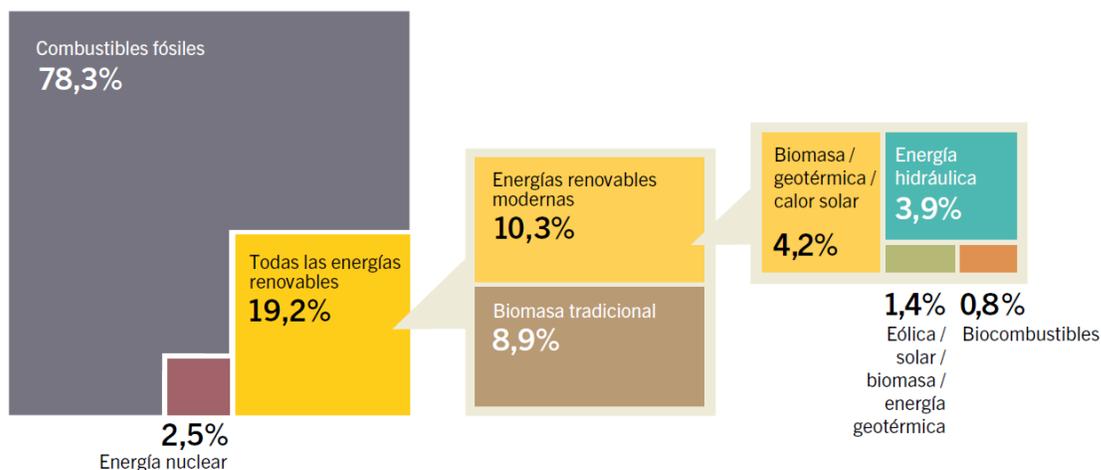


Figura 2. Cuota estimada de energía renovable en el contexto del consumo mundial final de energía en 2014 (Mendes et al., 2015)

Por otra parte, en la Figura 4 se muestra la producción mundial de biocombustibles en el año 2015; ésta fue encabezada por Estados Unidos seguido de Brasil y la Unión Europea, que juntos producen el 85 % del total. El bioetanol ha sido el principal combustible producido en el mundo, seguido por el biodiésel. También se observaron avances en nuevos mercados y aplicaciones, tales como en los biocombustibles para la aviación, que representan el 4 % del total de biocombustibles producidos (REN21, 2016).

El gran interés respecto a los biocombustibles radica en que podrían convertirse en una pieza fundamental de un sistema energético sostenible (Demirbas, 2009), pues los biocombustibles no sólo contribuyen a la estrategia de diversificación energética de un país, sino también a la apropiación de nuevas tecnologías energéticas.

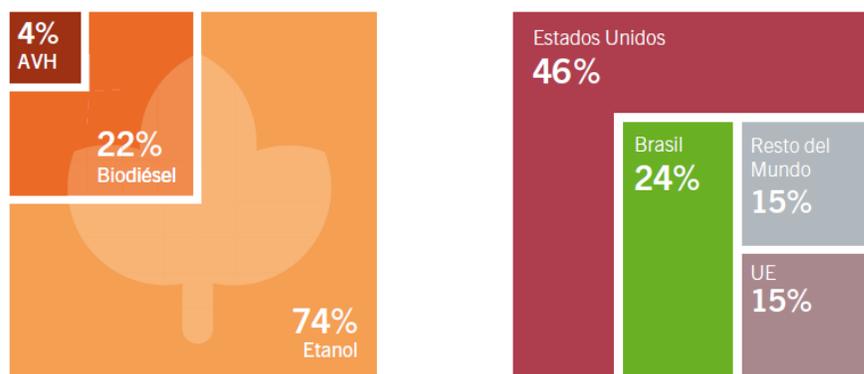


Figura 3. Producción mundial de biocombustibles, participación por tipo y por país/región, 2015 (Mendes et al., 2015)

De igual manera los biocombustibles contribuyen a lograr cierto grado de independencia energética e impulso de las regiones agrícolas de los países, la generación de empleos y mitigación del impacto ambiental; sin embargo, existen aún incertidumbres y retos a superar a lo largo de la cadena de suministro para su producción.

Las preocupaciones respecto a los biocombustibles giran en torno a la disponibilidad global de la tierra para cultivo, la necesidad de evaluar el potencial de las materias primas, evaluar y reducir el impacto en el cambio de uso de suelo, biodiversidad y el uso de recursos. Respecto a los procesos de producción los intereses apuntan a su evaluación tecno-económica, a disminuir el consumo de agua, la huella de carbono, la contaminación ambiental y el desperdicio; así como considerar la integración de procesos, la generación de co-productos y la maximización de eficiencias. En el uso final de los biocombustibles también se debe considerar la importancia de evitar impactos negativos a la salud humana y a la calidad del aire (Mendes et al., 2015). En un esfuerzo por brindar un marco normativo para atender estas necesidades, a partir del 2010, se implementó la norma de la Mesa Redonda sobre Biomateriales Sustentables (RSB) para la certificación de la producción sostenible de biocombustibles a lo largo de toda la cadena de valor. Esta norma

versa sobre las mejores prácticas para el procesamiento de la materia prima de los biocombustibles, así como para su producción, uso y manejo (RSB, 2009).

2.3 Bioturbosina

De manera particular, la bioturbosina se considera el combustible renovable más promisorio para el sector aéreo. También conocido como biocombustible de turbina (biojet fuel), turbosina renovable, o biokerosenos parafínicos sintéticos (BKP's). La bioturbosina es similar en composición a la turbosina de origen fósil, y puede o no contener compuestos aromáticos, dependiendo del procesamiento para su obtención (Liu et al., 2013). Los compuestos aromáticos tienen la función de expandir los componentes elastoméricos, presentes en el circuito de distribución del combustible; su ausencia podría provocar derrames. Sin embargo, los compuestos aromáticos pueden ser añadidos a la bioturbosina, y en este caso se tendría a un combustible renovable idéntico a su contraparte fósil (Gutiérrez-Antonio y Gómez-Castro, 2010). Hasta el momento, por normatividad la bioturbosina solamente puede ser utilizada en mezclas con turbosina a una concentración máxima del 50 % en volumen. Cabe añadir que las especificaciones que establecen las normas para la turbosina deben cumplirse también por la bioturbosina. Así, se ha buscado ampliar los criterios de estas normas e inclusive desarrollar otras; esto posibilitará la aprobación de nuevos biocomponentes conciliando los requerimientos de la industria de la aviación. Es por ello, que en un esfuerzo conjunto la ASTM creó las normas:

1) ASTM D7566, para las mezclas que contienen combustible sintético. Dicho documento certifica mezclas de hasta el 50 % en volumen de kerosenos parafínicos sintéticos, producidos a partir de biomasa mediante un proceso alternativo.

2) ASTM D4054, es el estándar para la calificación y aprobación de nuevos combustibles y aditivos para aviación.

Estas proporcionan un marco para la certificación de nuevos combustibles alternativos a medida que se desarrollan (Liu et al., 2013b); ya que los biocombustibles líquidos para aviación pueden derivarse de diferentes materias primas y procesos de producción, los cuales se presentan en la siguiente sección.

2.3.1 Procesos de producción de bioturbosina

Existen tres procesos aprobados por la ASTM para la producción de combustible renovable de aviación y son resumidos en la Figura 5: el proceso Fischer-Tropsch (aprobado en 2009), el hidrot ratamiento de ácidos grasos que fue aprobado en 2011, y más recientemente la conversión directa de azúcares a hidrocarburos que fue aprobado en junio de 2014. Algunas otras vías están en proceso de certificación incluyendo el proceso de oligomerización de alcoholes para la obtención de combustible de avión (IATA y OACI, 2013; Lang y Farouk, 2014; Toop et al., 2014). Actualmente, el número de vuelos comerciales que utilizan biocombustible producido mediante hidrot ratamiento se multiplica (IATA y OACI, 2013; Toop et al., 2014). Desde 2011, las líneas aéreas realizan colectivamente más de 1,500 vuelos comerciales de pasajeros con mezclas de hasta un 50 % de biocombustible de aviación, que se produce a partir de aceite de cocina usado, *Jatropha*, camelina y algas (Mendes et al., 2015); sin embargo, los esfuerzos de investigación y desarrollo están todavía en curso. Por ejemplo, el proceso Fischer-Tropsch a partir biomasa que fue el primero en aprobarse, aún no cuenta con planta de producción en funcionamiento (Toop et al., 2014). La mayoría de los procesos se encuentran en etapas muy tempranas de desarrollo, a excepción del hidrot ratamiento que se describe a continuación.

2.3.1.1 El proceso de hidrot ratamiento

El proceso de hidrot ratamiento llamado *Ecofining* fue desarrollado y patentado por UOP Honeywell. Este proceso utiliza como materia prima una amplia variedad de aceites que pueden obtenerse a partir de plantas y semillas (incluido el de rehuso), algas y grasas animales (Choudhary y Phillips, 2011; Lang y Farouk, 2014); los cuales son convertidos en sustitutos de los combustibles diésel y turbosina, principalmente. Es importante mencionar que, por razones de confidencialidad, no hay información disponible para el modelo cinético o el tipo de catalizador que se utilizan en este proceso patentado.

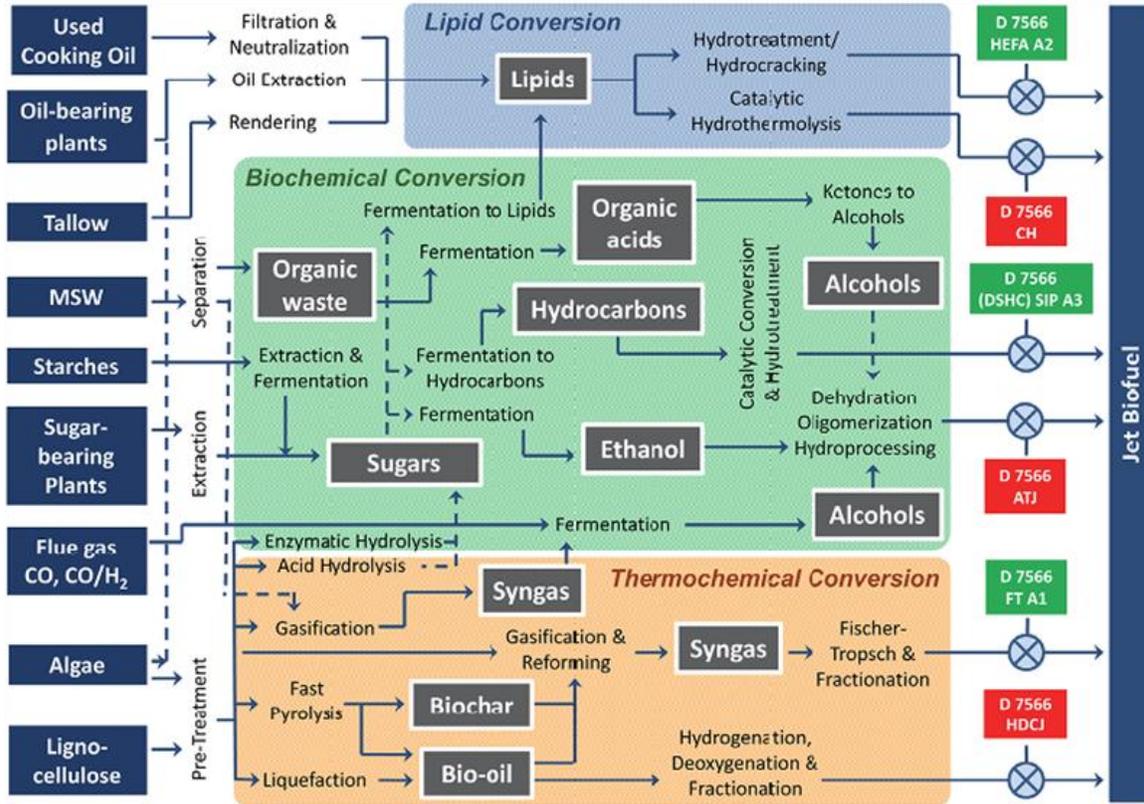


Figura 4. Vías identificadas de la producción de biocombustibles de aviación y el estado de la certificación ASTM (En color rojo los que se encuentran en desarrollo y verde significa aprobado). Proceso de hidrotatamiento (HEFA); Proceso Fischer-Tropsch (FT); Oligomerización de alcoholes a combustible de aviación (ATJ); Conversión de azúcares a hidrocarburos (DSHC) (aprobado en mezcla máx. 10 %); Hidrotatamiento de aceite de pirólisis (HDCJ); hidrotermólisis catalítica (CH) (Mendes et al., 2015).

El proceso de hidrotatamiento se lleva a cabo mediante tres etapas principales (Figura 6). La primera es la etapa de hidrotatamiento, donde ocurren las reacciones de hidrogenación, decarboxilación y desoxigenación de los triglicéridos y ácidos grasos que conforman a los aceites vegetales, obteniéndose hidrocarburos de cadena lineal (Liu et al., 2013a; Gutiérrez-Antonio et al., 2015). Las reacciones se llevan a cabo en presencia de un catalizador e hidrógeno, permitiendo eliminar el oxígeno y el carbono de las moléculas de triglicéridos y ácidos grasos para asegurar la estabilidad térmica del biocombustible. Como subproductos de la reacción se obtienen dióxido de carbono y agua. En esta reacción se generan hidrocarburos de cadena lineal con propiedades similares a las del diésel, pues las cadenas resultan muy largas para semejar las propiedades de la turbosina. Como consecuencia es necesario romper dichas cadenas, así como ramificar una porción de las moléculas resultantes (Furimsky, 2013; Gutiérrez-Antonio et al., 2013).

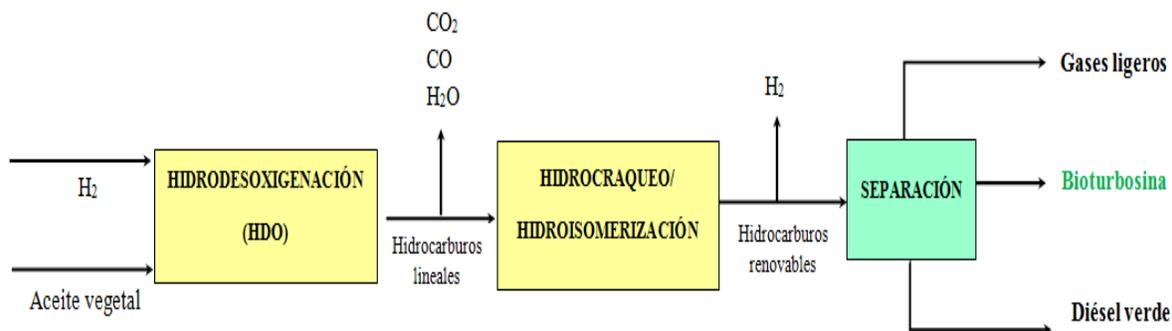


Figura 5. Proceso de hidrotreatmento para producción de bioturbosina. Modificado de (Gutiérrez-Antonio et al., 2015).

Por ello, los hidrocarburos obtenidos se someten a una etapa de craqueo catalítico e isomerización; las reacciones permiten cortar las cadenas de hidrocarburos en el rango requerido para la bioturbosina. Asimismo, la cadena es ramificada para mejorar el punto de congelación de los BKP's. El producto obtenido es un queroseno equivalente al combustible de avión, pero sin compuestos aromáticos. El sistema de reacción es un reactor de lecho fijo. En general, las condiciones de craqueo son inferiores a las de un proceso de craqueo tradicional. El proceso utiliza un catalizador multifuncional para transformar el aceite vegetal en biocombustibles (Gutiérrez-Antonio et al., 2013). Por último, para obtener el producto con las características deseadas es necesario refinarlo mediante destilación, por medio de la cual se aprovechan las diferencias en los puntos de ebullición de los distintos componentes de la mezcla que abandonan la etapa de craqueo/isomerización.

Cabe mencionar que las principales variables que afectan la calidad de la bioturbosina se encuentran en las etapas de reacción, y entre ellas se tienen la temperatura, la presión, la relación hidrógeno/materia prima, el tipo de catalizador y el tiempo espacial (Gutiérrez-Antonio, 2014). Además de la bioturbosina es posible obtener diésel, nafta y gas LPG, los cuales son productos comercializables. La bioturbosina obtenida por este proceso cumple con las propiedades clave necesarias para compararse con la turbosina convencional, como son punto de flash, temperatura de congelamiento, estabilidad y calor de combustión; sin embargo, la bioturbosina obtenida no contiene compuestos aromáticos. El rendimiento hacia hidrocarburos renovables es del 70 %; sin embargo, el rendimiento neto hacia turbosina es de alrededor del 36 % (McCall et al., 2007).

El proceso de hidrotratamiento ha demostrado su enorme potencial por varias razones: 1) este proceso fue uno de los primeros aprobados por la ASTM para la producción de bioturbosina, 2) la tecnología de producción es compatible con las refinerías de hidrocarburos fósiles y ello permite la reconversión de las instalaciones existentes, 3) es un proceso flexible para tratar diversos tipos de aceites vegetales y/o grasas animales como materias primas; sin embargo, la bioturbosina obtenida siempre cumple con los estándares de calidad requeridos independientemente de la materia prima seleccionada. Cabe añadir que actualmente es el proceso mediante el cual se produce el mayor volumen de bioturbosina; sin embargo, este presenta interesantes áreas de oportunidad entre las que se destacan:

1. La posibilidad de maximizar la producción de bioturbosina
2. Dado que la reacción de hidrogenación es exotérmica la energía producida por esta reacción podría integrarse al proceso (Gutiérrez-Antonio et al., 2016).
3. Existe la posibilidad de llevar a cabo todas las reacciones en un solo equipo, que permitirá reducir el consumo energético global, así como el impacto ambiental y los costos de producción asociados.

Diversos trabajos de investigación se han desarrollado enfocados a atender las áreas de oportunidad del proceso de hidrotratamiento. En 2013, Gutiérrez-Antonio y col. propusieron un modelo para la producción de bioturbosina a partir de aceite de higuera. La reacción de hidrotratamiento fue estimada mediante un modelo cinético propuesto por Sebos y col. (2009), para el hidrotratamiento del aceite de semilla de algodón. Se consideraron temperaturas entre 305-345 °C a presiones de 30 bar, utilizando 18 kg de Al₂O₃ como catalizador; se obtiene prácticamente una conversión total (99.35 %) del aceite a hidrocarburos lineales. En la etapa de isomerización y craqueo se considera una temperatura de 240 °C y 60 bar. Para la etapa de refinación se propusieron dos alternativas: la secuencia convencional directa (DC) y la secuencia convencional indirecta (IC); ambas secuencias fueron optimizadas mediante un algoritmo genético multiobjetivo con restricciones, acoplado al simulador de procesos Aspen Plus. Los resultados muestran que el porcentaje de conversión a bioturbosina es del 22 %, y que la mejor secuencia para la purificación es la DC.

Posteriormente, Gutiérrez-Antonio y col. (2014) proponen la intensificación del proceso de hidrot ratamiento a través del uso de columnas de destilación térmicamente acopladas. Las estimaciones de conversión del aceite vegetal se obtuvieron del trabajo Gutiérrez-Antonio y col. (2013). Estas secuencias intensificadas fueron optimizadas por un algoritmo genético multiobjetivo con manejo de restricciones, acelerado con redes neuronales. Se encontró una reducción de 15 % en el consumo de energía, en comparación con el uso de secuencias convencionales.

En 2015 se propuso la intensificación de la zona de separación del proceso de hidrot ratamiento, analizando las secuencias térmicamente acopladas directa e indirecta, Columna Petlyuk y Columna de Pared Divisoria (DWC) (Gutiérrez-Antonio et al., 2015). Reportaron que para un mismo número de etapas totales, la implementación de secuencias de destilación térmicamente acopladas permite conseguir una reducción del 21 % en el consumo de energía, en comparación con el proceso original. El proceso intensificado que menor consumo de energía presentó fue la secuencia térmicamente acoplada directa.

Por otra parte, Romero-Izquierdo y col. (2015) reportaron el modelado, simulación y análisis de las zonas reactivas del proceso de hidrot ratamiento; para ello emplearon modelos cinéticos previamente reportados, considerando *Jatropha curcas* como materia prima de segunda generación. Se encontró que las reacciones ocurridas en el primer reactor liberan una gran cantidad de energía, debido a la naturaleza exotérmica de las reacciones. Se determinaron también los rendimientos hacia otros sub-productos del proceso, mientras que la conversión hacia bioturbosina fue del 18 %. Derivado del trabajo de Romero-Izquierdo y col. (2015) se propuso la integración energética del proceso, considerando dos esquemas de destilación convencionales en la zona de separación; manteniendo los mismos criterios para el modelado de la zona reactiva, y considerando la misma materia prima. De esta manera Gutiérrez-Antonio y col. (2016) reportaron que se obtiene una disminución en los servicios de calefacción-refrigeración, cuando la integración energética se realiza en el proceso. También reportan un análisis comparativo en términos de emisiones de CO₂ y costo total anual; se encontró que los costos de inversión se incrementan debido al equipo adicional requerido para llevar a cabo la integración. No obstante, los costos anuales totales de los procesos, con y sin la integración energética, son similares. El aspecto más destacado

es que la integración de la energía permite una reducción del 86 % en las emisiones totales de CO₂, lo que significa una disminución significativa en el impacto ambiental del proceso.

Con base en la revisión del estado del arte puede observarse que se han investigado alternativas para reducir el consumo de energía del proceso de hidrotratamiento, incluyendo el uso de secuencias de destilación térmicamente acoplada así como la integración energética de la sección reactiva del proceso. No obstante, las mejoras han estado enfocadas a la zona de separación del proceso, y hasta el momento el uso de secuencias de destilación reactiva no ha sido explorada para este proceso.

2.4 Intensificación de procesos: destilación reactiva

La intensificación de procesos (PI por sus siglas en inglés), en general, consiste en el desarrollo de tecnologías compactas, más eficientes con respecto a las actuales, de menor consumo energético, menores costos y ambientalmente más limpias (Stankiewicz y Moulin, 2000). Surge como respuesta a la necesidad de mejoras significativas en los procesos, dado el incremento de los precios de la energía.

De manera particular, la destilación reactiva (DR) o destilación catalítica es la operación más representativa de la intensificación de procesos; en ella se combinan la reacción y la separación de los productos de reacción en un solo equipo. Ello conlleva múltiples ventajas, siendo la reducción en el número de equipos necesarios una de las más evidentes. Asimismo se espera también una reducción significativa en el consumo de energía global del proceso, la disminución en costos de inversión y operación, así como menor impacto ambiental, comparado con el proceso convencional.

En sistemas reactivos limitados por el equilibrio químico, la destilación reactiva ha demostrado una mejora significativa en el grado de conversión; pues la remoción continua de los productos genera un desplazamiento del equilibrio químico favoreciendo la formación de productos. Otra interesante ventaja de la DR con reacciones de equilibrio es la posibilidad de reducir el exceso de reactantes; en comparación con los procesos tradicionales donde las reacciones ocurren generalmente en exceso de uno de los reactivos. Como consecuencia, la carga de catalizador requerida es también reducida para el mismo

grado de conversión. Mediante el uso de columnas de DR también se pueden alcanzar conversiones prácticamente del 100 %, como ha sido reportado para la producción de acetato de metilo (Stankiewicz y Moulin, 2000). También se puede mejorar la selectividad hacia productos de interés, evitando que ocurran reacciones consecutivas que generen productos indeseables (Segovia-Hernández y Bonilla-Petriciolet, 2016). De la misma manera, mediante una ubicación estratégica de los platos de alimentación se podría evitar la desactivación del catalizador (que podría ocurrir en un reactor empacado tradicional) provocada por impurezas de compuestos no volátiles (Stankiewicz, 2001; Segovia-Hernández y Bonilla-Petriciolet, 2016). No obstante, el diseño de una columna de destilación reactiva no es una tarea sencilla, y no es posible en todos los casos. Existen algunas limitaciones en la aplicación de destilación reactiva (Luyben y Cheng-Ching, 2008):

1. No debe existir un desajuste o desempalme en las temperaturas favorables para la reacción y para la separación. La destilación reactiva no resulta atractiva económicamente en aquellos sistemas en los que la temperatura de reacción y separación no son similares.

2. Las volatilidades relativas deben ser tales que los reactivos puedan ser contenidos en la columna y los productos se puedan remover fácilmente por destilado o fondos. Típicamente un incremento de la temperatura en la columna resulta en un decremento de las volatilidades relativas; por lo que, si altas temperaturas favorecen las velocidades de reacción y menores temperaturas favorecen altas volatilidades relativas, el desempalme en estas temperaturas provocarían que la DR no sea atractiva para estos casos.

3. La necesidad de una velocidad de reacción razonablemente alta. Si las reacciones son muy lentas, el tiempo de retención y el número de platos reactivos serían muy grandes para considerarse económicamente viable.

4. Limitada a reacciones en fase líquida, puesto que la retención en la fase vapor es muy pequeña; por lo tanto, el calor de la reacción debe ser moderado para prevenir grandes cambios en las velocidades de transferencia de masa entre las fases líquido-vapor en la zona reactiva. Una reacción altamente exotérmica podría secar por completo los platos. En las columnas de DR el calor de la reacción no modifica la temperatura, y por tanto no afecta el

equilibrio de la reacción. Ello se debe a que el calor de reacción promoverá un cambio de fase de la mezcla reactiva (vaporización en el caso de reacciones exotérmicas o condensación en presencia de reacciones endotérmicas). La temperatura de la fase donde la reacción se lleva a cabo siempre es el punto de burbuja (o punto de rocío) correspondiente a la composición de la mezcla y a la presión de operación dada (Negrellos, 2011).

La primera patente de destilación reactiva versa sobre la esterificación catalizada homogéneamente, y data de la década 1920. Hasta la década de 1990, habían sido pocas las aplicaciones de la destilación reactiva en la industria; sin embargo, la implementación de una columna de destilación reactiva para la producción de acetato de metilo diseñada por Eastman Chemical[®] produjo un enorme interés tanto en la industria como en el mundo académico. El proceso convencional con múltiples equipos consume cinco veces más energía, y la inversión de capital es cinco veces mayor en comparación con la columna de destilación reactiva (Stankiewicz y Moulin, 2000; Luyben y Cheng-Ching, 2008). En general, la DR ha sido aplicada a 1) sistemas que se ven limitados por el equilibrio químico, tales como esterificación, alquilación, reacciones de hidrólisis de ésteres, etc.; 2) sistemas reactivos cuyas velocidades de reacción son razonablemente altas, bajo condiciones de presión y temperatura en las que la destilación también es posible (Posada, 2008; Aca, 2012). Actualmente más de 150 plantas que utilizan la tecnología de destilación reactiva están en operación, en donde CDTech[©] es el principal proveedor del proceso comercial (Rosales-Quintero et al., 2008).

2.4.1 Fundamentos de la destilación reactiva

Considere un sistema en el cual la reacción química implica dos reactivos (A y B) que generan dos productos (C y D). La reacción ocurre en la fase líquida y es reversible, de acuerdo con la ecuación 1:



Para que la destilación reactiva pudiera ser factible los productos deben poder removerse mediante destilación. Esto implica que los productos deben ser más ligeros o más pesados que los reactivos. En términos de la volatilidad relativa (α) de los cuatro componentes, el caso ideal implica que uno de los productos sea el más volátil y el otro el

de menor volatilidad relativa; mientras que los reactivos posean volatilidades relativas intermedias como es mostrado en la ecuación 2. En la Figura 9 se esquematiza una columna reactiva ideal, donde la parte media de la columna corresponde a la zona reactiva y contiene N_{RX} platos.

$$\alpha_C > \alpha_A > \alpha_B > \alpha_D \quad (\text{Ec. 2})$$

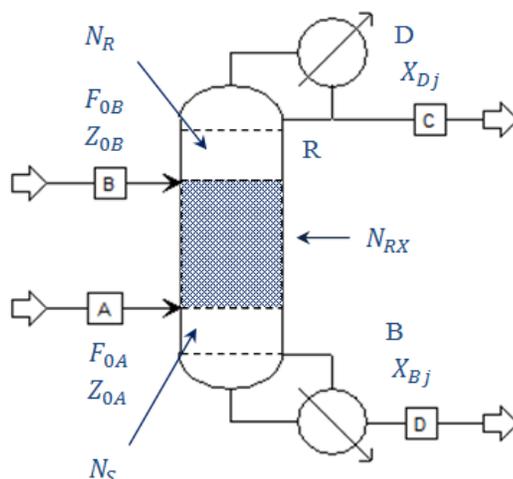


Figura 6. Esquema de una columna de destilación reactiva ideal. Modificado de (Luyben y Cheng-Ching, 2008)

La zona superior de la columna donde se introduce la corriente de alimentación de reactivo B (la sección de rectificación con N_R platos) separa al producto más ligero C del resto de los componentes, para obtener un producto puro en la corriente de destilado. La sección inferior de la columna donde la corriente de alimentación de reactivo A se introduce (la sección de agotamiento con N_S platos) separa el producto más pesado D de los componentes ligeros, con lo que se obtiene un producto D puro en la corriente de fondos. El reflujo y la carga térmica del rehervidor pueden ser manipulados para mantener las purzas de los productos.

Los grados de libertad en una columna de destilación reactiva deben ser ajustados para alcanzar las especificaciones deseadas. Estos grados de libertad incluyen: presión, tiempo de retención en los platos reactivos, localización de los platos de alimentación, número y localización de platos reactivos, número de platos en las secciones de

rectificación y agotamiento, relación de reflujo, demanda energética del rehervidor, tipo de condensador, temperatura de flujos de alimentación, tiempo de residencia (fase líquida), corrientes laterales (materia y/o energía), etc.

2.4.2 Diseño de procesos de destilación reactiva

A pesar del gran potencial de la DR su uso industrial no se ha generalizado. Una de las razones es que no existe una metodología para el diseño de columnas de destilación reactiva que considere múltiples reacciones y múltiples componentes. La mayoría de los sistemas DR que actualmente se encuentran operando fueron implementados con base en la experiencia (Gómez Castro, 2010; Carrera-Rodríguez et al., 2011; Segovia-Hernández y Bonilla-Petriciolet, 2016). Esto es comprensible por la complejidad del fenómeno de combinar reacción y separación. Algunos enfoques más tradicionales para el diseño de columnas de DR incluyen el uso de un análisis de factibilidad preliminar, seguido de la síntesis del proceso; finalmente el diseño se logra mediante simulación auxiliada por un software. Debido a que las metodologías de diseño de columnas de destilación convencional han sido ampliamente estudiadas, un primer enfoque fue considerar la adaptación de estas metodologías para el diseño de DR. Existen algunas metodologías de diseño conceptual para columnas de destilación reactiva que permiten establecer la factibilidad del proceso, así como la selección entre diversas alternativas posibles. Un resumen general de estas metodologías se muestra a continuación.

Métodos gráficos Ponchon-Savarit y McCabe-Thiele. Aplican para sistemas de 2 componentes con una sola reacción química. Se pueden adaptar tanto a sistemas con equilibrio químico como a sistemas cinéticamente controlados. Mediante la aplicación de estas técnicas se construye un diseño fundamental (todas las etapas son reactivas y de equilibrio), que permite determinar el tamaño del equipo y la localización de las zonas reactivas y no reactivas (Sánchez-Daza et al., 2006). En términos generales se sugiere que si la reacción tiene un reactivo pesado y un producto ligero, la zona de reacción debe ser colocada en la sección de rectificación; mientras que si la reacción tiene un reactivo ligero y un producto pesado, la zona de reacción debe colocarse en la sección de agotamiento. Sin

embargo, estos métodos se aplican exclusivamente a reacciones de isomerización, y están limitados por su naturaleza inherentemente gráfica (Almeida-Rivera, 2005).

Mapas de curvas residuales reactivos (RRCM). Estas representaciones gráficas pueden ser construidas asumiendo condiciones de equilibrio químico en cada etapa reactiva, o bien tomando en cuenta las cinéticas de la reacción. La interpretación de estos mapas puede ser difícil, principalmente cuando el número de componentes en el sistema reactivo es mayor a 3 (incluyendo inertes). En consecuencia, esta metodología solamente es viable para sistemas reactivos simples (hasta 4 componentes). No aplica para columnas híbridas (aquellas que incluyen zonas no reactivas) (Thery et al., 2005). Solamente proporciona información respecto a la factibilidad del proceso, pero aún es necesario el diseño de la operación (Aca, 2012)(Segovia-Hernández y Bonilla-Petriciolet, 2016).

Líneas de destilación. Una de las principales ventajas del método radica en la naturaleza continua de las líneas de composición, contrario a lo ocurrido con los mapas de curvas residuales. Entre sus principales limitaciones se encuentra que es sólo aplicable a sistemas con una alimentación y dos productos (Gómez Castro, 2010). Se han desarrollado algunos métodos cortos basados en líneas de destilación (Carrera-Rodríguez et al., 2011) para el modelado de las etapas de la columna, usando variables de composición transformada. Este método arroja como resultados el número de etapas teóricas, la relación de operación de reflujo y la localización del plato de alimentación, así como los flujos superior e inferior de la columna; por lo que provee de un diseño previo a la simulación mediante métodos rigurosos. En este método se asume que el sistema alcanza el equilibrio químico.

Análisis de la estática y análisis de la estática modificado. Este enfoque requiere el modelo termodinámico que representa el sistema, el modelo de equilibrio químico, la estequiometría de la reacción y la presión de operación. Se supone:

1. La ocurrencia de sólo una reacción de equilibrio reversible.
2. La columna opera bajo eficiencia de separación infinita (número infinito de etapas y caudales de vapor y líquido infinitos).

3. La columna funciona en estado estacionario, y el almacenamiento del líquido o de la cantidad de catalizador es suficientemente grande para alcanzar el equilibrio en cada etapa. El análisis de la estática es particularmente interesante para estudiar la viabilidad del proceso híbrido. Si no se necesitan las secciones de separación no reactivas (zonas de rectificación y/o agotamiento) se ha desarrollado un análisis estático modificado (MSA), que tiene por objeto determinar las composiciones de productos que cumplan con las especificaciones de pureza y recuperación. Se supone que el proceso de RD se puede descomponer en dos etapas sucesivas: una etapa de reacción y una etapa de separación; sin embargo, el método sólo aplica a sistemas convencionales con una alimentación y supone eficiencia de separación infinita.

Diseño mediante técnicas de optimización. Métodos que utilizan algoritmos determinísticos y estocásticos han sido utilizados para el diseño de sistemas DR. El análisis de los problemas de diseño multiobjetivo se lleva a cabo a través de frentes de Pareto. Estas metodologías permitirían incorporar el análisis simultáneo tanto del diseño del proceso como aspectos del control y operatividad, en aras de buscar mejorar el comportamiento dinámico de los procesos desde la fase inicial de diseño; sin embargo, las funciones objetivo implicadas en el diseño de DR son no-lineales, multivariable y potencialmente no convexas, aunado a incluir variables enteras continuas y disyuntivas.

Análisis paramétrico. Las metodologías de diseño descritas hasta este punto aún se encuentran en desarrollo. De hecho, ninguna metodología permite abordar el diseño de un sistema multireactivo y multicomponente. Por otra parte, se tienen metodologías de análisis paramétrico, recomendadas cuando el sistema multicomponente rebasa los cinco componentes (Segovia-Hernández y Bonilla-Petriciolet, 2016). Mediante el análisis paramétrico se obtienen diseños por medio de la simulación recursiva del proceso, donde se modifican las variables de diseño hasta alcanzar las características deseadas para la función objetivo (Gómez Castro, 2010). El impacto de algunos parámetros es similar a la experiencia con destilación convencional; sin embargo, en algunos casos el efecto es contradictorio y único en destilación reactiva. Por lo tanto, el enfoque es analizar el efecto

del cambio de un parámetro a la vez, mientras se mantienen los demás parámetros en sus valores de caso base (Luyben y Cheng-Ching, 2008).

CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA

En este capítulo se expone la metodología del proyecto de investigación desarrollado. Se comienza presentando la materia prima seleccionada, así como el modelado del proceso convencional de hidrotratamiento. Posteriormente, se presentan los elementos del análisis paramétrico para evaluar la factibilidad de llevar a cabo una o las dos reacciones de manera simultánea con la separación. Con base en estos resultados se realizan los diseños de las columnas de destilación reactiva, las cuales son integradas al proceso completo de hidrotratamiento. Los esquemas de destilación reactiva permiten la definición de cuatro escenarios intensificados del proceso de hidrotratamiento. Dichos escenarios son comparados en términos de emisiones de CO₂, cálculo del costo total anual, porcentajes de conversión y rendimientos.

3.1 Selección de la materia prima

La selección de la materia prima para la producción de biocombustibles es una decisión relevante, dado que su costo impacta directamente en la economía del proceso. Los requisitos incluyen aspectos relacionados con la seguridad alimentaria, costos asociados a su producción, rendimiento, y sobre todo disponibilidad.

En el presente trabajo, la materia prima considerada es el aceite de la oleaginosa *Jatropha curcas*; catalogada como una materia prima de segunda generación, con gran potencial para su utilización en la producción de combustible renovable de aviación (Lang y Farouk, 2014). Asimismo, se han buscado estrategias para el aprovechamiento integral de este cultivo, por lo que la biomasa residual, derivada de la obtención del aceite, se podría integrar en una biorefinería. Varios estudios técnicos señalan que las semillas de *Jatropha* contienen de un 30-40 % en peso de aceite. No requiere un tipo de suelo especial, y se desarrolla bien en suelos áridos y semiáridos. *Jatropha curcas* es originaria de México y Centroamérica (SAGARPA, 2012; Mohammad et al., 2013). De acuerdo con INIFAP, los estados de la República Mexicana que registraron mayor superficie óptima para su cultivo fueron Sinaloa, con 557,641 hectáreas (ha); Tamaulipas, con 317,690 ha; Guerrero, con 282,158 ha; Chiapas, con 230,273 ha y Michoacán, con 197,288 ha (ProyectoFSE y

Brucialga, 2016). La composición del aceite vegetal que ha sido reportada para *Jatropha curcas* producida en México (Yautepec, Morelos) se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2. Perfil de composición de ácidos grasos del aceite de *Jatropha curcas* (Herrera-Martínez, 2007)

Ácido Grasos	Fórmula	Composición (% en peso)
Oléico	C18:1	41-42
Linoléico	C18:2	42-44
Palmítico	C16:0	9-11
Esteárico	C18:0	2-3
Mirístico	C14:0	0.3-0.4
Palmitoléico	C16:1	0.3-0.4
Ácidos grasos libres	FFA	-

Con base en lo anterior, para el modelado del proceso de hidrotreatmento en este trabajo se considera una corriente de alimentación de aceite vegetal de *Jatropha curcas* de 100 kg/h (0,1144578 kmol/h); en la cual se han despreciado los componentes minoritarios (Mirístico, Palmitoléico y ácidos grasos libres) tal como se señala en la Tabla 3.

Ahora bien, es necesario constatar que la información de todos los componentes del aceite vegetal se encuentren en la base de datos del simulador de procesos Aspen Plus. De no ser así se debe incluir la estructura molecular y la información termodinámica de cada componente puro faltante; ello involucra incluir la temperatura de ebullición del componente (K), la energía libre del Gibbs de formación (kJ/mol), y la entalpía de formación (kJ/mol). En este caso, el simulador Aspen Plus no cuenta con la información respecto a los triglicéridos que componen el aceite de *Jatropha curcas* en su base de datos, por lo que es necesario añadirla.

Tabla 3. Composición del flujo de alimentación de aceite de *Jatropha*

TGA	Composición (%en peso)	Flujo másico (kg/h)	Flujo molar (kmol/h)
Trioleína	42	42	0.048
Trilinoleína	44	44	0.050
Tripalmitina	11	11	0.0034
Triestearina	3	3	0.014

La información termodinámica de los triglicéridos se obtuvo del trabajo de Aca-Aca y col. (2009). En este trabajo se determinó que el método predictivo basado en contribución de grupos Constantinou-Gani predecía las propiedades termodinámicas de interés con el menor porcentaje de error relativo, 9%. Para mayor detalle consultar (Aca-Aca et al., 2009). Mientras que para incluir la estructura molecular de los triglicéridos en el simulador se cargaron archivos de extensión “.mol”.

Asimismo se considera el acondicionamiento de la corriente de aceite vegetal, desde condiciones ambientales (25 °C y 1 atm) hasta las condiciones de operación del reactor de hidrodeshidrogenación (HDO), las cuales serán presentadas en la sección 3.2.1.1 de este capítulo.

La segunda materia prima del proceso de hidrotratamiento es hidrógeno, para el cual se toma un flujo de alimentación de 13.421 kg/h (6,657638 kmol/h) que corresponde a una relación de 1,500 ml hidrógeno/ ml de aceite vegetal en condiciones normales de presión y temperatura. También para el hidrógeno se considera el acondicionamiento desde las condiciones de venta (-234,58 °C y 10 atm) hasta las condiciones de operación del reactor de HDO.

Para el diseño de los escenarios completos se utilizarán distintos módulos del software de simulación Aspen Plus, en todos ellos se consideran los balances de energía y masa así como las relaciones de equilibrio de fases.

3.2 Proceso de hidrotratamiento convencional: escenario base

3.2.1 Modelado del sistema reactivo

Hoy en día, el hidropesamiento de lípidos se ha convertido en un vasto campo en desarrollo de tecnologías para la producción de biocombustibles. Los enfoques de estas investigaciones se han centrado en la optimización de las condiciones de proceso. Particularmente se vuelve un tema importante la diversificación de las materias primas utilizadas que sean consideradas sustentables, así como en el desarrollo de nuevos catalizadores (Choudhary y Phillips, 2011; Kubi y Tuka, 2013). En este apartado se describe brevemente las reacciones que se verifican en el proceso de hidrotratamiento de

los aceites vegetales para la producción de combustible renovable de aviación, y se presentan los modelos cinéticos que se utilizan.

3.2.1.1 Reacciones de hidrodesoxigenación (HDO)

El modelado de la reacciones de hidrodesoxigenación (HDO) del aceite vegetal de *Jatropha curcas* se realiza con base en el modelo cinético reportado por Sharma y col. (2012). Para ello propusieron un esquema cinético de pseudo primer orden, y realizaron la determinación experimental de las constantes de velocidad de reacción; se sintetizaron dos catalizadores: NiMo y CoMo sulfurados, ambos soportados sobre titanosilicatos mesoporosos.

El modelo cinético fue desarrollado a 320 °C y 80 bar, con una relación de 1500 ml NPT H₂/ml aceite. A estas condiciones el producto principal son las parafinas que pertenecen al grupo de los oligomerizados (>n-C₁₈). El modelo cinético considera la formación de cuatro productos principales (pseudocomponentes), el cual se muestra en la Figura 9. Estos pseudocomponentes incluyen: Ligeros (hidrocarburos lineales de cinco a ocho carbonos, n-C₅ a n-C₈), Intermedios (comprende los hidrocarburos del n-C₉ al n-C₁₄), Pesados (n-C₁₅ a n-C₁₈) y Oligomerizados (>n-C₁₈). Los datos cinéticos reportados pueden verse en la Tabla 5.

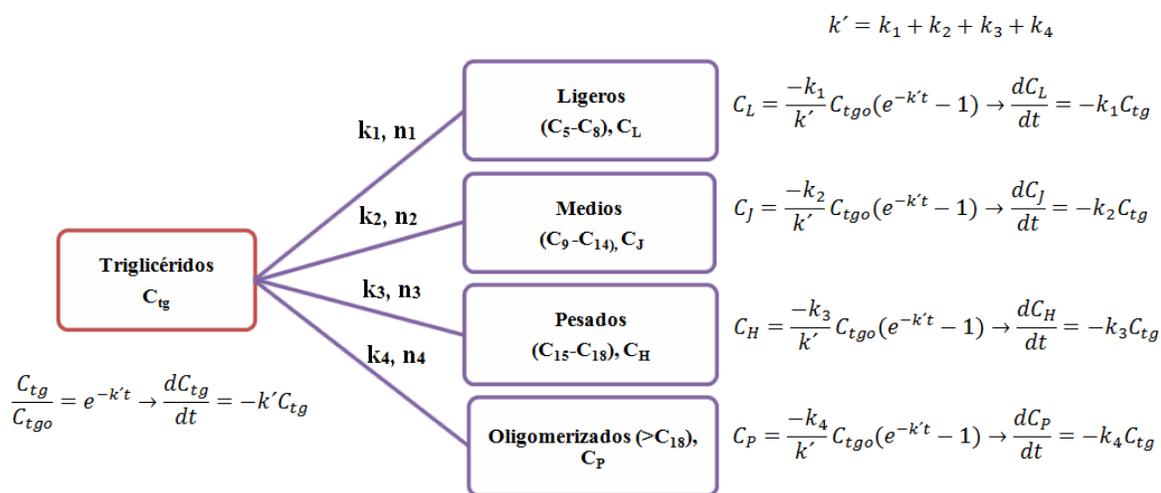


Figura 7. Modelo y ecuaciones cinéticas para el hidrotreamiento de aceite de *Jatropha curcas* (Sharma et al., 2012)

Tabla 4. Parámetros cinéticos para el hidrot ratamiento de aceite de *Jatropha curcas* (Sharma et al., 2012)

$E_a = 40.8 \text{ kJ/mol};$			
Parámetros	Valor	Error (%)	R^2
k'	14.35	1.63	0.99
k_1	0.04	0.47	
k_2	0.11	0.47	
k_3	1.24	0.48	
k_4	13.25	1.17	

Para modelar esta zona reactiva se utilizó el módulo RPlug de Aspen Plus, el cual representa un reactor de flujo pistón, a temperatura constante (320 °C); se elige la opción de ley de potencia como modelo cinético que describe la ocurrencia de las reacciones de hidrot ratamiento.

3.2.1.2 Reacciones de hidro craqueo/hidroisomerización

Para describir la etapa de hidro craqueo se toma como base el modelo cinético propuesto por Shayegh y col. (2012), cuyo trabajo fue desarrollado para el craqueo catalítico del gasóleos de vacío (VGO, por sus siglas en inglés). Este trabajo propone un modelo cinético de cuatro productos: VGO, gases ligeros, gasolina y coque; el modelo cinético es mostrado en la Figura 10.

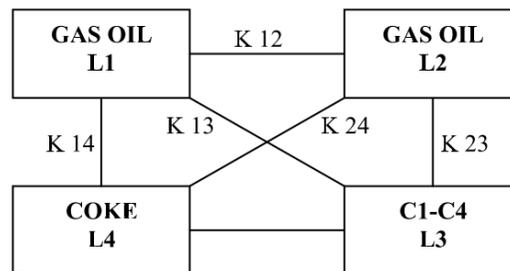
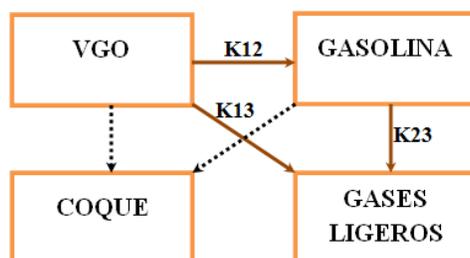


Figura 8. Modelo cinético propuesto para el hidro craqueo del VGO (Shayegh et al., 2012)

Dado que la corriente de alimentación a este reactor es el efluente de salida del reactor de HDO se considera que el hidrógeno es alimentado en exceso, por lo que se



pueden despreciar las rutas de producción de coque. Entonces para el desarrollo del modelado de esta zona reactiva se considera la ruta de reacción modificada, que es mostrada en la Figura 11.

Figura 9. Modelo cinético modificado para el sistema de estudio

La Figura 12 muestra las ecuaciones cinéticas consideradas para el sistema reactivo obtenidas a 480°C, mientras que los valores cinéticos reportados se muestran en la Tabla 5.

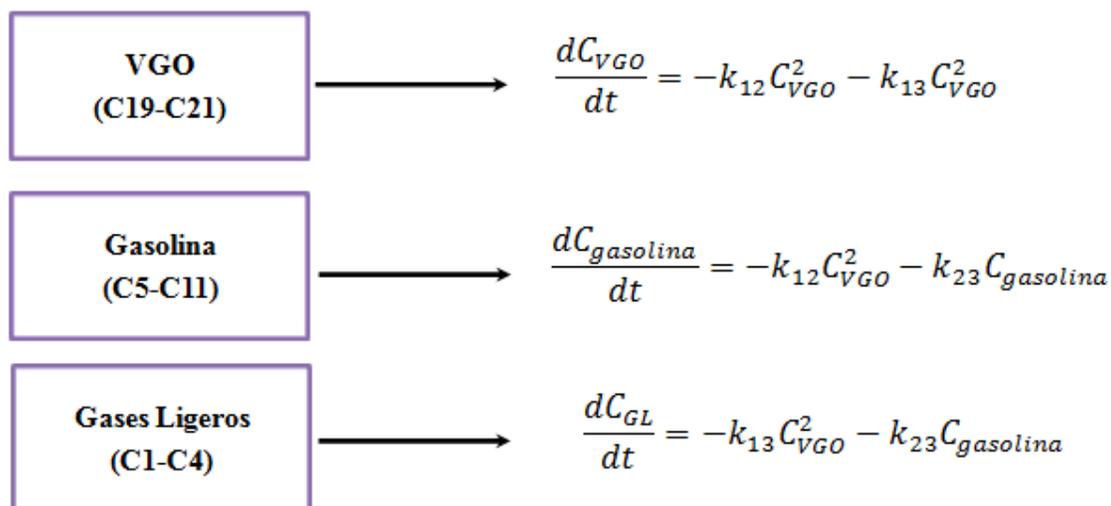


Figura 10. Ecuaciones cinéticas para el sistema de estudio

Tabla 5. Datos cinéticos para hidrocrqueo (Shayegh et al., 2012)

Ec. Arrhenius $k = k_0 e^{-E_a/(RT)}$		
Parámetro	$-E_a/R$	k_0

K12	-12,904	16,401,205,675
K13	-13,885	33,040,947,364
K23	-2,271	74.13

Para el modelado cinético de las reacciones de hidroisomerización se toma como referencia el trabajo experimental desarrollado por Calemma y col. (2000); en el cual se determinan los parámetros cinéticos de la hidroisomerización de parafinas de cadena larga, específicamente el n-C₁₆, n-C₂₈ y n-C₃₆. El modelo cinético que reportan para las reacciones de hidroisomerización es:

$$C_{isoparafinas} = C_{0\ isoparafinas} e^{-k_2 t}$$

$$\frac{dC_{isoparafinas}}{dt} = k_2 C_{parafinas}$$

También es importante señalar que para todas las reacciones de hidroisomerización se consideran los parámetros cinéticos reportados para el n-C₁₆ se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Parámetros cinéticos para la hidroisomerización del n-C₁₆ (Calemma et al., 2000)

n-parafina	k₂ (min⁻¹)	E_a (kcal/mol)
n-C₁₆	0.00239	34.5

Para el modelado de la segunda zona reactiva nuevamente se elige el módulo Rplug a temperatura constante de 480 °C, y se elige también ley de potencia para el modelado cinético de las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización.

3.2.2 Modelado de la zona de separación

Una vez obtenidos los hidrocarburos renovables en la zona de reacción la siguiente operación es la purificación de los productos. El efluente que sale de la zona de reacción se encuentra a condiciones elevadas de presión y temperatura, por lo que es necesario disminuir ambas variables con el objetivo de evitar condiciones peligrosas en el tren de separación. El acondicionamiento del efluente de la zona reactiva se lleva a cabo mediante una turbina con dos objetivos principales: 1) disminuir la presión de la corriente de 80 bar a una presión cercana a la atmosférica (requerida para el diseño del tren de destilación); y 2)

aprovechar la energía cinética de esta corriente para generar electricidad, que puede ser útil para el suministro interno de algunos equipos. La corriente de salida de la zona reactiva que se alimenta al tren de separación incluye cuatro productos: gases ligeros (C1-C4), naftas (C5-C7), bioturbosina (C8-C16) y diésel verde (C17-C21). Se considera que estos productos serán purificados mediante una secuencia de destilación directa convencional; ya que de acuerdo a Romero-Izquierdo (2015) es la secuencia que presenta menor consumo de energía.

Para el diseño del tren de separación primero se modelan las columnas mediante el módulo DSTWU del Aspen Plus V.8.7; este módulo utiliza el método de Fenske-Underwood-Gilliland. Esto permite obtener un diseño preliminar al modelado riguroso de las columnas, que se ejecuta mediante el módulo Radfrac el cual utiliza las ecuaciones MESH; que son las ecuaciones de balance de materia global y de componentes, balances de energía y las relaciones de equilibrio de fases para cada etapa de la columna. El método termodinámico utilizado para el cálculo del equilibrio de fases en las columnas del tren es BK10, modelo que es aplicable a mezclas complejas de hidrocarburos (hidrocarburos lineales e isómeros).

3.3 Proceso intensificado mediante destilación reactiva

Con la información presentada hasta ahora se puede realizar el modelado del proceso convencional de hidrotratamiento, el cual será utilizado para comparar con las alternativas intensificadas que incluyen columnas de destilación reactiva. El primer paso para definir los procesos intensificados es analizar las posibles secuencias intensificadas mediante destilación reactiva que se podrían obtener en el proceso de hidrotratamiento. De manera general, son las siguientes:

1. Reactor de HDO integrado a una columna de destilación + Reactor de craqueo/isomerización + secuencia de separación (Figura 11).
2. Reactor de HDO + Reactor de craqueo/isomerización integrado a una columna de destilación + secuencia de separación (Figura 12).

3. Ambas zonas reactivas integradas a una columna de destilación + secuencia de separación (Figura 13).

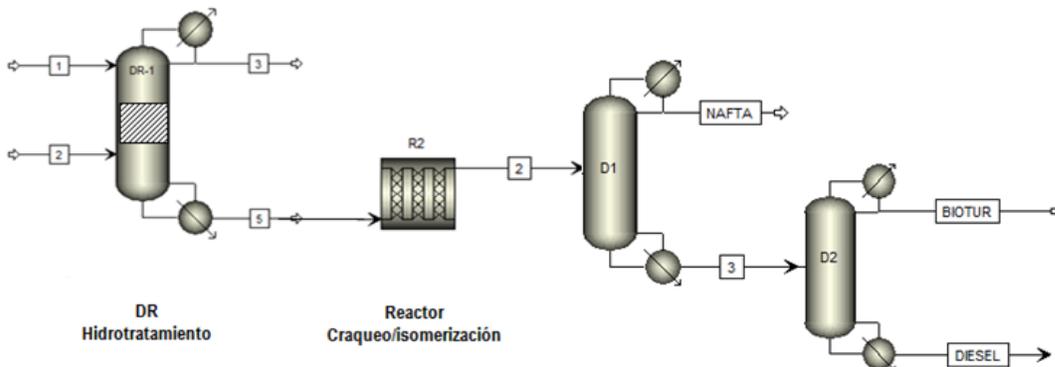


Figura 11. Intensificación del proceso de hidrot ratamiento mediante destilación reactiva. Alternativa 1

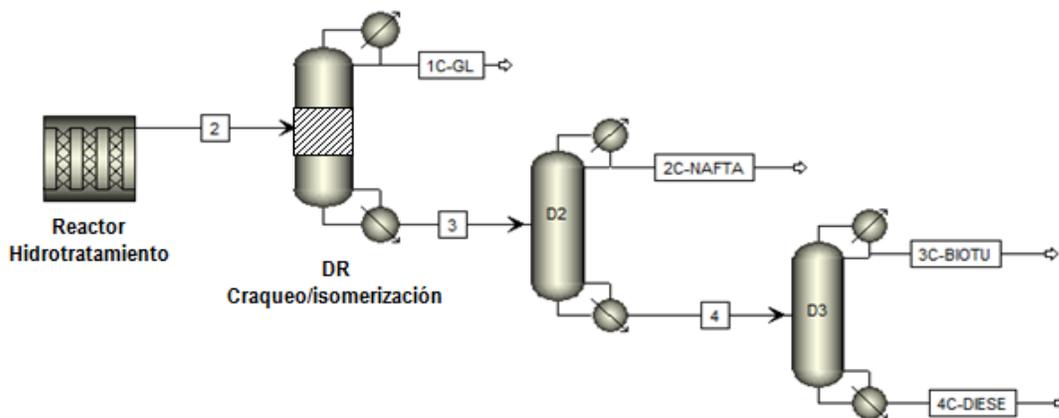
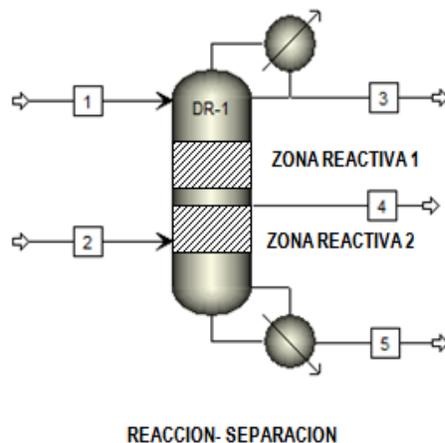


Figura 12. Intensificación del proceso de hidrot ratamiento mediante destilación reactiva. Alternativa 2



**Figura 13. Intensificación del proceso de hidrotratamiento mediante destilación reactiva.
Alternativa 3**

Por lo tanto, para cada una de las alternativas se realizó un análisis paramétrico en Aspen Plus, con el objetivo de proponer un esquema que posibilitara el cumplimiento de los balances de masa, de energía así como el equilibrio de fases.

Todas las simulaciones de las columnas de destilación reactiva se llevaron a cabo con el modelo de estado estacionario Radfrac en el software de simulación Aspen Plus, considerando etapas de equilibrio. Las etapas son numeradas del domo hacia el fondo, con el condensador (en caso de ser parcial) como etapa 1 y el rehervidor como la etapa N. Las reacciones químicas toman lugar en la fase líquida. Para la zona reactiva de la columna se consideran los modelos cinéticos descritos previamente en la sección 3.2, así como el esquema de reacciones para cada zona reactiva que se encuentra especificado en el Apéndice A. El tiempo de retención de la fase líquida en los platos reactivos es considerado como el tiempo de residencia del reactor en el proceso convencional. El método de cálculo del equilibrio líquido-vapor es la ecuación de estado Peng-Robinson, la cual es recomendada para sistemas que involucran hidrógeno e hidrocarburos entre sus componentes (Rosales-Quintero et al., 2008). Para la columna de destilación reactiva se tienen como variables de diseño (grados libertad) los que se listan a continuación;

- Presión
- Número de platos reactivos
- Número de platos en la sección de rectificación y en la sección de agotamiento
- Relación de reflujo
- Tipo de condensador (parcial, total o sin condensador)
- Ubicación de la zona reactiva
- Temperatura de flujos de alimentación

Con base en las variables de operación del reactor convencional se fijaron todos los grados de libertad. Posteriormente, se varió una variable a la vez hasta obtener un diseño factible en términos de la convergencia del sistema para las fases permitidas; al mismo tiempo se buscaba una configuración con un reducido consumo energético, que satisfaga

las recuperaciones deseadas de los productos clave así como la conversión esperada. Como resultado de este análisis paramétrico se obtendrán un cierto número de configuraciones factibles, las cuales constituirán los procesos intensificados. Tanto los procesos intensificados como el convencional serán comparados en términos de costos totales anuales, emisiones de CO₂ y precio de venta; cuya forma de cálculo se presenta en la siguiente sección.

3.4 Cálculo de costo total anual

El cálculo del costo total anual se realiza mediante el método desarrollado por Guthrie; en este método el proceso bajo análisis se divide en módulos de equipo (intercambiador de calor, bomba, turbina, columna, etc.), cuya estimación del costo incluye costo del material, mano de obra y costos indirectos de instalación.

El método comienza con la estimación de un costo base en función de alguna dimensión del equipo (parámetro de capacidad o tamaño); el cual considera acero al carbón como material de construcción y una presión de operación de 1 atm. Este costo se ajusta al incorporar factores multiplicadores que dependen del material de construcción, presión de operación del equipo, geometría, y actualización del año para la construcción del equipo deseado. La ecuación general para el cálculo del costo base de equipos es:

$$\log_{10}C_p = K_1 + K_2 \log_{10}A + K_3 (\log_{10}A)^2 \quad (\text{Ec. 3})$$

Donde:

C_p = Costo base

K_i = Factores que dependen del tipo de equipo, características físicas y de operación del mismo

A = Parámetro de capacidad o tamaño

Los factores K_i utilizados en el presente trabajo se toman de Turton y col. (Turton et al., 1998; Turton et al., 2012). El cálculo del costo base de columnas de destilación resulta de la sumatoria de los costos de los equipos individuales que la constituyen (coraza, platos, rehervidor, y condensador, entre otros). Todos los componentes de la columna se pueden

calcular utilizando la ecuación 3, a excepción del costo de los platos que se calcula de la siguiente manera:

$$C_p = 235 + 19.80 D + 75.07 D^2 \quad (\text{Ec. 4})$$

Donde D es el diámetro de la columna. Una vez obtenido el costo base, éste se puede corregir con el empleo de algunas relaciones. El factor de corrección por presión se calcula como sigue:

$$\log_{10} F_p = C_1 + C_2 \log_{10} P + C_3 (\log_{10} P)^2 \quad (\text{Ec. 5})$$

Donde:

F_p = Factor de presión

C_i = Factores que dependen del tipo de equipo (Turton et al., 1998; Turton et al., 2012)

P = Presión manométrica (barg) del equipo

Si el equipo es una bomba, el ajuste de presión se realiza de la siguiente manera:

$$F_p = C_1 + C_2 \log_{10} P + C_3 (\log_{10} P)^2 \quad (\text{Ec. 6})$$

De igual manera se tiene una ecuación particular para el cálculo del factor de corrección por presión para recipientes:

Si: $3.7 < P < 400 \text{ barg}$

$$F_p = 0.5146 + 0.6838 \log_{10} P + 0.2970 (\log_{10} P)^2 + 0.0235 (\log_{10} P)^6 + 0.002 (\log_{10} P)^8 \quad (\text{Ec. 7})$$

En el caso de que $-0.5 < P < 3.7 \text{ barg}$, $F_p = 1$; mientras que $P < -0.5 \text{ barg}$, $F_p = 1.25$

Respecto a la corrección para materiales de construcción del equipo (F_M), los valores se toman de Turton y col. (1998 y 2012).

Por otra parte, mediante los factores de corrección de presión y material, el costo base se modifica y se calcula el costo del módulo desnudo de la siguiente manera:

$$C_{BM}^0 = C_P F_{BM}^0 = C_P (B_1 + B_2 F_M F_P) \quad (\text{Ec. 8})$$

Donde:

C_{BM}^0 = Costo del módulo desnudo (considera costos directos e indirectos del equipo)

F_{BM}^0 = Factor del módulo desnudo

B_1 y B_2 = Factores dependientes del tipo de equipo (Turton et al., 1998; Turton et al., 2012)

Respecto a los platos de una columna de destilación, el costo del módulo desnudo se calcula de la siguiente manera:

$$C_{BM}^0 = C_P N F_{BM} F_q \quad (\text{Ec. 9})$$

Donde:

N = Número de platos

F_{BM} = Factor del módulo desnudo que depende del material de construcción de los platos

F_q = Factor de cantidad, que depende del número de platos de la columna, (Turton et al., 1998; Turton et al., 2012).

Para el caso de equipos compresores, el costo del módulo desnudo se determina de la siguiente manera:

$$C_{BM}^0 = C_P F_{BM} \quad (\text{Ec. 10})$$

Donde:

F_{BM} = Factor del módulo desnudo que depende del material de construcción del equipo recuperador de potencia (Turton et al., 1998; Turton et al., 2012).

De manera general, el costo de módulo desnudo corresponde a los diferentes equipos de proceso requeridos, con las dimensiones, materiales y presiones reales. Ahora es necesario realizar un ajuste por el año de construcción. Las correlaciones de costos proporcionadas por Turton y col. se determinaron para el año 1996, por lo que es necesario tomar en cuenta la variación del valor del dinero en el tiempo. Esta variación es debida a los cambios en las condiciones económicas, siendo la inflación el principal factor de

cambio. Tal variación se representa por índices, siendo el más reciente reportado para el año 2011 (Turton et al., 2012):

$$C_{2011} = C_{1996} \left(\frac{I_{2011}}{I_{1996}} \right) \quad (\text{Ec. 11})$$

Donde:

C_{1996} = Se refiere al costo del módulo desnudo calculado

Una vez ajustado el costo del módulo desnudo con el índice más actual deben considerarse costos adicionales debido a contingencias y diversas cuotas. De acuerdo con Turton y col. se recomienda considerar un 18 % del costo del módulo desnudo ajustado en el tiempo, adicional a su valor neto. Además, también deben ser considerados otros gastos importantes respecto a equipos, tales como equipamiento, mantenimiento, instalación, etc. Esto representa el 61 % del costo del módulo desnudo ajustado en el tiempo. Por lo tanto, la ecuación 12 define el costo final para los equipos involucrados:

$$C_{equipos} = 0.18 \sum_{i=1}^n C_{BMi}^0 + 0.61 \sum_{i=1}^n C_{BMi}^0 + \sum_{i=1}^n C_{BMi}^0 \quad (\text{Ec. 12})$$

Por último, es necesario anualizar el costo de capital. Para ello, se debe conocer la manera en que ha de comportarse la inversión en el tiempo tal como se expresa en la siguiente ecuación:

$$F_n = P (1 + i)^n \quad (\text{Ec. 13})$$

Donde:

n = Número de años para retorno de inversión (por lo general entre 5 y 10 años).

F_n = Valor que tendrá la inversión después de n años

i = Tasa de interés

P = Inversión inicial

Hasta este punto se han mostrado las ecuaciones para el cálculo del costo total de los equipos. Sin embargo, también debe calcularse el costo asociado a los servicios auxiliares. En el proceso de hidrotatamiento los servicios auxiliares requeridos son vapor de agua, agua de enfriamiento, refrigerante y electricidad.

En general, el vapor es el servicio que debe generarse a partir de agua empleando algún combustible para vaporizarla. El flujo de vapor necesario para cumplir con los requerimientos energéticos de un sistema se calcula mediante un balance de energía:

$$m_{vapor} = \frac{Q_{cal}}{\lambda_{vap}} \quad (\text{Ec. 14})$$

Donde:

m_{vapor} = Flujo de vapor

Q_{cal} = Requerimiento energético del sistema al que se suministrará calor mediante el vapor

λ_{vap} = calor latente del vapor

También se debe calcular la cantidad de combustible requerido para la producción del vapor, mediante un balance de energía en la caldera. En este trabajo se considera gas natural, por lo que la masa de combustible se calcula de la siguiente manera:

$$m_{combustible} = \frac{m_{vapor}(h_v - h_{AA})}{Cp_{combustible}\eta} \quad (\text{Ec. 15})$$

Donde:

$m_{combustible}$ = Masa de combustible quemado, en este caso, gas natural

m_{vapor} = Cantidad de vapor requerido

h_v = Entalpía del vapor saturado a condiciones de saturación

h_{AA} = Entalpía de agua de alimentación (25 °C, 1 atm)

$Cp_{combustible}$ = Capacidad calorífica del gas natural, 65.5738 kJ/kg

η = Eficiencia de la caldera (0.8 para calderas que operan con gas natural)

Otros costos asociados a la generación de vapor son el consumo y costo de productos químicos, agua inicial, energía eléctrica, así como los asociados a operación y mantenimiento. Tomando en cuenta lo anterior, la ecuación que estima el costo del vapor saturado proveniente de una caldera de gas natural queda como sigue:

$$P_{vap\ sat} = m_{comb}P_{comb} + P_Q + P_A + P_E + P_{OM} \quad (\text{Ec. 16})$$

Donde:

P_Q = Precio asociado a los productos químicos utilizados

P_E = Precio de la electricidad

P_{OM} = Precio referido a la operación y mantenimiento de la caldera

P_A = Precio asociado al agua utilizada

Por otra parte, la estimación del costo del vapor sobrecalentado se realiza bajo la consideración de la compra del vapor saturado a condiciones cercanas al punto crítico del agua (218 atm y 374 °C); este vapor es sobrecalentado a las condiciones de operación requeridas mediante un compresor auxiliar. Por lo tanto, se tiene que el costo neto del vapor sobrecalentado es la suma del costo del vapor saturado así como del derivado de la electricidad consumida por el compresor tal y como se muestra en la ecuación 17:

$$P_{vap\ sobrecalentado} = P_{vap\ sat} \left(\frac{\$USD}{h} \right) + P_{Elec\ comp} \left(\frac{\$USD}{h} \right) \quad (Ec. 17)$$

Una vez obtenido el precio, éste debe ser anualizado para ser sumado a los costos referentes a equipos. Tal anualización se obtiene considerando 8500 horas de operación anual.

El agua de enfriamiento requerida en el proceso se calcula mediante:

$$m_{agua} = \frac{Q_{enf}}{Cp_{agua} \Delta T_{agua}} \quad (Ec. 18)$$

Donde:

m_{agua} = Flujo de agua

Q_{enf} = Cantidad de energía a retirar del sistema mediante enfriamiento

Cp_{agua} = Capacidad calorífica del agua

ΔT_{agua} = Cambio de temperatura que experimenta el agua al retirar la energía.

Normalmente, el agua a la entrada es considerada a 25 °C y 1 atm. Por tanto, el costo anualizado del servicio será:

$$C_{agua} = (m_{agua})(P_{agua}) \left(8500 \frac{h}{año} \right) \quad (\text{Ec. 19})$$

Donde:

C_{agua} = Costo anualizado del agua

P_{agua} = Costo unitario del agua, $\left(\frac{\$USD}{h} \right)$ (Turton et al., 2012)

Por otra parte, para estimar el costo anualizado del refrigerante se debe calcular la cantidad requerida mediante:

$$m_R = \frac{Q_{enf}}{\lambda_R} \quad (\text{Ec. 20})$$

Donde:

m_R = Cantidad a emplearse (kg)

Q_{enf} = Cantidad de energía a retirar (kcal/kg)

λ_R = Calor latente de vaporización del refrigerante

Una vez calculada la masa requerida, conociendo el costo unitario del mercado, $P_R \left(\frac{\$USD}{h} \right)$, y contemplando 8,500 h/año de operación, el costo anualizado queda como sigue:

$$C_R = m_R P_R \left(8500 \frac{h}{año} \right) \quad (\text{Ec. 21})$$

Ahora bien, el costo de la electricidad puede ser calculado con la siguiente expresión:

$$C_{Elect} = kW_{req} (P_{elect}) \left(8500 \frac{h}{año} \right) \quad (\text{Ec. 22})$$

Donde:

kW_{req} = Potencia requerida en el proceso

P_{elect} = Precio unitario de kWh $\left(\frac{\$USD}{kWh} \right)$ de acuerdo con CFE, tarifa de alta tensión para industrias en la región central (CFE, 2015)

Finalmente, deben estimarse los costos de materias primas asociados a la compra del aceite de *Jatropha curcas* e hidrógeno. De acuerdo con el proveedor Global Hydrogen[®] (2015) el precio del hidrógeno es de 2.47 USD/kg. El costo del aceite de *Jatropha curcas* mexicana, de acuerdo con el blog de *Jatropha México* (2015), es de 6 USD/l. Por lo tanto, los costos anualizados para el aceite y el hidrógeno, respectivamente, se calculan:

$$C_{aceite} = (m_{aceite})P_{aceite} \left(\frac{\$USD}{h} \right) \left(8500 \frac{h}{año} \right) \quad (\text{Ec. 23})$$

$$C_{H_2} = (m_{H_2})P_{H_2} \left(\frac{\$USD}{h} \right) \left(8500 \frac{h}{año} \right) \quad (\text{Ec. 24})$$

A continuación se presenta el cálculo para la estimación del precio de venta.

3.5 Estimación de precios de venta

Estimar el precio de venta de un producto permite comparar la rentabilidad del producto en cuestión, respecto aquellos similares que se ofrecen en el mercado. En este trabajo, la determinación del precio de venta de los productos se lleva a cabo sin considerar costos de transporte de materias. El precio de un producto $\left(\frac{\$USD}{kg} \right)$ es obtenido como resultado del costo total del proceso productivo (C , razón entre el costo total y la capacidad total), y la utilidad esperada de la venta del producto, como sigue:

$$P = C + Utilidad \quad (\text{Ec. 25})$$

Donde:

$$C = \left(\text{costo total} \frac{\$USD}{año} \right) / \left(\frac{kg}{año} \text{ producidos} \right) \quad (\text{Ec. 26})$$

La utilidad puede estimarse mediante la siguiente ecuación:

$$Utilidad = \frac{(\% \text{ Tasa de retorno})(C_{total})}{Capacidad} \quad (\text{Ec. 27})$$

Donde:

C_{total} = Costo total de procesamiento

% *Tasa de retorno* = Beneficio neto actual dividido entre inversión total inicial expresado en por ciento.

Capacidad = Producción neta de la planta.

Una vez sea estimado el costo total de inversión (\$USD/año) se supone una tasa de retorno de inversión del 30 % (Jiménez-Gutiérrez, 2003), comúnmente considerada para plantas de proceso; sin embargo, lo anterior supone la estimación del precio de venta de un sólo producto. Por lo que se obtiene la utilidad y el precio inicial para un único producto, y posteriormente la asignación del precio de venta para cada uno de los 4 productos obtenidos se lleva a cabo mediante:

$$P_i = \rho_i X_i P F_C \quad (\text{Ec. 28})$$

Donde:

P_i = Precio del producto i , $\left(\frac{\$MX}{L}\right)$

i = Gases ligeros, naftas, bioturbosina o diésel verde

X_i = Fracción másica

ρ_i = Densidad del producto obtenida de los resultados de las simulaciones en Aspen Plus, $\left(\frac{kg}{L}\right)$

P = Precio calculado para un sólo producto $\left(\frac{\$USD}{kg}\right)$, mediante (Ec. 25)

F_C = Factor de conversión, 1 USD = \$ 15.00 MXN

3.6 Estimación de emisiones de CO₂

Otro índice de desempeño a considerar en el proceso de obtención de bioturbosina es el impacto ambiental, traducido en kg CO₂/h. Las emisiones de CO₂ en el proceso se generan principalmente por la producción de vapor de agua y consumo de electricidad.

En la producción de vapor de agua las emisiones de CO₂ están asociadas a la quema de combustible en las calderas, dado que químicamente es liberado una vez llevada a cabo la reacción de combustión. Para la estimación de las emisiones de CO₂ se utiliza un factor

de emisión específico para calderas que operan con gas natural: 2.15 kg CO₂/Nm³ de gas natural (Oficina Catalana de Cambio Climático, 2013). Por lo que una vez obtenido el cálculo de la cantidad de combustible requerido es necesario calcular su volumen en metros cúbicos normales Nm³ mediante la siguiente expresión:

$$V_{combustible} = \frac{m_{combustible}(R)(T)}{(PM)(P)} \quad (\text{Ec. 29})$$

Donde:

$V_{combustible}$ = Volumen de gas natural requerido, Nm³

$m_{combustible}$ = Masa de combustible requerido

R = Cte. de los gases ideales

T = Temperatura, 0 °C

PM = Peso molecular del gas natural

P = Presión, 1atm

Entonces, las emisiones de CO₂ debidas a la generación de vapor se calculan con:

$$\frac{kg \text{ CO}_2}{h \text{ gn}} = (F_{gn})(V_{combustible}) \quad (\text{Ec. 30})$$

Donde $\frac{kg \text{ CO}_2}{h \text{ gn}}$ es el flujo másico de CO₂ y F_{gn} el factor de emisión.

Por otra parte, el uso de energía eléctrica dentro del proceso genera emisiones asociadas a su producción, tales se calculan mediante (Ec. 34):

$$\frac{kg \text{ CO}_2}{h \text{ elec}} = (F_{elec})(C_{elec}) \quad (\text{Ec. 31})$$

Donde $\frac{kg \text{ CO}_2}{h \text{ elec}}$ es la cantidad de CO₂ emitido por la generación de electricidad en México, F_{elec} es el factor de emisión para el caso de México y corresponde a 0.166 kg CO₂/kWh (MAGRAMA, 2011), mientras que C_{elec} es el consumo de energía eléctrica dentro del proceso (kWh). Por tanto, las emisiones de CO₂ del proceso completo se calculan mediante la siguiente expresión:

$$\frac{kg\ CO_2}{h\ total} = \frac{kg\ CO_2}{h\ gn} + \frac{kg\ CO_2}{h\ elec} \quad (\text{Ec. 32})$$

CAPÍTULO 4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados de la intensificación del proceso de hidrotratamiento utilizando columnas de destilación reactiva. Los resultados se organizan por escenarios para facilitar su análisis. Éstos incluyen el proceso convencional que es tomado como el escenario base, así como cuatro variantes del proceso intensificado mediante la incorporación de columnas reactivas. Primero se presentan los resultados de las secciones que son comunes a todos los escenarios, y posteriormente se describen los resultados de cada uno. Finalmente, todos los escenarios son comparados en términos de costo total anual, emisiones de CO₂, consumo energético y precio de venta de la bioturbosina.

4.1 Escenario base: Proceso de hidrotratamiento convencional

El escenario base consiste en el proceso de hidrotratamiento convencional, que fue descrito en la sección 2.3.1.1. Se incluye aquí el acondicionamiento de los reactivos, la zona reactiva y la zona de separación. Se comienza presentando los resultados de la sección de acondicionamiento de los reactivos.

4.2 Acondicionamiento de reactivos

El primer paso en el modelado del proceso es acondicionar los flujos de alimentación de los reactivos a las condiciones de operación del primer reactor (R-HDO). Para realizar el acondicionamiento se utilizan intercambiadores de calor (INT-01 y INT-02), un compresor (CMPR-01) y una bomba (B-01), tal y como se observa en la Figura 14. Las principales características de operación de los equipos de acondicionamiento tanto del hidrógeno (H2-01) como del aceite (TGA-01) se presentan en las Tablas 7 y 8, respectivamente.

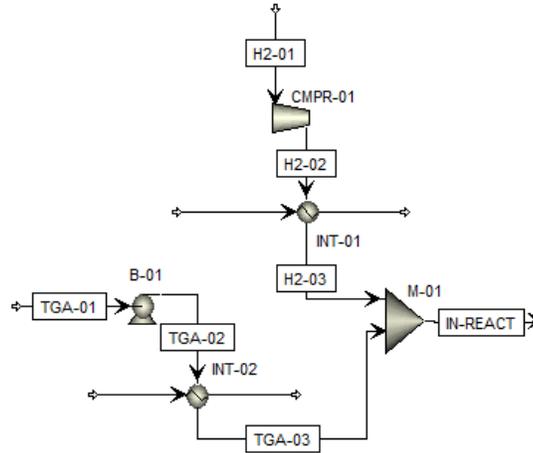


Figura 14. Acondicionamiento de corrientes de alimentación de reactivos al reactor HDO

Tabla 7. Equipos auxiliares en el acondicionamiento de la corriente de hidrógeno

	Compresor isentrópico (CMPR-01)		Calentador (INT-01)
Potencia de freno (hp)	2.39	Temperatura de entrada (°C)	-192.86
Electricidad (kW)	1.78	Temperatura de salida (°C)	320
Eficiencia	0.72	Fracción de vapor	1
Presión descarga (bar)	80	Carga térmica (kW)	28.31
Temperatura descarga (°C)	-192.86		

Tabla 8. Equipos auxiliares en el acondicionamiento de la corriente de aceite de Jatropha

	Bomba (isentropico) (B-01)		Calentador (INT-02)
Potencia de freno (hp)	4.47	Temperatura de entrada (°C)	79.95
Electricidad (kW)	3.33	Temperatura de salida (°C)	320
Eficiencia	0.295	Fracción de vapor	0
Presión descarga (bar)	80	Carga térmica (kW)	14.02
Temperatura descarga (°C)	79.95		
Flujo volumétrico (m ³ /h)	0.44		

4.3 Reacciones de hidrogenación

Las corrientes acondicionadas de hidrógeno y aceite son introducidas al reactor de hidrogenación, el cual es modelado con el módulo Rplug de Aspen Plus. Cabe mencionar que este módulo sólo permite una alimentación de reactivos, por lo que fue necesario introducir un mezclador, módulo MIXER (M-01), como se aprecia en la Figura 14.

Los resultados de la simulación del reactor se muestran en la Tabla 9, donde se observa que las reacciones de HDO son exotérmicas (- 46.0507 kW). Dicha energía puede ser utilizada para reducir los requerimientos energéticos del proceso (principalmente los requerimientos de vapor), así como el impacto ambiental asociado (Gutiérrez-Antonio et al., 2016). Las dimensiones del reactor son 0.1 m de diámetro y una longitud de 0.2 m, dado que la base de cálculo que se considera es 100 kg/h de aceite. Este resultado es también consistente con lo reportado por Sharma y col. (2012).

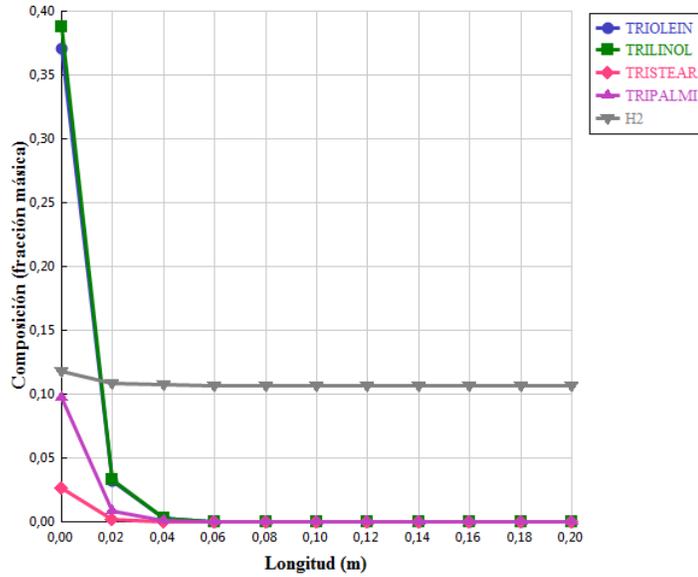
Tabla 9. Condiciones de operación y resultados del reactor HDO

	Reactor de hidrodesoxigenación (HDO)
Tipo de reactor	Temperatura específica constante
Temperatura (°C)	320
Presión (bar)	80
Longitud (m)	0.2
Diámetro (m)	0.1
Energía (kW)	- 46.05
Tiempo de residencia (h)	0.00035506
Flujo de salida (kmol/h)	6.9

El esquema de reacciones propuesto en este primer reactor considera la formación de hidrocarburos y 3 subproductos: monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂) y vapor de agua (H₂O). Dichos subproductos deben ser separados para que sólo los hidrocarburos lineales de cadena larga sean alimentados al segundo reactor. Para ello, se utiliza un módulo SEP (SEP-01). Este equipo no es considerado dentro de la estimación de costos, dado que en la práctica esta función podría realizarse mediante una válvula de extracción de gases integrada dentro de la configuración del reactor de HDO.

La distribución de productos generados en el primer reactor se muestra en la Figura 15, donde se observa que la fracción másica mayor corresponde a los productos oligomerizados (> C18) (Figura 15b); estos resultados son consistentes con lo reportado por Sharma y col. De la Figura 15a se puede observar que prácticamente todos los triglicéridos son transformados a hidrocarburos de cadena lineal; mientras que el flujo de hidrógeno, alimentado en exceso, aun es elevado por lo que se ingresa al segundo reactor junto con los hidrocarburos lineales.

a)



b)

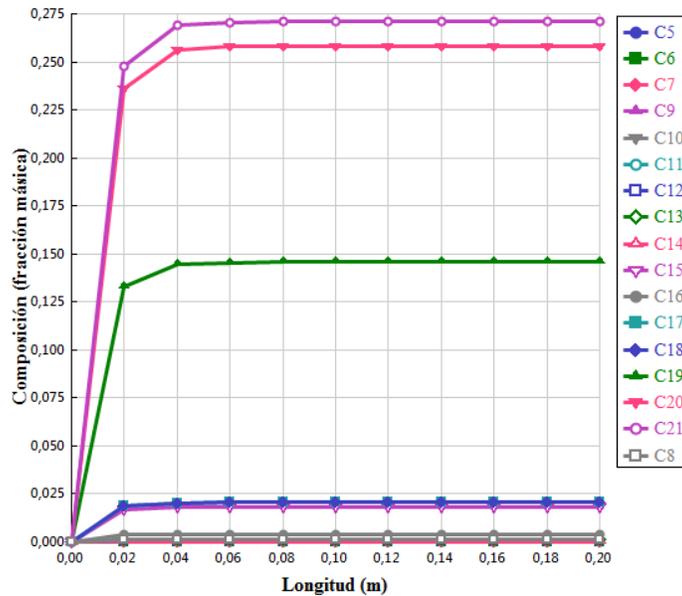


Figura 15. Distribución de productos en el reactor de HDO. 15a) Composición másica del aceite e hidrógeno; 15b) Distribución de los productos de reacción.

4.4 Reacciones de hidrocrqueo/hidroisomerización

El reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización se modeló en Aspen Plus en el módulo RPlug (R-HC-IS), a una especificación de temperatura constante de 480 °C. Las condiciones de operación y los resultados se presentan en la Tabla 10, de donde se observa que hay un requerimiento de energía de 13.03 kW. Se considera que dicha energía es requerida para llevar a los hidrocarburos lineales y el hidrógeno a la temperatura de

reacción (480 °C); pues en este caso no hay un acondicionamiento previo, y éstos son ingresados a las condiciones de salida del reactor HDO, que son 320 °C y 80 bar. Las dimensiones de este reactor siguen siendo consistentes con la base de cálculo seleccionada. Se tiene un diámetro de 0.2 m y una longitud de 0.4 m, el tiempo de residencia es de 0.002452 h⁻¹; tiempo que favorece la integración de la reacción-separación en un mismo equipo, pues las velocidades de reacción son razonablemente altas. De acuerdo con las reacciones propuestas, la composición de la corriente de salida del reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización es la siguiente:

Gases ligeros: metano (C1), etano (C2), propano (C3) y n-butano (C4)

Naftas: n-pentano (C5), iso-pentano (isoC5), iso-hexano (isoC6), n-hexano (C6), iso-heptano (isoC7) y n-heptano (C7)

Bioturbosina: iso-octano (isoC8), iso-nonano (isoC9), n-octano (C8), n-nonano (C9), iso-decano (isoC10), n-decano (C10), n-undecano (C11), iso-dodecano (isoC12), n-dodecano (C12), n-tridecano (C13), iso-hexadecano (isoC16), n-tetradecano (C14), n-pentadecano (C15) y n-hexadecano (C16).

Diésel verde: n-heptadecano (C17), n-octadecano (C18), n-nonadecano (C19), n-eicosano (C20), n-heneicosano (C21)

Tabla 10. Condiciones de operación y resultados del reactor hidrocrqueo/hidroisomerización

	Reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización (R-HCR-IS)
Tipo de reactor	Temperatura específica constante
Temperatura (°C)	480
Presión (bar)	80
Longitud (m)	0.4
Diámetro (m)	0.2
Energía (kW)	13.0305
Tiempo de residencia (h)	0.002452
Flujo de salida (kmol/h)	6.3296

La distribución de los productos del segundo reactor se muestra en la Figura 16, donde se observa que la mayor fracción másica corresponde al componente C21 perteneciente a los hidrocarburos en el rango del diésel verde; ello también es consistente con lo mostrado en la Tabla 11, de la cual se destaca que los mayores rendimientos respecto a la alimentación de aceite se obtienen hacia los hidrocarburos en el rango del diésel verde

(35.652 %) y la bioturbosina (18.619 %). Mientras que el rendimiento hacia los gases ligeros y las naftas es de 14.3 % y 16.92 %, respectivamente.

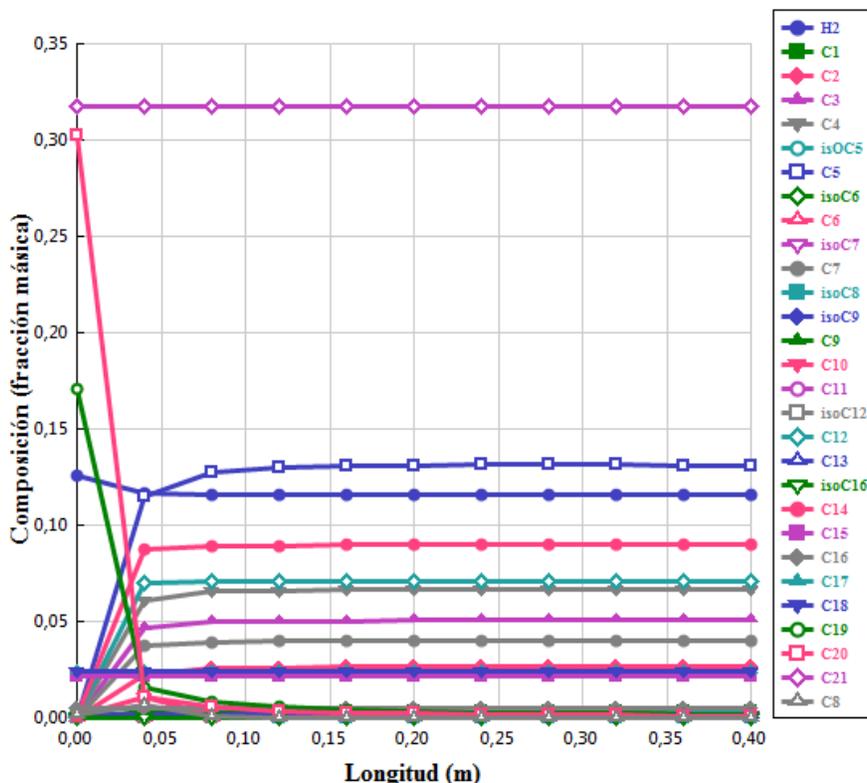


Figura 16. Distribución de reactivos y productos del reactor de hidrocrackeo/hidroisomerización

En la corriente de salida del reactor de hidrocrackeo/hidroisomerización aún se encuentra cierta cantidad de hidrógeno que no reaccionó; el cual se separa de los hidrocarburos mediante el módulo SEP (SEP-02). Este equipo se considera como virtual, ya que en la práctica podría formar parte del diseño del reactor (p. ej. una membrana de separación de gases). Cabe mencionar que el hidrógeno que se retira puede ser recirculado al proceso, pero dicha alternativa no es explorada en el presente trabajo.

Una vez que se remueve el hidrógeno de la corriente (OUT-RHCI) es necesario disminuir su temperatura y presión, para ingresarla al tren de destilación. Por tanto, se propone una turbina (TURB-01) para el acondicionamiento de esta corriente, la cual permite aprovechar la energía cinética (Gutiérrez-Antonio et al., 2013) para la generación de electricidad.

Tabla 11. Composición a la salida del reactor de hidrocraqueo/hidroisomerización y rendimientos

Componente	Fracción másica	Flujo Másico (kg/h)	Producto	Flujo másico total (kg/h)	Alimentación aceite (kg/hr)	%Rendimiento
C1	0.00358	0.3459	Gases ligeros	14.308	100	14.308
C2	0.02687	2.5987				
C3	0.05068	4.9011				
C4	0.06682	6.4624				
ISOC5	0.00259	0.2508	Naftas	16.923		16.923
C5	0.13109	12.671				
ISOC6	5.73E-06	0.00055				
C6	0.000272	0.0263				
ISOC7	0.000813	0.07869				
C7	0.04027	3.8951				
ISOC8	6.81E-05	0.00658				
C8	1.26E-05	0.00122	Bioturbosina	18.619		18.619
ISOC9	2.35E-05	0.00226				
C9	0.00111	0.1080				
C10	4.28E-05	0.00413				
C11	0.00139	0.1344				
ISOC12	0.001457	0.1409				
C12	0.07064	6.8319				
C13	0.001639	0.1585				
ISOC16	9.79E-05	0.00947				
C14	0.09007	8.7107				
C15	0.02129	2.059	Diésel verde	35.652	35.652	
C16	0.00466	0.4511				
C17	0.024107	2.3313				
C18	0.02399	2.3204				
C19	0.001741	0.1684				
C20	0.001120	0.1083				
C21	0.31770	30.7235				

Adicionalmente se requiere un equipo enfriador para alcanzar las condiciones necesarias en la corriente de alimentación al tren de destilación. Las principales características de operación y los resultados de ambos equipos se muestran en la Tabla 12. En esta Tabla también se muestra que la cantidad de energía eléctrica que se genera mediante la turbina (TURB-01) es 3.366 KW, energía que se utiliza para abastecer parte de la demanda de otras etapas del proceso. Además también se destaca de la Tabla 12 que el enfriador (INT-04) retira 28.9421 kW, energía térmica que puede ser integrada en una red de intercambio con el propósito de satisfacer la demanda de servicios de calentamiento/enfriamiento, tal como es señalado en el trabajo de Romero-Izquierdo y col. (2015).

La zona de separación del proceso de hidrot ratamiento convencional ha sido modelada mediante una secuencia directa de destilación (Figura 17), con base en lo reportado por Romero-Izquierdo (2015).

Tabla 12. Equipos de condicionamiento de la corriente de entrada al tren de destilación

	Turbina (TURB-01)		Enfriador (INT-04)
Potencia de freno (hp)	-4.51	Temperatura de entrada (°C)	408.97
Electricidad (kW)	3.37	Temperatura de salida (°C)	27.22
Eficiencia	0.72	Fracción de vapor	0.387
Presión descarga (bar)	1.36	Carga térmica (kW)	28.94
Temperatura descarga (°C)	408.97		

En la Figura 17 se puede observar que mediante la secuencia directa los gases ligeros se obtienen por el domo de la columna 1 (CD-01), las naftas se recuperan en el domo de la columna 2 (CD-02), mientras que en la tercera columna (CD-03) se recupera la bioturbosina como flujo de destilado y el diésel verde en el flujo de fondos. Las principales características de diseño de cada columna del tren de destilación se encuentran en la Tabla 13, donde se observa que la recuperación de los productos clave es del 99 %, respecto a la alimentación. De la Tabla 13 también se observa que el diámetro de las columnas está entre 0.05 y 0.08 m, resultado consistente con la base de cálculo seleccionada; se observa también que dada la posición del corte de la columna CD-01 el equipo condensador seleccionado es un parcial a vapor.

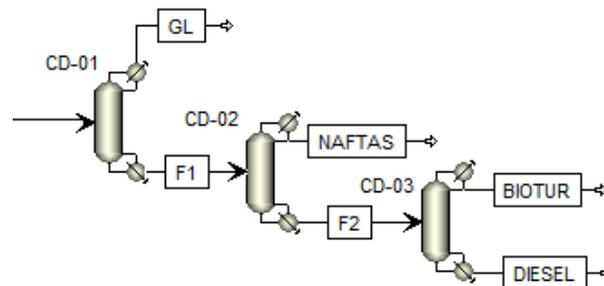


Figura 17. Secuencia de destilación directa convencional para el escenario base

De esta manera, se tiene el modelado completo del proceso de hidrotratamiento convencional mostrado en el diagrama de proceso de la Figura 18.

Tabla 13. Secuencia de separación directa convencional

	Columna 1 (CD-01)	Columna 2 (CD-02)	Columna 3 (CD-03)
Número de etapas totales	17	40	65
Tipo de condensador	Parcial-Vapor	Total	Total
Flujo de destilado (kmol/h)	0.33	0.22	0.099
Relación de reflujo (RR)	0.764	0.375	1.04
Presión del domo (bar)	1.0136	1.358	1.702
Etapas de alimentación	9	21	33
Diámetro (m)	0.054	0.078	0.070
Flujo de fondos (Kmol/h)	0.443	0.223	0.123
Carga térmica (kW)	4.096	11.241	4.86
Recuperación del producto	0.9894	0.99	Domo \approx 0.99 Fondos \approx 0.99

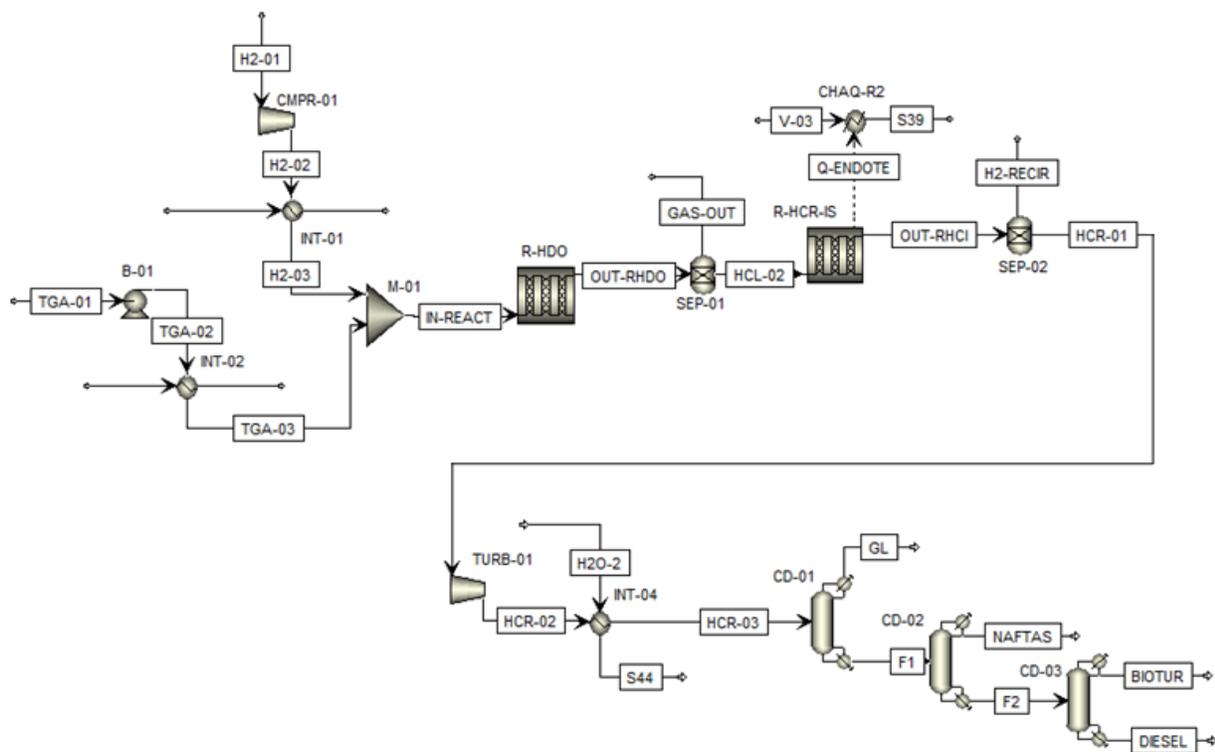


Figura 18. Diagrama de proceso del hidrot ratamiento convencional: Escenario base

Recapitulando, en la Tabla 14 se presenta un resumen de los equipos del proceso convencional, donde se observa que el número de equipos requeridos tanto para acondicionamiento de corrientes como para reacción y separación es 15. Mientras que los equipos principales del proceso son los dos reactores (R-HDO y R-HCR-IS) y las tres

columnas de destilación (CD-01, CD-02 y CD-03), sumando 5 equipos principales en total. El requerimiento global de energía, sin considerar la energía eléctrica generada y consumida, es de 6.64 kW. El rendimiento del proceso convencional hacia la bioturbosina es del 18.62%.

Tabla 14. Resumen de equipos de proceso del escenario base

No. Equipo	Clave	Descripción	Energía (kW)	Eficiencia
1	CMPR-01	Compresor de corriente entrada de hidrógeno	1.78	0.72
2	INT-01	Calentador de corriente entrada de hidrógeno	28.30	N/A
3	B-01	Bomba para corriente entrada de aceite	3.33	0.2957
4	INT-02	Calentador para corriente entrada de aceite	14.02	N/A
5	M-01	Mezclador de corrientes antes de R-HDO	N/A	N/A
6	R-HDO	Reactor/hidroxigenación	-46.05	N/A
7	SEP-01	Separador de gases CO, CO ₂ y H ₂ O	-0.27	N/A
8	R-HCR-IS	Reactor/Hidrocrqueo-hidroisomerización	13.03	N/A
9	CHAQ-R2	Intercambiador/ Calentamiento a R-HCR-IS	13.03	N/A
10	SEP-02	Separador de hidrógeno	-2	N/A
11	TURB-01	Acondiciona Corriente para Separación	-3.37	0.72
12	INT-03	Enfriador de corriente entrada a separación	-28.94	N/A
13	CD-01	Condensador	-1.69	N/A
		Rehervidor	4.096	N/A
14	CD-02	Condensador	-2.47	N/A
		Rehervidor	11.24	N/A
15	CD-03	Condensador	-2.8	N/A
		Rehervidor	4.86	N/A

	Equipos de reacción		Equipos de separación
	Equipos de reacción-separación		Equipos auxiliares

Nota: El signo negativo (-), que antecede a los valores numéricos reportados para energía, significa que está siendo liberada o removida por el equipo en cuestión. Lo que representa una posible fuente de energía que podría ser integrada dentro de una red de intercambio.

4.5 Escenarios intensificados

De los posibles escenarios intensificados, planteados en el capítulo de Metodología, sólo fue posible obtener esquemas factibles para la integración del reactor de craqueo/isomerización con la primera columna de destilación del tren. Se considera que la dificultad para integrar las reacciones de HDO en un esquema de destilación reactiva puede

deberse a factores como la naturaleza de la reacción de HDO (exotérmica); así como a la posible formación de dos fases líquidas, dada la naturaleza hidrofóbica de los hidrocarburos generados y de los triglicéridos aunado a la presencia de agua de reacción.

4.5.1 Modelado de columnas de destilación reactiva

El diseño para la columna de destilación reactiva se obtiene mediante un análisis paramétrico de las variables de diseño. Así, se propusieron dos configuraciones principales para el diseño: 1) columna de destilación reactiva con condensador total y 2) columna de destilación reactiva con condensador parcial. Las configuraciones donde se obtuvieron altas recuperaciones de los productos así como elevada conversión en las reacciones de craqueo/isomerización se presentan en la Tabla 15. De esta tabla, se resalta que para todas las columnas reactivas la presión de domo es 10 bar, mientras que el reactor convencional opera a 80 bar. Otros autores han reportado resultados similares, donde los procesos en los que se integran esquemas de destilación reactiva operan a presiones menores, en comparación con los procesos convencionales (Rosales-Quintero, 2004).

La implementación de la columna de destilación reactiva para el hidrocraqueo/hidroisomerización podría significar menores costos de operación, y un proceso más seguro al operar a menor presión. No obstante, es de gran importancia la validación experimental de los resultados de simulación obtenidos; dado que los parámetros cinéticos que se utilizan para el modelado de las reacciones se calcularon a condiciones de presión distintas. La presión afecta directamente el punto de burbuja de la mezcla reactiva, ya que un decremento en este parámetro puede conducir a una disminución en la temperatura de ebullición, de acuerdo con lo reportado por Granados-Aguilar y col. (2008). Por otra parte, es notorio destacar que en la zona reactiva las temperaturas son cercanas a la temperatura del reactor convencional (480 °C), logrando conversiones similares hacia bioturbosina.

Tabla 15. Diseño de las configuraciones de destilación reactiva

	Columna CR-CRI-1	Columna CR-CRI-2	Columna CR-CRI-3	Columna CR-CRI-4
Número de etapas totales	32	23	13	15
Número de etapas reactivas	7 (etapa 18-24)	7 (etapa 11-17)	7 (etapa 3-9)	7 (etapa 3-9)
Tipo de condensador	Total	Parcial-Vapor	Total	Parcial-Vapor
Flujo de destilado (kmol/h)	6.21	6.21	6.1	6.06
Relación de reflujo (RR)	40	2.3	40	2.3
Presión del domo (bar)	10	10	10	10
Etapas de alimentación de hidrocarburos	18	11	3	3
Etapas de alimentación de hidrógeno	24	17	9	9
Requerimiento de refrigerante	SI	-	SI	-
Diámetro (m)	0.315	0.603	0.793	0.423
Flujo de fondos (kmol/h)	0.123	0.123	0.232	0.27
Carga térmica (kW)	1461.17	546.18	821.36	201.37
Recuperación del producto	Clave ligero (C16) \approx 0.90 Clave pesado (C17) \approx 0.99	Clave ligero (C16) \approx 0.94 Clave pesado (C17) \approx 0.95	Clave ligero (C7) \approx 0.99 Clave pesado (isoC8) \approx 0.01	Clave ligero (C7) \approx 0.999 Clave pesado (isoC8) \approx 0.01

Adicionalmente, se observa que el número de etapas reactivas totales, siete, es el mismo para todas las configuraciones aunque su ubicación dentro de la columna reactiva difiere. De la Tabla 15 también se aprecia que si el diésel verde es obtenido por fondos (CR-CRI-1 y CR-CRI-2), la columna con condensador parcial consume 62 % menos energía, en comparación con aquella que tiene un condensador total. Algo similar ocurre para las configuraciones CR-CRI-3 y CR-CRI-4, donde la mezcla gases ligeros-naftas se obtienen por destilado y la bioturbosina-diésel por flujo de fondos; en este caso, la carga térmica de la configuración con condensador total es casi cuatro veces más que la de la configuración con condensador total. Las altas cargas térmicas de las columnas CR-CRI-1 y CR-CRI-3 se deben a las altas relaciones de reflujo (RR=40 para ambos casos). Por lo tanto, la configuración con menor consumo energético es la CR-CRI-4, mientras que la configuración con menor número de etapas totales es la CR-CRI-3. Se puede observar también que las mejores recuperaciones se logran en la configuración donde se verifica el corte entre bioturbosina y diésel verde.

Cabe señalar también que las configuraciones con condensador total utilizan refrigerante como medio de enfriamiento, dadas las bajas temperaturas requeridas para la condensación de los componentes que salen por el destilado ($-240.75\text{ }^{\circ}\text{C}$ para la columna CR-CRI-1 y $-238.69\text{ }^{\circ}\text{C}$ para CR-CRI-3). Dentro de esos componentes se encuentra el hidrógeno que no reacciona; por ello, el uso de un condensador total implica que la temperatura del flujo de destilado debe estar por debajo de la temperatura crítica del hidrógeno, que es $-240.17\text{ }^{\circ}\text{C}$, pues de otra manera no existiría presión que pudiera licuar al hidrógeno. Por lo tanto se puede concluir que, si bien se logra la convergencia del sistema para las fases permitidas, se deben validar los resultados experimentalmente.

Ahora bien, cuando se comparan las cargas térmicas de las columnas reactivas con condensador parcial se observa que la energía requerida en CR-CRI-4 es la mitad de aquella encontrada para la columna CR-CRI-2; situación que sugiere que la especificación de recuperación de productos clave tiene influencia en las cargas térmicas de estas columnas. Las variables de operación de ambas columnas son muy similares entre sí, pero la ubicación de la zona reactiva es distinta, localizada hacia el domo para columna CR-CRI-4 y hacia al centro de la columna para CR-CRI-2. Esto se debe a que la sección reactiva debe moverse para poder realizar de manera apropiada la separación en cada caso. A continuación, se presentan los resultados de incluir las cuatro configuraciones de columna reactiva al proceso de hidrot ratamiento.

4.5.2 Definición de los escenarios

Los escenarios de estudio se encuentran diferenciados en función de dos aspectos: 1) el corte que ocurre en la columna de destilación reactiva y, 2) el tipo de condensador de la columna reactiva. Los escenarios definidos son los siguientes:

Escenario 1: Proceso de hidrot ratamiento que incluye una columna de destilación reactiva con condensador total, en la que el diésel verde es recuperado por el fondo y el resto de los productos por destilado.

Escenario 2: Proceso de hidrot ratamiento que incluye una columna de destilación reactiva con condensador parcial, en la que el diésel verde es recuperado por el fondo y el resto de los productos por destilado.

Escenario 3: Proceso de hidrotratamiento que incluye una columna de destilación reactiva con condensador total, en la que la bioturbosina y el diésel verde son recuperados por el fondo y el resto de los productos por destilado.

Escenario 4: Proceso de hidrotratamiento que incluye una columna de destilación reactiva con condensador parcial, en la que la bioturbosina y el diésel verde son recuperados por el fondo y el resto de los productos por destilado.

Cabe mencionar que los resultados presentados en el escenario base para el acondicionamiento de los reactivos y el modelado del reactor de HDO son los mismos para todos los escenarios intensificados. A continuación se presenta el análisis de los resultados del proceso completo que incluyen las diferentes configuraciones de columnas de destilación reactiva.

4.5.3 Escenario 1

El escenario 1 corresponde al proceso de hidrotratamiento que incluye la columna de destilación reactiva CR-CRI-1, y es presentado en la Figura 19. De acuerdo con la Figura 21, el efluente del reactor de HDO se separa en hidrocarburos de cadena lineal (corriente HCL-1) e hidrógeno (corriente H2-3). Para realizar dicha separación se utiliza el módulo SEP (SEP-01); este equipo no se considera en el análisis económico, dado que en la práctica podría emplearse una válvula de separación y/o una membrana que se adapte a la configuración del reactor. No obstante, junto al hidrógeno también son arrastrados los gases CO, CO₂ y vapor de agua (corriente H2-3), que resultan de las reacciones de HDO; por lo que se utiliza un segundo separador (SEP-02). Las consideraciones para el SEP-02 son las mismas que para el SEP-01. Una vez que el hidrógeno es separado de los otros gases se ingresa a la columna en la última etapa reactiva (etapa 24), y los hidrocarburos lineales en la primera etapa reactiva (etapa 18), asegurándose de esta manera un flujo a contracorriente.

La presión de operación del reactor HDO es de 80 bar, y la columna reactiva opera a 10 bar, por lo que es necesario acondicionar las corrientes de entrada a la columna reactiva. Para ello se proponen dos turbinas (TURB-1 y TURB-2), un equipo enfriador (INT-03) para la corriente HCL-02 y un calentador para la corriente de hidrógeno (H2-05). En la

Tabla 16 se muestran los resultados y principales características de estos equipos. De esta Tabla se observa que el equipo de mayor consumo energético es el INT-04, requerido para acondicionar la corriente de hidrógeno. De esta Tabla también se observa que mediante este acondicionamiento se logra producir energía eléctrica a razón de 9.387 kW, casi tres veces más que la producida en el proceso de hidrot ratamiento convencional. La mayor cantidad de energía eléctrica se produce gracias al acondicionamiento de la corriente de hidrógeno donde la eficiencia del equipo isentrópico (TURB-02) es de 0.72.

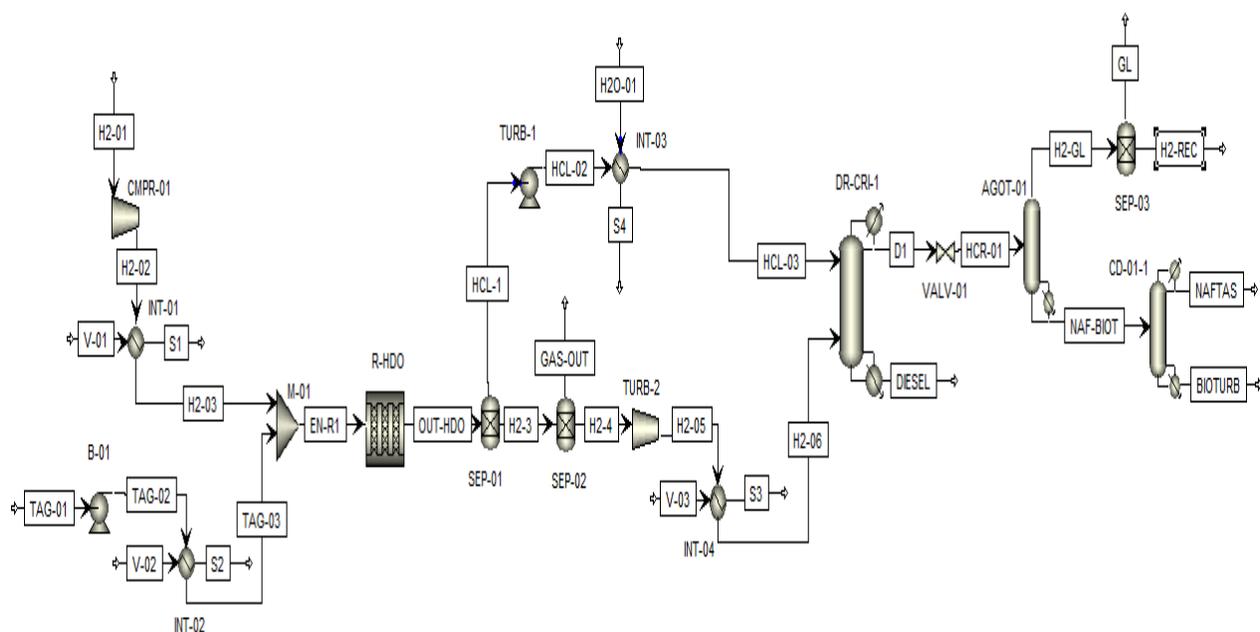


Figura 19. Diagrama del proceso de hidrot ratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 1

Tabla 16. Equipos auxiliares de acondicionamiento de corrientes de entrada a columna reactiva. Escenario 1

	Bomba (TURB-1)	Turbina (TURB-2)		Enfriador (INT-03)	Calentador (INT-04)
Potencia de freno (hp)	-0.117	-12.28	Temperatura de entrada (°C)	341.82	158.7
Electricidad (kW)	0.087	9.155	Temperatura de salida (°C)	230	480
Eficiencia	0.296	0.72	Fracción de vapor	0	1
Presión descarga (bar)	11	12	Carga térmica (kW)	8.04	15.78

Mientras que en la Tabla 17 se aprecian las condiciones de las corrientes que ingresan a la columna reactiva. Las condiciones de operación de la columna CR-CRI-1 fueron presentadas en la Tabla 15.

Tabla 17. Condiciones de las corrientes de entrada a la columna reactiva. Escenario 1

	Corriente HCL-03	Corriente H2-06
Flujo molar (Kmol/h)	0.305	6.024
Flujo másico (Kg/h)	84.56	12.14
Temperatura (°C)	230	480
Presión (bar)	11	12
Fracción de vapor	0	1

En la Figura 20 se muestran los perfiles de composición de la columna reactiva; los perfiles dependen tanto de las reacciones que se llevan a cabo en la fase líquida como del efecto de la transferencia de masa entre fases (equilibrio líquido-vapor). También es posible observar como los hidrocarburos en el rango del diésel verde (C17, C18 y C21) se concentran hacia las últimas etapas (en la zona de agotamiento) pues estos son recuperados por el flujo de fondos; mientras que los hidrocarburos en el rango de los gases ligeros, naftas y bioturbosina se concentran hacia las primeras etapas.

En la Figura 21 se presenta el perfil de temperaturas a lo largo de la columna, donde se observa que en las etapas reactivas se tiene un rango de temperatura entre 430 °C-470 °C, aproximadamente. Estas temperaturas se mantienen cercanas a la temperatura del reactor convencional, que es de 480 °C. La temperatura dentro de la zona reactiva tiene un efecto directo sobre el avance de la reacción y la distribución de los productos.

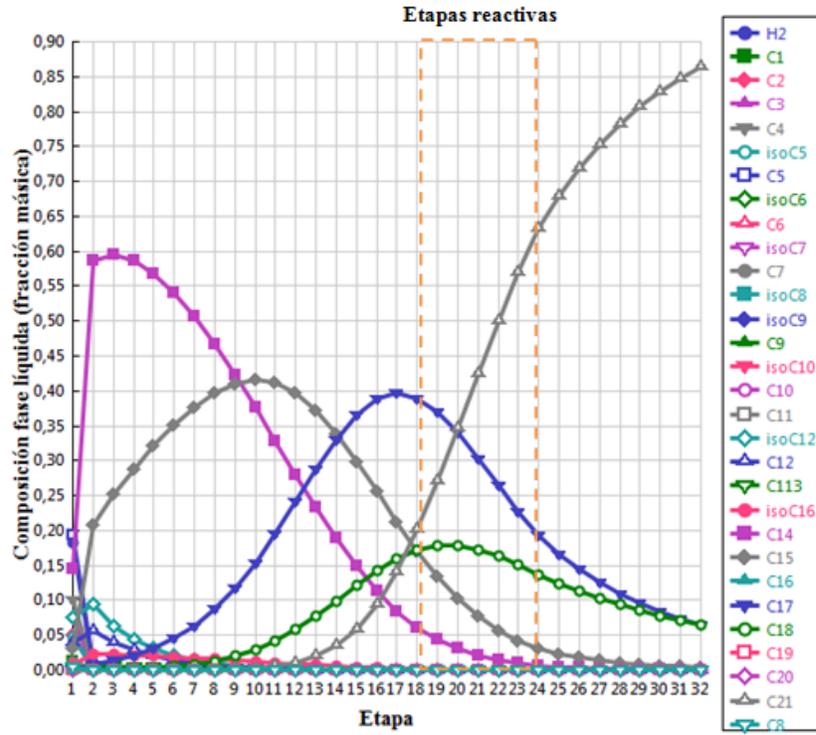


Figura 20. Perfil de composición de la fase líquida de la columna reactiva CR-CRI-1. Escenario 1

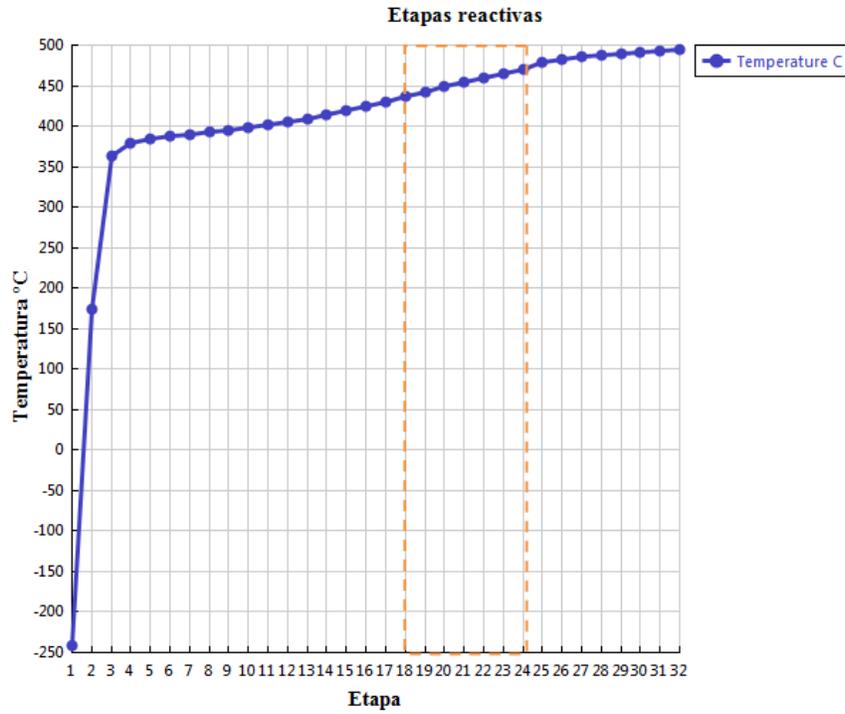


Figura 21. Perfil de temperatura de columna CR-CRI-1. Escenario 1

La Figura 22 muestra el avance de las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización que se llevan a cabo en la columna CR-CRI-1. Se observa el consumo de los componentes H₂, C19 y C20 que son los reactivos en las reacciones de hidrocrqueo; también se observa que la velocidad de consumo de hidrógeno empieza a incrementarse en las primeras etapas reactivas, llegando a un máximo aproximado de 0.32 kmol/h en la etapa 18, y luego disminuye gradualmente a lo largo de las etapas reactivas restantes. Respecto a las reacciones de hidroisomerización, la mayor velocidad de generación se alcanza para el componente isoC5 con 0.017 kmol/h, seguido del componente isoC12 con una velocidad de generación de 0.012 kmol/h.

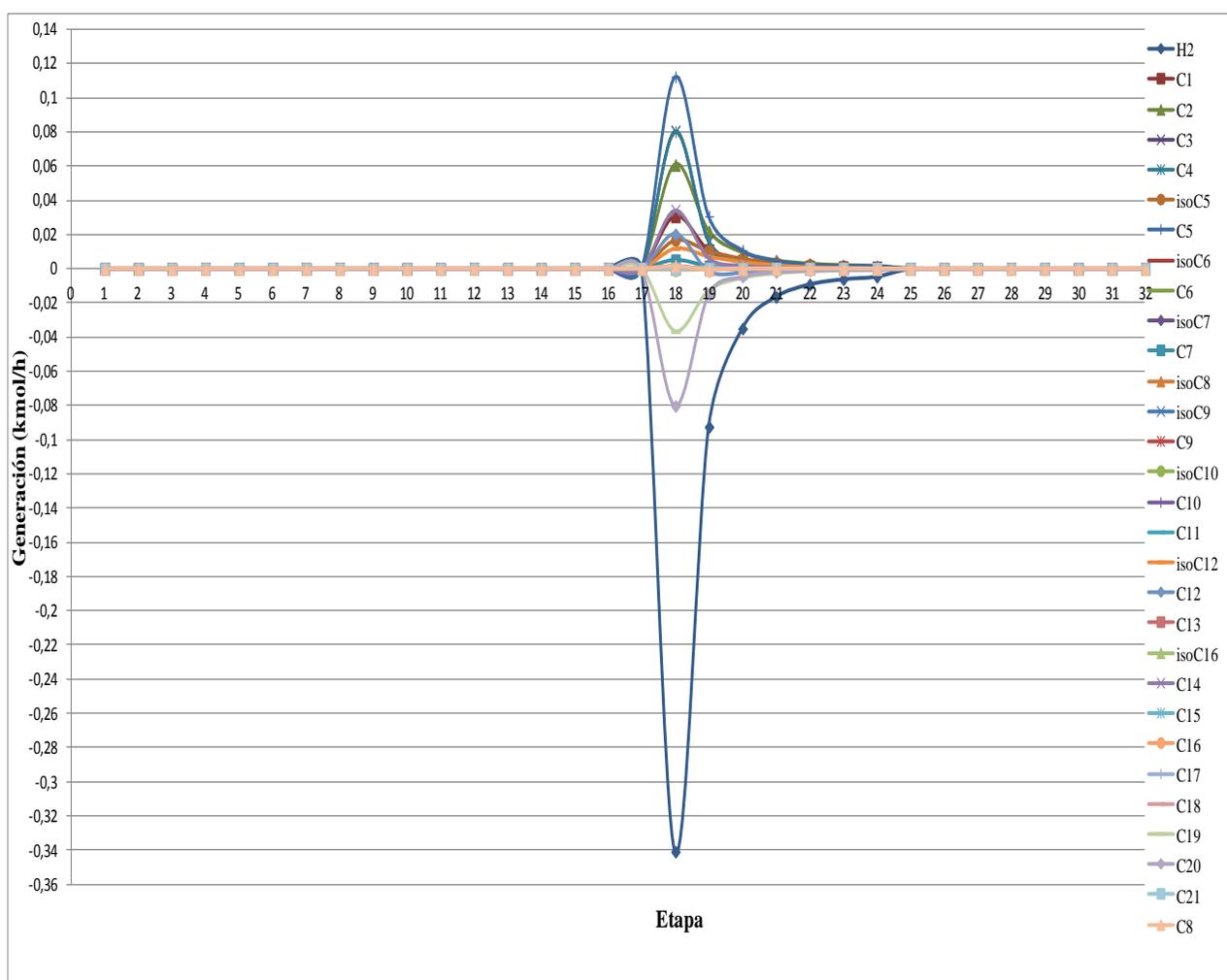


Figura 22. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-1. Escenario 1

En la Tabla 18 se observa que el rendimiento hacia los hidrocarburos en el rango de la bioturbosina es de 19.20 %, aproximadamente. Este resultado es 3.1 % mayor que el

reportado para el proceso convencional, lo cual es un beneficio obtenido de la intensificación del proceso; el rendimiento hacia diésel verde y gases ligeros es prácticamente el mismo que para el proceso convencional.

En el flujo de destilado (corriente D1) de la columna reactiva CR-CRI-1 se obtiene hidrógeno, gases ligeros, naftas y bioturbosina; esta corriente tiene una presión de 10 bar tal como se muestra en la Tabla 19, y se requiere acondicionarla a una presión de 4.17 bar previo a su ingreso a la separación de los productos y a la extracción del hidrógeno. Se utiliza una válvula de alivio de presión (VALV-01).

Tabla 18. Composición de flujos de salida y rendimientos de columna reactiva CR-CRI-1. Escenario 1

Componente	Fracción másica	Flujo Másico (kg/h)	Producto	Flujo másico total (kg/h)	Alimentación aceite (kg/h)	%Rendimiento
C1	0.01349	0.825	Gases ligeros	14.676	100	14.676
C2	0.05056	3.092				
C3	0.07585	4.639				
C4	0.10006	6.120				
ISOC5	4.93E-02	3.015	Naftas	15.943		15.943
C5	1.94E-01	11.859				
ISOC6	6.76E-05	0.004				
C6	3.73E-04	0.023				
ISOC7	0.00467	0.285				
C7	1.24E-02	0.756				
ISOC8	1.11E-03	0.068				
C8	1.35E-03	0.083	Bioturbosina	19.196		19.196
ISOC9	4.75E-04	0.029				
C9	1.33E-03	0.081				
ISOC10	1.85E-03	0.113				
C10	3.49E-03	0.214				
C11	2.20E-03	0.134				
ISOC12	0.07549	4.617				
C12	0.04075	2.492				
C13	2.59E-03	0.159				
ISOC16	7.52E-03	0.460				
C14	0.14480	8.856	Diésel verde	35.348	35.348	
C15	0.03090	1.890				
C16	2.11E-07	1.29E-05				
C17	0.06483	2.304				
C18	0.06525	2.319				
C19	2.06E-05	7.33E-04				
C20	1.09E-05	3.86E-04				
C21	0.86438	30.724				

Tabla 19. Características de las corrientes de salida columna CR-CRI-1. Escenario 1

	Flujo de destilado (D1)	Flujo de fondos (DIÉSEL)
Flujo molar (kmol/h)	6.21	0.123
Flujo másico (kg/h)	61.16	35.54
Temperatura (°C)	-240.75	494.41
Presión (bar)	10	10.69
Fracción de vapor	0	0

En la Tabla 20 se muestran las características de la corriente de destilado acondicionada (corriente HCR-01); dicha corriente es la que se alimenta al tren de separación, específicamente a la columna AGOT-1. En esta Tabla también se puede observar que el cambio de presión provocó que la fracción de vapor alcanzara el valor de 0.152.

Tabla 20. Condiciones de la corriente de entrada a la zona de separación. Escenario 1

	Corriente HCR-01
Flujo molar (Kmol/h)	6.21
Flujo másico (Kg/h)	61.16
Temperatura (°C)	-244.73
Presión (bar)	4.17
Fracción de vapor	0.152

Las características de las columnas que conforman el tren de destilación para el escenario 1 se muestran en la Tabla 21. La primera columna (AGOT-01) separa al hidrógeno y gases ligeros por la corriente de destilado (H2-GL), mientras que la mezcla naftas-bioturbosina (corriente NAFT-BIOT) es recuperada por fondos. Se destaca que al ser una columna que opera sin condensador permite reducir los costos de servicios al prescindir del uso de refrigerante; la recuperación de los productos clave es 0.998. En la columna dos (CD-01-1) se recuperan las naftas (recuperación del 99 %), mientras que la bioturbosina se recupera por fondos (99 %).

De la Tabla 21 también se observa que el diámetro de las columnas es similar al obtenido en el tren de separación convencional (valores entre 0.05 y 0.07 m), y consistente con la base de cálculo considerada, siendo de 0.107 m para la columna 1 y 0.055 m para la columna 2. También de la Tabla se aprecia que las columnas tienen un número menor de

etapas para este escenario, en comparación con el proceso convencional; teniendo que el mayor número de etapas en éste es de 47 (columna 2) mientras que en el proceso convencional, la columna del tren de separación con mayor número de etapas cuenta con 65 en total. De igual manera, la columna 1 tiene tan sólo 15 etapas totales, mientras que la columna de menor tamaño del proceso convencional requiere 17 etapas. Ello implica que se tienen columnas de menor tamaño en el escenario 1, y equipos de menor tamaño repercuten en menores costos asociados a inversión de capital.

Tabla 21. Características de la secuencia de separación. Escenario 1

	Columna 1 (AGOT-01)	Columna 2 (CD-01-1)
Número de etapas totales	15	47
Tipo de condensador	Sin condensador	Total
Flujo de destilado (Kmol/h)	5.89	0.214
Relación de reflujo (RR)	-	0.417
Presión del domo (bar)	4.17	4.51
Etapas de alimentación	1	24
Diámetro (m)	0.107	0.055
Flujo de fondos (Kmol/h)	0.32	0.10
Carga térmica (kW)	20.86	4.89
Recuperación del producto	0.998	0.999

Recapitulando, en el escenario 1 el número de equipos requeridos tanto para acondicionamiento de corrientes como para reacción y separación es 16 (Tabla 22). Los equipos principales del proceso son el reactor de hidrodesoxigenación (R-HDO), la columna de destilación reactiva (DR-CRI-1) y las dos columnas de destilación convencionales (AGOT-01 y CD-01-1); así se tienen 4 equipos en total, en lugar de los 5 equipos resultantes para el proceso convencional en el escenario base. Esto es resultado de la intensificación del proceso que permite obtener un proceso más compacto. El rendimiento del escenario 1 hacia los hidrocarburos en el rango de la bioturbosina es 3.1 % por encima del rendimiento obtenido en el proceso convencional.

Tabla 22. Resumen de equipos de proceso. Escenario 1

No. Equipo	Clave	Descripción	Energía (kW)	Eficiencia
1	CMPR-01	Compresor de corriente entrada de hidrógeno	1.78	0.72
2	INT-01	Calentador de corriente entrada de hidrógeno	28.31	N/A
3	B-01	Bomba de corriente entrada de aceite	3.33	0.2957
4	INT-02	Calentador de corriente entrada de aceite	14.02	N/A
5	M-01	Mezclador de corrientes antes de R-HDO	N/A	N/A
6	R-HDO	Reactor/Hidrodesoxigenación	-46.05	N/A
7	SEP-01	Separador de la corriente de hidrocarburos	-1.88	N/A
8	SEP-02	Separador de CO, CO ₂ y H ₂ O del H ₂	-0.07	N/A
9	TURB-1	Acondiciona hidrocarburos entrada a columna CR	-0.09	0.296
10	TURB-2	Acondiciona hidrógeno entrada a columna CR	-9.16	0.72
11	INT-03	Enfriador/acondiciona flujo hidrocarburos entrada a CR	-8.04	N/A
12	INT-04	Calentador/acondiciona flujo hidrógeno entrada a CR	15.78	N/A
13	SEP-03	Separador/ Extraer hidrógeno de corriente HCR-01	-1.55	N/A
14	CR-CRI-1	Condensador parcial-vapor	-1509.31	N/A
		Rehervidor	1461.24	N/A
15	AGOT-01	Condensador parcial-vapor	0.00	N/A
		Rehervidor	20.86	N/A
16	CD-01-1	Condensador	-1.97	N/A
		Rehervidor	4.89	N/A

	Equipos de reacción		Equipos de separación
	Equipos de reacción-separación		Equipos auxiliares

Ahora bien, la demanda de energía térmica global considerando: 1) servicios de calentamiento de todo el escenario (58.11 kW) y 2) carga térmica de los rehervidores de todas las columnas, incluyendo la columna reactiva (1,486.99 kW) es de 1,545.10 kW. Mientras que la cantidad de energía que es liberada o removida tomando en cuenta: 1) el reactor de hidrodesoxigenación (-46.05 kW), 2) servicios de enfriamiento requeridos en todo el proceso (-8.04 kW) y 3) condensadores de todas las columnas del escenario, incluyendo la columna reactiva (- 1,511.29 kW) es de - 1,565.37 kW. Es decir, que si la energía fuese apropiadamente integrada en una red de intercambio para su aprovechamiento, potencialmente se podría satisfacer la demanda energética del proceso. Este excedente resulta particularmente de la energía que es extraída del condensador de la

columna reactiva; ello significa que esta energía debe provenir de las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización que se llevan a cabo dentro de la columna. De acuerdo con Ancheyta (2011) la isomerización de las parafinas es catalogada como una reacción “levemente” exotérmica mientras que la reacción de hidrocrqueo se describe como exotérmica. Otros autores que han desarrollado trabajos experimentales también han reportado que las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización son de naturaleza exotérmica (Montesdeoca, 2013; Fan et al., 2014).

4.5.4 Escenario 2

El escenario 2 corresponde al proceso de hidrotratamiento intensificado que incluye la columna de destilación reactiva CR-CRI-2, y es presentado en la Figura 23. La corriente de salida del primer reactor (R-HDO) se separa en hidrocarburos de cadena lineal (corriente HCL-01) e hidrógeno (corriente H2-04), dado que la etapa de alimentación de cada uno es distinta.

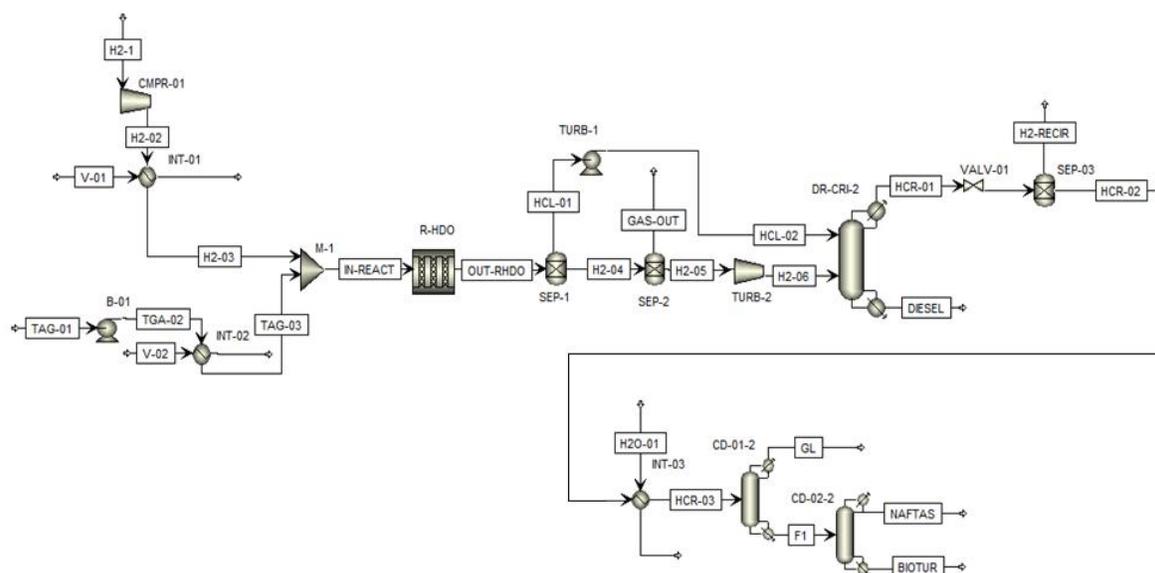


Figura 23. Diagrama de proceso de hidrotratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 2

Al igual que en el escenario uno no es factible el ingreso ambas corrientes en la misma etapa, dado las características físicas de los hidrocarburos (corriente líquida) y el hidrógeno (en fase gaseosa). Así, los hidrocarburos lineales se alimentan en la primera

etapa reactiva (etapa 11), mientras que el hidrógeno ingresa en la última etapa reactiva (etapa 17).

Para realizar esta separación de las corrientes se utiliza el módulo SEP que corresponde a un equipo virtual; en la práctica este separador podría ser una válvula de separación de hidrógeno con una membrana que se puede adaptar a la configuración del reactor. Por lo anterior, este equipo no es considerado en el análisis económico. El separador 1 (SEP-01) permite generar dos corrientes: los hidrocarburos lineales (corriente HCL-01), y una corriente que arrastra CO, CO₂, vapor de agua e hidrógeno (corriente H2-04). El hidrógeno de la corriente H2-04 se ingresa a la columna reactiva, previa separación (SEP-02) del vapor de agua y los óxidos de carbono. Las consideraciones para el SEP-02 son las mismas que para el SEP-01; en este caso, esta separación se puede lograr mediante válvulas y/o membranas.

La presión de operación del reactor de hidrotratamiento (R-HDO) es 80 bar, mientras que la columna CR-CRI-2 opera a 10 bar; por lo que es necesario acondicionar las corrientes de entrada. Para ello se modelan dos turbinas (TURB-1 y TURB-2). En la Tabla 23 se muestran los resultados y condiciones de operación de las turbinas, donde se observa que la cantidad de electricidad que se produce es 8.94 kW; esto supera en 2.4 veces la cantidad producida en el proceso convencional de hidrotratamiento (3.66 kW). De esta energía, la mayor cantidad es producida gracias al acondicionamiento de la corriente de hidrógeno (TURB-2), equipo con una eficiencia del 0.72 tal como se aprecia en la Tabla 23. Asimismo, cabe señalar que esta electricidad se utiliza para abastecer los requerimientos internos del proceso.

Tabla 23. Equipos auxiliares y características de las corrientes de entrada a la columna reactiva. Escenario 2

	Bomba (TURB-1)	Turbina (TURB-2)		Corriente (HCL-02)	Corriente (H2-06)
Potencia de freno (hp)	-0.118	-10.82	Flujo molar (kmol/h)	0.305	6.024
Electricidad (kW)	0.088	8.076	Flujo másico (kg/h)	84.56	12.14
Eficiencia	0.296	0.72	Temperatura (°C)	341.81	180.66
Presión descarga (bar)	10.5	16	Presión (bar)	10.5	16
Temperatura descarga (°C)	341.81	180.66	Fracción de vapor	0	1

Las condiciones de operación de la columna CR-CRI-2 fueron presentadas en la Tabla 15. En la columna CR-CRI-2 se llevan a cabo las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización, y por el flujo de fondos de la columna se obtiene diésel verde con una recuperación del componente clave pesado (C17) del 95 %. Mientras que por el flujo de destilado (corriente HCR-01) se obtienen gases ligeros, naftas y bioturbosina, con una recuperación del producto clave ligero (C16) del 94 %, y el hidrógeno que no reaccionó.

En la Figura 24 se muestra el perfil de composición másica de la columna de destilación reactiva; se observa que, en la fase líquida, los hidrocarburos en el rango del diésel verde representan la mayor fracción másica en las últimas etapas de la columna reactiva, dado que son recuperados por flujo de fondos. La mayor fracción másica en las primeras etapas corresponde a los hidrocarburos en el rango de la bioturbosina (C14, C15 e isoC12).

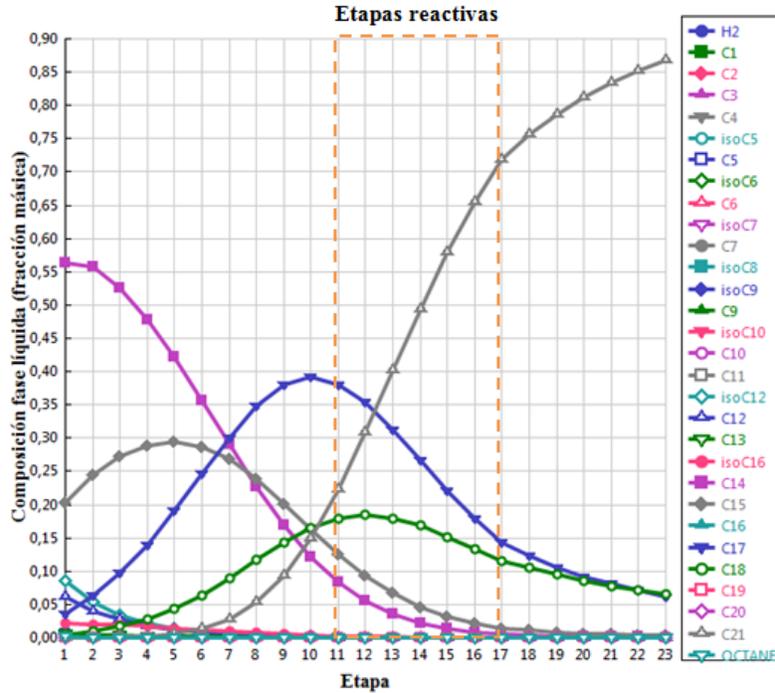


Figura 24. Perfil de composición de la fase líquida de la columna reactiva CR-CRI-2. Escenario 2

En la Figura 25 se muestra el perfil de temperatura de la columna CR-CRI-2. De ésta se puede apreciar que el rango de temperatura de la zona reactiva está entre 425-460 °C, temperatura cercana a la que opera el reactor convencional. Por consiguiente, se obtiene un rendimiento hacia los productos similar al reportado para el reactor convencional del escenario base. Mientras que en la Figura 26 muestra el avance de las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización. La velocidad de consumo de hidrógeno llega a un máximo aproximado de 0.38 kmol/h en la etapa 11, y luego disminuye a lo largo de las etapas reactivas restantes. Este consumo de hidrógeno es el requerido para las reacciones de hidrocrqueo específicamente, pues en las reacciones de hidroisomerización no se requiere. Respecto a estas reacciones, de la Figura 26 se aprecia que la mayor velocidad de generación para los componentes isomerizados la alcanza el isoC12 con 0.012 kmol/h.

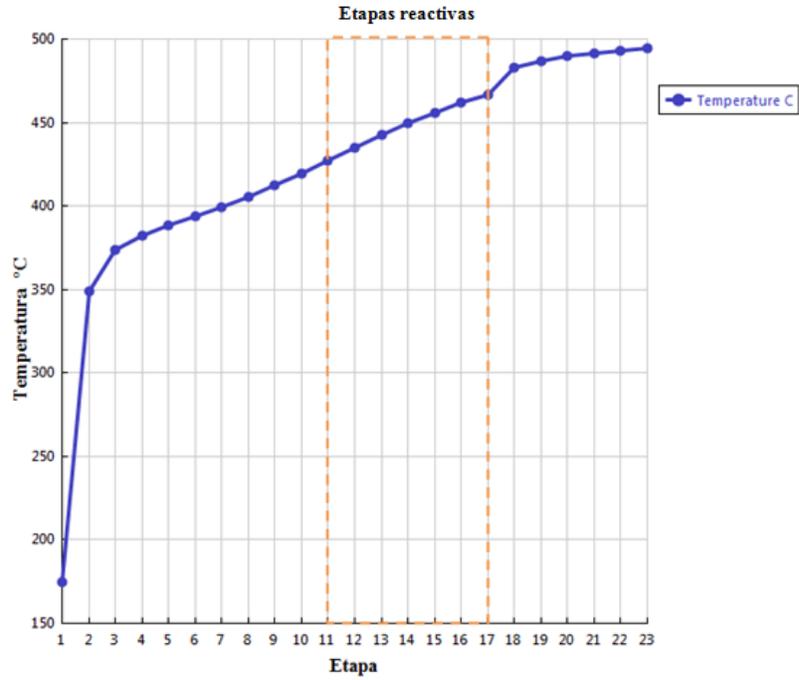


Figura 25. Perfil de temperatura de columna CR-CRI-2. Escenario 2

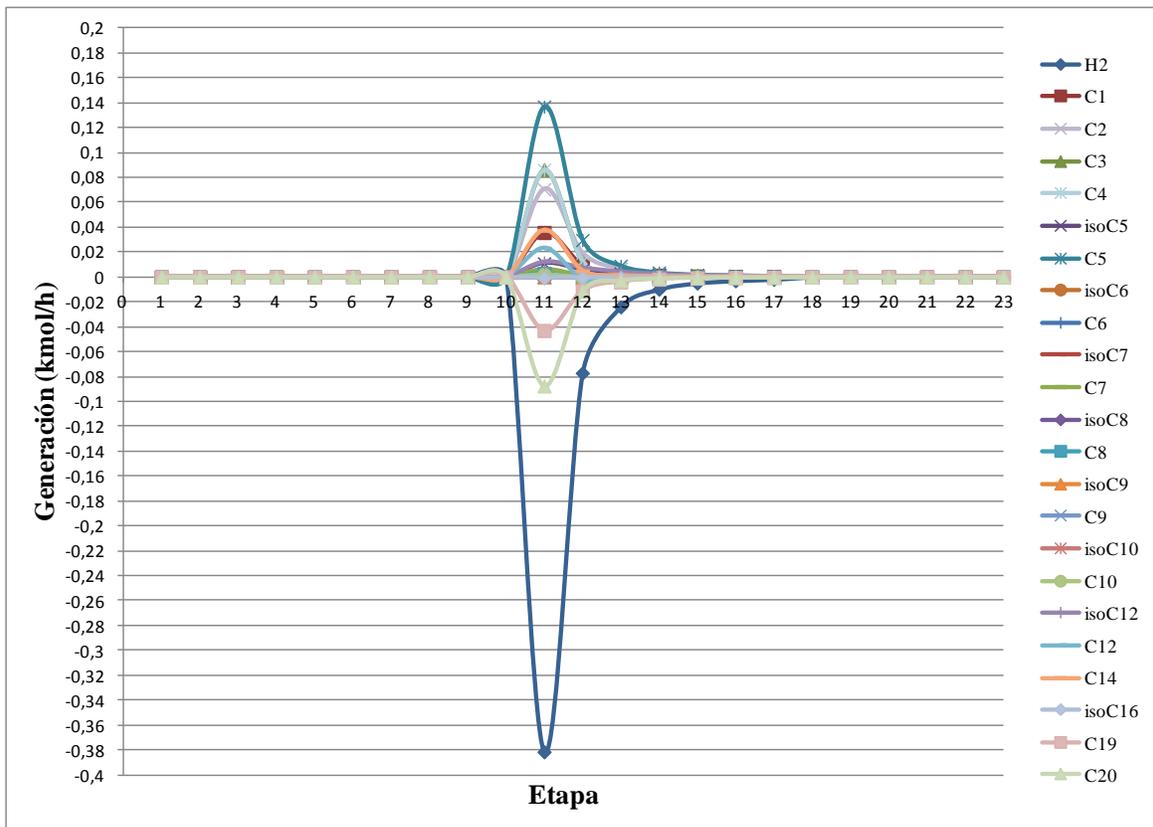


Figura 26. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-02. Escenario 2

Se puede observar de la Tabla 24 que los rendimientos de la columna de destilación reactiva son similares a los que se obtienen en el reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización del proceso convencional. Se logra un rendimiento hacia los hidrocarburos en el rango de la bioturbosina de 19.614 %; 5.34 % superior al del escenario base. Los rendimientos hacia los otros productos se mantienen similares.

Tabla 24. Composición de flujos de salida y rendimientos de la columna reactiva CR-CRI-2. Escenario 2

Componente	Fracción másica	Flujo Másico (kg/h)	Producto	Flujo másico total (kg/h)	Alimentación aceite (kg/h)	%Rendimiento
C1	0.01342	0.823	Gases ligeros	14.504	100	14.504
C2	0.05021	3.078				
C3	0.07459	4.572				
C4	0.09839	6.031				
ISOC5	0.02688	1.648	Naftas	15.914		15.914
C5	0.21506	13.182				
ISOC6	4.05E-05	0.002				
C6	3.99E-04	0.024				
ISOC7	0.00278	0.170				
C7	0.01448	0.887				
ISOC8	8.26E-04	0.051				
C8	6.11E-03	0.375				
ISOC9	3.16E-04	0.019				
C9	1.48E-03	0.091				
ISOC10	1.38E-03	0.084				
C10	4.85E-03	0.297				
C11	2.19E-03	0.134				
ISOC12	0.07092	4.347				
C12	0.04548	2.788				
C13	2.59E-03	0.159				
ISOC16	7.49E-03	0.459	Diésel verde	35.244		35.244
C14	0.14484	8.878				
C15	0.03151	1.932				
C16	2.07E-06	1.27E-04				
C17	0.06237	2.208				
C18	0.06526	2.311				
C19	2.66E-05	9.42E-04				
C20	1.23E-05	4.36E-04				
C21	0.86770	30.723				

En la columna CR-CRI-2 el diésel verde se obtiene por el flujo de fondos, mientras que en el flujo de destilado (corriente HCR-01) se obtiene hidrógeno, gases ligeros, naftas y bioturbosina; esta corriente tiene una presión de 10 bar, tal como se muestra en la Tabla 25.

Posterior a la columna reactiva, mediante una válvula de alivio de presión (VALV-01) se logra acondicionar la corriente de destilado (corriente HCR-01) a 1.36 bar. Para modelar la separación del hidrógeno se utiliza el módulo SEP (SEP-03), con lo que el hidrógeno removido se puede acondicionar para su recirculación al proceso. Aunque este acondicionamiento no es considerado en el presente trabajo.

Tabla 25. Características de las corrientes de salida de la columna reactiva CR-CRI-2. Escenario 2

	Corriente de destilado (HCR-01)	Corriente de fondos (DIÉSEL)
Flujo molar (kmol/h)	6.21	0.122
Flujo másico (kg/h)	61.3	35.41
Temperatura (°C)	174.7	494.67
Presión (bar)	10	10.69
Fracción de vapor	1	0

De la Tabla 25 también se observa que la fracción de vapor de la corriente de destilado es 1, aspecto que no favorece la separación de estos productos, por lo que como se mencionó es necesario acondicionarla. Así que, además del cambio de presión mediante la válvula se utiliza un equipo enfriador (INT-03), para el acondicionamiento de los gases ligeros, naftas y bioturbosina (corriente HCR-02) hasta una temperatura de 27.22 °C. En la Tabla 26 se muestran las principales características del enfriador así como las condiciones de la corriente de entrada (HCR-03) a la zona de separación. Se observa un cambio en la fracción de vapor de la corriente de 1 a 0.625. Se retira una cantidad de energía de 6.7 kW mediante un enfriador para lograr el cambio de temperatura deseado.

Tabla 26. Acondicionamiento de la corriente de entrada a la zona de separación. Escenario 2

	Enfriador (INT-03)		Corriente HCR-03
Temperatura de entrada (°C)	174.46	Flujo molar (Kmol/h)	0.685
Temperatura de salida (°C)	27.22	Flujo másico (Kg/h)	50.16
Fracción de vapor flujo entrada	0.972	Temperatura (°C)	27.22
Carga térmica (kW)	6.7	Presión (bar)	1.36
		Fracción de vapor	0.625

La corriente de hidrocarburos renovables acondicionada (corriente HCR-03) ingresa a una zona de separación conformada por una secuencia convencional directa. Las características de dichas columnas se muestran en la Tabla 27. De esta Tabla se observa que en la columna CD-01-2 se obtienen los gases ligeros por el destilado (recuperación del 99 %). Mientras que en la segunda columna (CD-02-2) las naftas y la bioturbosina se obtienen por el flujo de destilado y fondos, respectivamente; siendo las recuperaciones de los productos clave 99 %. En esta Tabla también se presentan los diámetros de las columnas,

éstos son consistentes con los escenarios anteriores. Las relaciones de reflujo así como las cargas térmicas de las columnas son similares a las correspondientes al proceso convencional.

Respecto al número de etapas totales para esta secuencia de separación, la columna que requiere más es la CD-02-2; sin embargo, son cinco etapas menos que para la columna 2 del escenario 1. De igual manera, la columna 1 tiene tan sólo 15 etapas totales, mientras que la columna de menor tamaño del proceso convencional requiere 17 etapas. Ello implica que se tienen columnas de menor tamaño en el escenario 2, con menores costos asociados a inversión de capital.

Una vez expuesto el escenario 2 completo, se observa en la Tabla 28 que el número de equipos requeridos para acondicionamiento de corrientes, reacción y separación es 15. De éstos, los equipos centrales del proceso son el reactor de hidrogenación (R-HDO), la columna de destilación reactiva (DR-CRI-2) y las dos columnas de destilación convencionales en secuencia directa (CD-01-2 y CD-02-2) sumando 4 equipos en total; en lugar de los 5 equipos resultantes para el proceso convencional en el escenario base. Esta reducción en el número de equipos principales es resultado de la intensificación del proceso mediante la destilación reactiva. Este proceso permite un rendimiento hacia bioturbosina 5.34% por encima del alcanzado en el proceso convencional, y un 2.18 % por encima del rendimiento en el escenario 1 para este mismo producto.

Tabla 27. Características de la secuencia de separación. Escenario 2

	Columna 1 (CD-01-2)	Columna 2 (CD-02-2)
Número de etapas totales	15	42
Tipo de condensador	Parcial-Vapor	Total
Flujo de destilado (Kmol/h)	0.36027985	0.217139
Relación de reflujo (RR)	1.46283	0.379406
Presión del domo (bar)	1.01362	1.35827
Etapas de alimentación	8	21
Díámetro (m)	0.068248	0.05316
Flujo de fondos (Kmol/h)	0.3245122	0.1073732
Carga térmica (kW)	3.5373	4.71437
Recuperación del producto	0.99164	0.991

Tabla 28. Resumen de equipos de proceso. Escenario 2

No. Equipo	Clave	Descripción	Energía (kW)	Eficiencia
1	CMPR-01	Compresor de corriente entrada de hidrógeno	1.785	0.72
2	INT-01	Calentador de corriente entrada de hidrógeno	28.31	N/A
3	B-01	Bomba de corriente entrada de aceite	3.33	0.2957
4	INT-02	Calentador de corriente entrada de aceite	14.023	N/A
5	M-01	Mezclador de corrientes antes de R-HDO	N/A	N/A
6	R-HDO	Reactor/Hidrodesoxigenación	-46.051	N/A
7	SEP-01	Separador de corriente de hidrocarburos y gases e H ₂	-1.88	N/A
8	SEP-02	Separador de CO, CO ₂ y H ₂ O del hidrógeno	-0.071	N/A
9	TURB-1	Acondiciona hidrocarburos entrada a columna CR	-0.081	0.2957
10	TURB-2	Acondiciona hidrógeno entrada a columna CR	-8.071	0.72
11	SEP-03	Separador/ Extraer hidrógeno de corriente HCR-01	-0.306	N/A
12	INT-03	Enfriador/Acondicionar corriente entrada a separación	-6.7	N/A
13	CR-CRI-2	Condensador parcial-vapor	-550.67	N/A
		Rehervidor	546.2	N/A
14	CD-01	Condensador parcial-vapor	-3.58	N/A
		Rehervidor	3.54	N/A
15	CD-02	Condensador	-2.22	N/A
		Rehervidor	4.715	N/A

	Equipos de reacción		Equipos de separación
	Equipos de reacción-separación		Equipos auxiliares

La demanda de energía térmica global considerando: 1) servicios de calentamiento de todo el escenario (42.33 kW) y 2) carga térmica de los rehervidores de todas las columnas, incluyendo la columna reactiva (554.45 kW) es de 596.78 kW. Mientras que la cantidad de energía que es liberada o removida tomando en cuenta: 1) el reactor de hidrodesoxigenación (-46.05 kW), 2) servicios de enfriamiento requeridos en todo el proceso (-6.7 kW) y 3) condensadores de todas las columnas del escenario, incluyendo la columna reactiva (- 556.47 kW) es de - 609.22 kW. Es decir, una diferencia de 10.42 kW. Este excedente resulta de la energía que es extraída del condensador de la columna reactiva; ello significa que esta energía debe provenir de las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización que se llevan a cabo dentro de la columna.

se utiliza para satisfacer los requerimientos internos del proceso e incluso se obtiene un excedente de energía. Se aprecia que la turbina para el acondicionamiento de la corriente de hidrógeno es el equipo que genera prácticamente toda esta energía.

En la columna DR-CRI-3, cuyas características se muestran en la Tabla 15, se verifican las reacciones de hidrocraqueo e hidroisomerización; por el flujo de fondos de la columna (corriente F1) se obtiene bioturbosina y el diésel verde, con una recuperación del componente clave pesado (isoC8) del 1 %. La recuperación de este componente es muy baja; sin embargo su flujo másico también lo es, 2.01E-07 kmol/h (Ver Tabla 30); por lo que una mayor recuperación de este componente significaba incrementar el consumo energético y/o el número de etapas de manera significativa.

Tabla 29. Equipos auxiliares en el acondicionamiento de las corrientes de entrada a columna reactiva. Escenario 3

	Bomba (TURB-1)	Turbina (TURB-2)		Corriente HCL-02	Corriente H2-06
Potencia de freno (hp)	- 0.118	-12.48	Flujo molar (kmol/h)	0.305	6.024
Electricidad (kW)	0.086	9.08	Flujo másico (kg/h)	84.561	12.14
Eficiencia	0.296	0.72	Temperatura (°C)	341.81	155.6
Presión descarga (bar)	10.5	11.5	Presión (bar)	10.5	11.5
Temperatura descarga (°C)	341.81	155.61	Fracción de vapor	0	1

Por otro lado, en el flujo de destilado se obtienen (corriente D1) gases ligeros, naftas y el hidrógeno que no reaccionó, con una recuperación del componente clave ligero (C7) del 99.9 %.

En la Figura 28 se muestra el perfil de composición másica de la columna CR-CRI-3, que se ve influenciado tanto por la cinética de la reacción como por el equilibrio físico. De ésta se observa que, debido a la posición del corte, los hidrocarburos de mayor concentración hacia las últimas etapas se encuentran en el rango tanto del diésel verde (C21, C18 Y C20) como la bioturbosina (isoC12, C14 y C15).

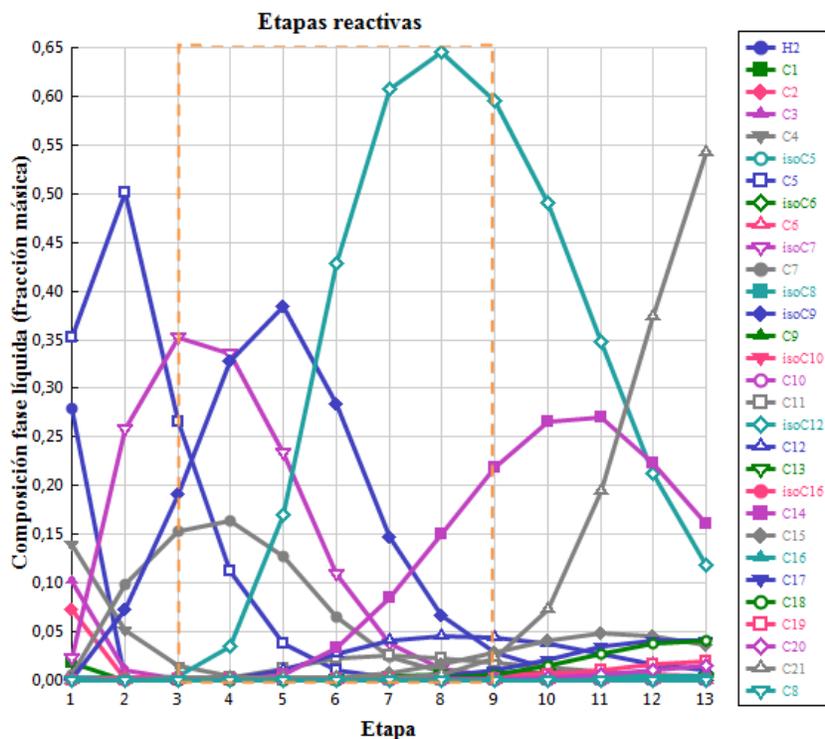


Figura 28. Perfil de composición de la fase líquida de la columna reactiva CR-CRI-3. Escenario 3

En el perfil de temperatura (Figura 29) se observa que en las etapas reactivas la temperatura está en un intervalo de 150-330 °C aproximadamente; dicho rango se encuentra por debajo de la temperatura (480 °C) a la que ocurren las reacciones en el reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización convencional. Ahora bien, como se observa en el avance de reacción presentado en la Figura 30, la velocidad de consumo de hidrógeno máxima se alcanza en la etapa 9 y es de 0.26 kmol/h, lo que significa una velocidad de consumo 32 % menor en comparación con los escenarios anteriores. Incluso, en la Figura 28 se observa que la fracción másica del hidrógeno en las primeras etapas es significativa (0.28) en comparación con la fracción másica de otros componentes; situación que no se observa en los perfiles de de composición de las columnas reactivas presentadas previamente, donde la velocidad de consumo de hidrógeno es mayor.

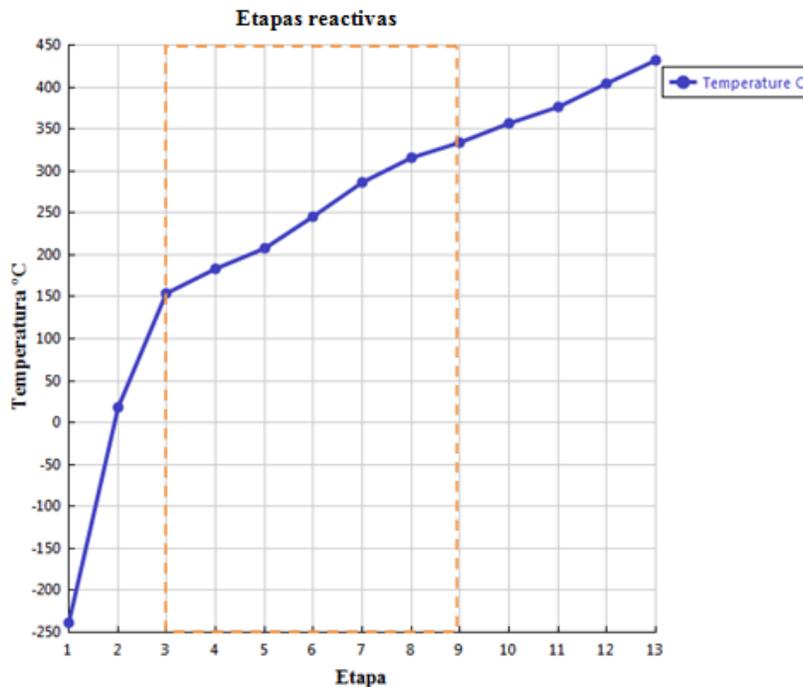


Figura 29. Perfil de temperatura de columna CR-CRI-3. Escenario 3

La etapa 9 es la etapa de mayor temperatura dentro de la zona reactiva, por lo que existe entonces una relación directa entre la temperatura que se verifica en la zona reactiva y el avance en la reacción; a menores temperaturas se tienen menores velocidades de reacción. Por supuesto, esto tiene una repercusión en el rendimiento obtenido de los productos, y es efecto de la dependencia de las constantes cinéticas respecto a la temperatura. Respecto a las reacciones de hidroisomerización se aprecia que la mayor velocidad de generación para los componentes isomerizados la alcanza el isoC12, con una velocidad de generación de 0.026 kmol/h.

En la Tabla 30 se observa que el rendimiento hacia hidrocarburos en el rango de la bioturbosina es del 19.076 %, el cual es tan sólo 2.74 % menor en comparación con el mejor rendimiento que se ha reportado hasta el momento (escenario 2). Sin embargo aunque rendimiento hacia bioturbosina se ve afectado, éste está 2.45 % por encima del obtenido en el proceso convencional. Se destaca que la columna CR-CRI-3 opera a una temperatura y presión por debajo de las condiciones del reactor convencional.

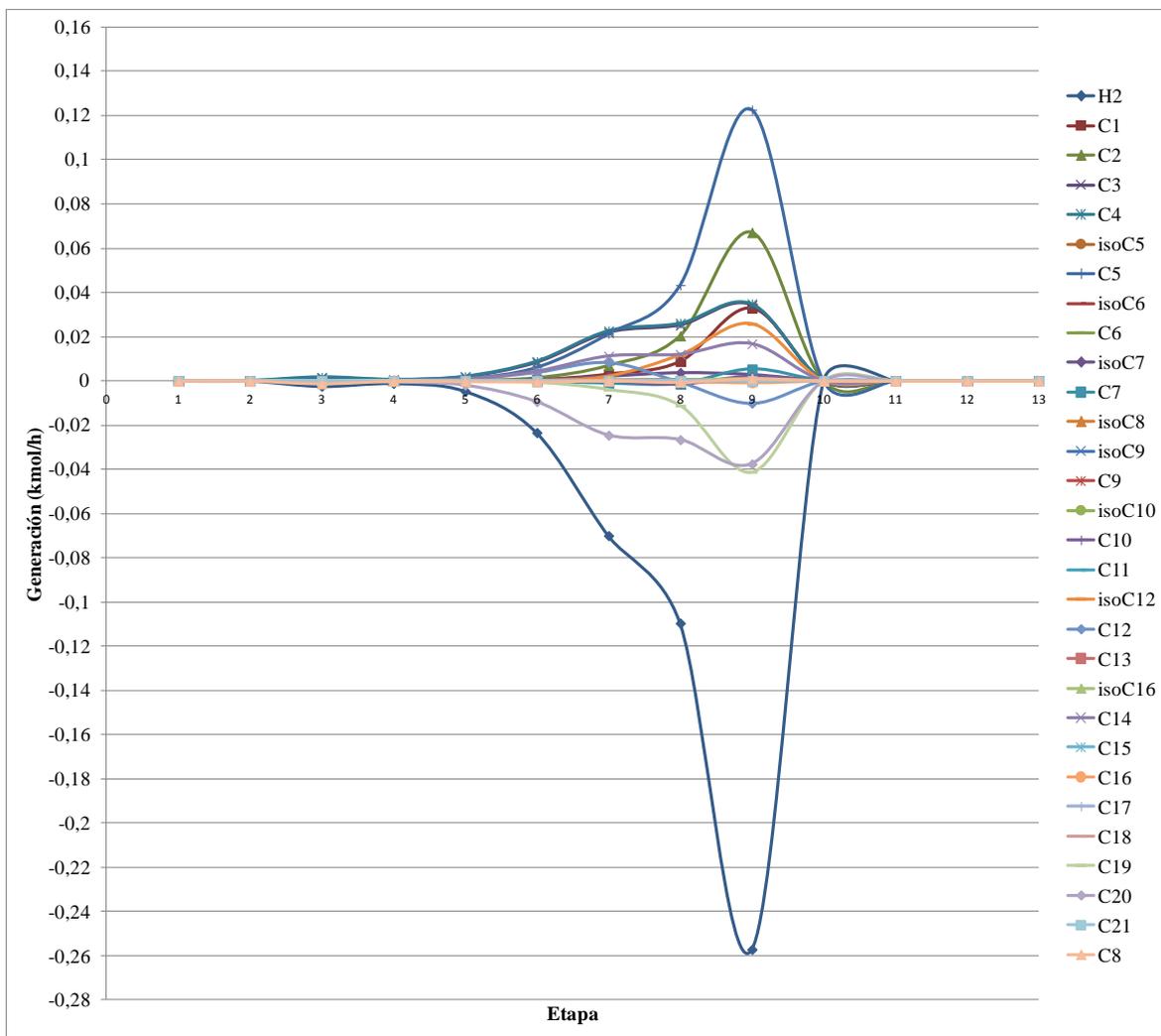


Figura 30. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-3. Escenario 3.

La principal repercusión del cambio en el rango de temperatura alcanzado en la zona reactiva se observa en los gases ligeros y naftas, con rendimientos 6.5 y 8.7 % por debajo de los rendimientos del escenario base, respectivamente. El rendimiento hacia el diésel verde se incrementa alrededor del 5%, con respecto al escenario base, debido a que una menor cantidad de hidrocarburos en el rango de este producto es craqueada.

Tabla 30. Composición de los flujos de salida y rendimientos de la columna reactiva CR-CRI-3. Escenario 3

Componente	Fracción másica	Flujo Másico (kg/h)	Producto	Flujo másico total (kg/h)	Alimentación aceite (kg/h)	%Rendimiento
C1	0.01827	0.732	Gases ligeros	13.340	100	13.340
C2	0.07245	2.903				
C3	0.10227	4.097				
C4	0.13999	5.608				
ISOC5	2.35E-03	0.094	Naftas	15.452		15.452
C5	3.53E-01	14.136				
ISOC6	7.86E-05	0.003				
C6	5.94E-04	0.024				
ISOC7	0.02327	0.932				
C7	6.58E-03	0.264				
ISOC8	2.01E-07	0.000				
C8	7.07E-04	0.040				
ISOC9	1.73E-03	0.098	Bioturbosina	19.076		19.076
C9	1.93E-05	0.001				
ISOC10	3.55E-05	0.002				
C10	1.25E-06	0.000				
C11	2.37E-03	0.134				
ISOC12	0.11891	6.735				
C12	0.01007	0.570				
C13	2.80E-03	0.159				
ISOC16	4.04E-03	0.229				
C14	0.16111	9.126				
C15	0.03090	1.750	Diésel verde	37.351	37.351	
C16	4.10E-03	0.232				
C17	0.04116	2.331				
C18	0.04097	2.320				
C19	2.01E-02	1.140				
C20	1.47E-02	0.835				
C21	0.54241	30.724				

Como se observa en la Tabla 31, las presiones de las corrientes que abandonan la columna reactiva son 10 y 10.69 bar, por lo que previo a su separación ambas corrientes son acondicionadas. Para la corriente del destilado se utiliza una válvula de alivio de presión (VALV-01), con la cual se logra acondicionar la presión de la corriente (corriente D1) hasta 1.36 bar, y un intercambiador de calor (INT-03) que lleva la temperatura de la corriente de -238.7 a 5 °C; condiciones necesarias para lograr posteriormente la separación de los productos y del hidrógeno.

Tabla 31. Características de las corrientes de salida columna CR-CRI-2. Escenario 3

	Flujo de destilado (D1)	Flujo de fondos (F1)
Flujo molar (kmol/h)	6.097	0.232
Flujo másico (kg/h)	40.062	56.64
Temperatura (°C)	-238.7	432.11
Presión (bar)	10	10.69
Fracción de vapor	1	0

Para modelar la separación del hidrógeno se utiliza el módulo SEP (SEP-03). Este separador corresponde a un equipo virtual, ya que en la práctica podría implementarse mediante una válvula o una membrana. Por otro lado, la corriente de fondos (corriente F1) que abandona la columna reactiva se acondiciona mediante una válvula de alivio de presión (VALV-02) que la lleva de 10.6895 bar a 1.71 bar, y mediante un enfriador (INT-04) se acondiciona a una temperatura de 250 °C. Las principales características de los equipos de acondicionamiento así como de las corrientes acondicionadas se muestran en la Tabla 32. La corriente HCR-02 se compone por gases ligeros-naftas, mientras que HCR-04 por bioturbosina-diésel. La fracción de vapor de la corriente HCR-02 pasa de 0 a 0.532. Mientras que la corriente HCR-04 se mantiene en fase líquida (fracción de vapor cero).

Tabla 32. Acondicionamiento de corrientes de entrada a la zona de separación. Escenario 3

	Calentador (INT-03)	Enfriador (INT-04)		Corriente HCR-02	Corriente HCR-04
Temperatura de entrada (°C)	-238.7	384.432	Flujo molar (kmol/h)	0.541	0.232
Temperatura de salida (°C)	4.925	270	Flujo másico (kg/h)	28.86	56.64
Fracción de vapor	0.532	0	Temperatura (°C)	4.92	270
Carga térmica (kW)	5.405	8.73	Presión (bar)	1.8	1.36
			Fracción de vapor	0.532	0

Una vez acondicionadas ambas corrientes se ingresan a las columnas de destilación respectivas. En la columna CD-01-3 se recupera el 99% de los gases ligeros por el destilado, mientras que el 99% de las naftas se recuperan por los fondos. En la columna CD-02-3 se obtiene el 99% de la bioturbosina producida por el flujo de destilado, y el 99% del diésel verde se recupera por el flujo de fondos. En la Tabla 33 se muestran las características de cada columna donde se aprecia que el diámetro de las columnas es similar al obtenido en el tren de separación convencional (valores entre 0.05 y 0.07 m) y consistente con la base de cálculo considerada. La relación de reflujo así como la carga

térmica permanecen similares a los escenarios presentados hasta este punto. El mayor número de etapas totales que presenta una columna de separación en este escenario es 62.

A manera de recapitulación, en el escenario 3 el número de equipos requeridos tanto para acondicionamiento de corrientes como para reacción y separación es 15, como se observa en el resumen de equipos (Tabla 34). Los equipos principales del proceso son el reactor de hidrogenación (R-HDO), la columna de destilación reactiva (DR-CRI-3) y las dos columnas de destilación convencionales (CD-01-3 y CD-02-3); así se tienen 4 equipos en total.

Tabla 33. Características de las columnas de destilación convencionales de zona de separación. Escenario 3

	Columna 1 (CD-01-3)	Columna 2 (CD-02-3)
Número de etapas totales	17	62
Tipo de condensador	Parcial-Vapor	Total
Flujo de destilado (Kmol/h)	0.33	0.102
Relación de reflujo (RR)	1.58	0.89
Presión del domo (bar)	1.014	1.014
Etapas de alimentación	9	32
Diámetro (m)	0.067	0,072
Flujo de fondos (Kmol/h)	0.211	0.13
Carga térmica (kW)	4.01	5.64
Recuperación del producto	0.998	0.999

La demanda de energía térmica global considerando: 1) servicios de calentamiento de todo el escenario (47.73 kW) y 2) carga térmica de los rehervidores de todas las columnas, incluyendo la columna reactiva (827.86 kW) es de 875.59 kW. Mientras que la cantidad de energía que es liberada o removida tomando en cuenta: 1) el reactor de hidrogenación (-46.05 kW), 2) servicios de enfriamiento requeridos en todo el proceso (-8.73 kW) y 3) condensadores de todas las columnas del escenario, incluyendo la columna reactiva (-865.53 kW) es de - 920.31 kW.

Tabla 34. Resumen de equipos de proceso. Escenario 3

No. Equipo	Clave	Descripción	Energía (kW)	Eficiencia
1	CMPR-01	Compresor de corriente entrada de hidrógeno	1.785	0.72
2	INT-01	Calentador de corriente entrada de hidrógeno	28.31	N/A
3	B-01	Bomba de corriente entrada de aceite	3.33	0.296
4	INT-02	Calentador de corriente entrada de aceite	14.02	N/A
5	M-01	Mezclador de corrientes antes de R-HDO	N/A	N/A
6	R-HDO	Reactor/Hidrodesoxigenación	-46.05	N/A
7	SEP-01	Separador de la corriente de hidrocarburos y gases e H ₂	-1.88	N/A
8	SEP-02	Separador de el CO, CO ₂ y H ₂ O del hidrógeno	-0.071	N/A
9	TURB-1	Acondiciona hidrocarburos entrada a columna CR	-0.09	0.296
10	TURB-2	Acondiciona hidrógeno entrada a columna CR	-9.31	0.72
11	INT-03	Calentador/acondicionar corriente entrada a CD-01-3	5.4	N/A
12	INT-04	Enfriador/acondicionar corriente entrada a CD-02-3	-8.73	N/A
13	CR-CRI-3	Condensador total	-853.64	N/A
		Rehervidor	821.4	N/A
14	CD-01-3	Condensador parcial-vapor	-3.55	N/A
		Rehervidor	4.01	N/A
15	CD-02-3	Condensador	-8.35	N/A
		Rehervidor	2.45	N/A

	Equipos de reacción		Equipos de separación
	Equipos de reacción-separación		Equipos auxiliares

Este excedente resulta principalmente de la carga térmica del condensador de la columna reactiva; ello implica que la energía liberada proviene de las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización que se llevan a cabo dentro de la columna.

4.5.6 Escenario 4

El diagrama de proceso (Figura 31) del escenario 4 corresponde al proceso de hidrotratamiento intensificado en el cual el reactor de hidrocrqueo/hidroisomerización es sustituido por una columna de destilación reactiva con un condensador parcial; de esta columna los gases ligeros y las naftas se obtiene por la corriente de destilado, mientras que la bioturbotina y el diésel verde se obtienen por el flujo de fondos.

Debido a que las corrientes de hidrocarburos e hidrógeno deben entrar en distintas etapas de alimentación a la columna reactiva se tienen una serie de equipos auxiliares para su acondicionamiento. Los resultados se muestran en la Tabla 35.

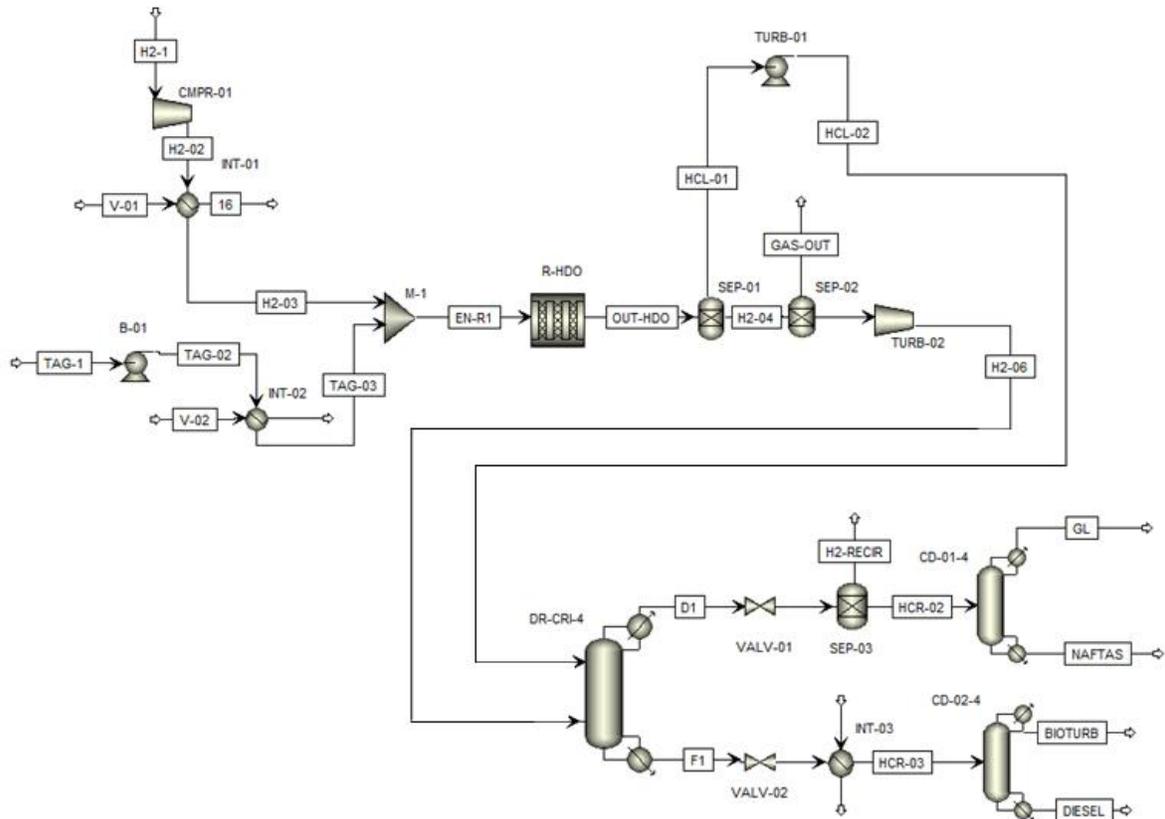


Figura 31. Diagrama del proceso de hidrotratamiento intensificado mediante destilación reactiva. Escenario 4

**Tabla 35. Acondicionamiento de las corrientes de entrada a columna reactiva CR-CRI-4.
Escenario 4**

	Bomba (TURB-1)	Turbina (TURB-2)		Corriente HCL-02	Corriente H2-06
Potencia de freno (hp)	- 0.115	-12.27	Flujo molar (Kmol/h)	0.305	6.024
Electricidad (kW)	0.086	9.155	Flujo másico (Kg/h)	84.56	12.14
Eficiencia	0.296	0.72	Temperatura (°C)	341.841	158.71
Presión descarga (bar)	12	12	Presión (bar)	12	12
Temperatura descarga (°C)	341.84	158.71	Fracción vapor	0	1

En la Tabla 35 se indica la energía que se está generando al acondicionar las corrientes de entrada a la columna reactiva, que es de 9.24 kW; energía suficiente para satisfacer los requerimientos internos del proceso, generada mediante el acondicionamiento de la corriente de hidrógeno.

En la columna CR-CRI-4 se llevan a cabo las reacciones de hidrocrqueo e hidroisomerización; por el flujo de fondos (corriente F1) se obtiene bioturbosina y el diésel verde, con una recuperación del componente clave pesado (isoC8) del 1 %. La recuperación de este componente es muy baja al igual que su flujo, 8.26E-04 kmol/h; por lo que una mayor recuperación de este componente significaba incrementar el consumo energético y/o el número de etapas de manera significativa. Mientras que por el flujo de destilado (corriente D1) se obtienen gases ligeros, naftas y el hidrógeno que no reaccionó, con una recuperación del componente clave ligero (C7) del 99.9 %.

En la Figura 32 se muestra el perfil de composición másica de la columna de destilación reactiva. La sumatoria de la fracción másica de los hidrocarburos C21, C19, C20, C14 y C12 (dentro del rango del diésel verde y la bioturbosina) representa una fracción en fase líquida de 0.86, para la última etapa de la columna reactiva (etapa 15). Mientras que hacia la primera etapa los componentes de mayor presencia son el C5, C7, isoC9 y C4; hidrocarburos en el rango de los gases ligeros y las naftas.

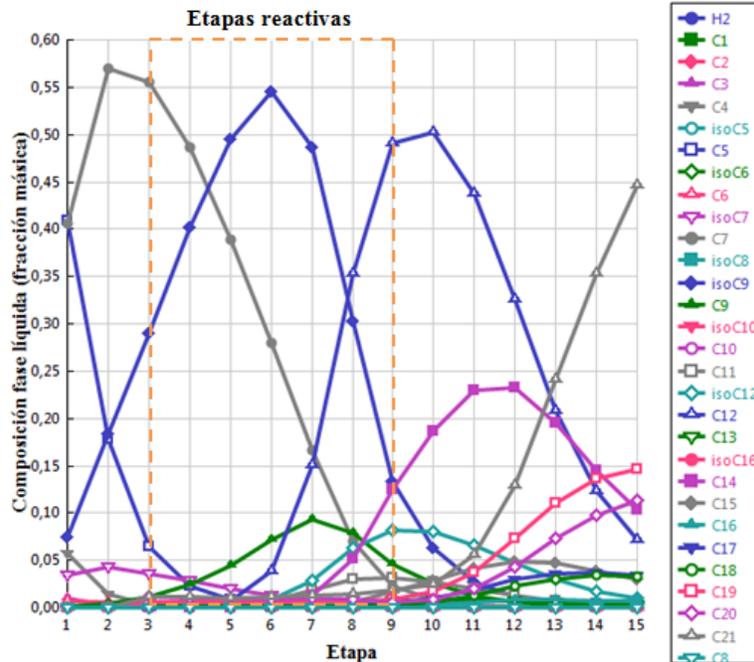


Figura 32. Perfil de composición de la fase líquida de la columna CR-CRI-4. Escenario 4

De acuerdo con la Figura 33, el rango de temperaturas que se tiene en la zona reactiva es de 175-275 °C. Ello implica que se alcanzan mayores temperaturas en comparación con el escenario 3 (150-230 °C), donde la ubicación del corte es la misma; si se observa en los escenarios anteriores, en ninguno se registra un rango de temperaturas tan bajo para la zona reactiva .

Del avance de reacción mostrado en la Figura 34 se puede observar que la etapa donde mayor velocidad de consumo de hidrógeno se alcanza es la etapa 9, aproximadamente 0.15 kmol/h (57.7 % más lento en comparación con la columna reactiva del escenario 3); y es precisamente esta etapa donde se verifica la mayor temperatura registrada para la zona reactiva (275 °C) de acuerdo con la Figura 33.

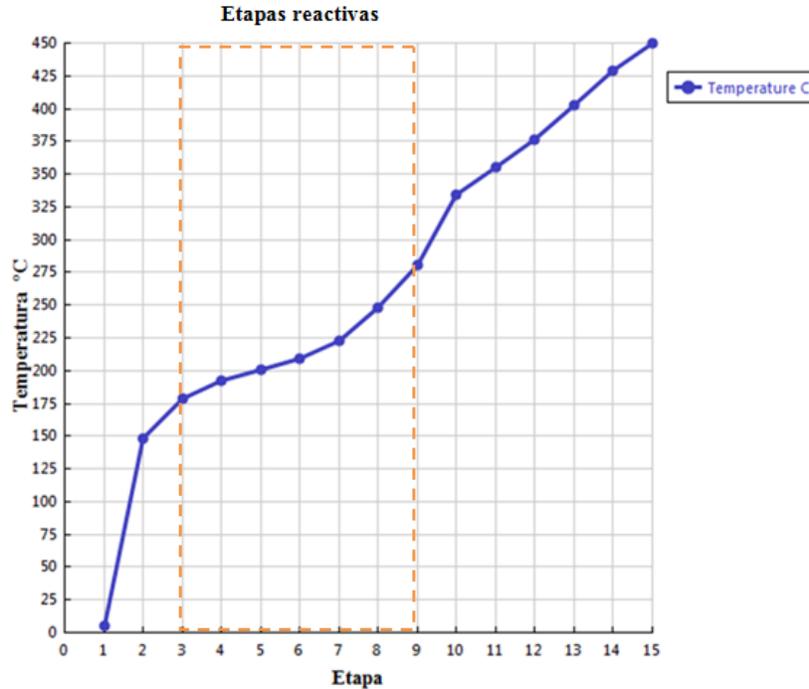


Figura 33. Perfil de temperatura de columna reactiva CR-CRI-4. Escenario 4

Por supuesto, esto tiene una repercusión en el rendimiento global del proceso. Otros autores han reportado que en columnas de destilación reactiva donde el hidrógeno está involucrado como reactivo, éste incrementa su concentración en la fase líquida si la temperatura disminuye; sin embargo, cuando ocurre esta disminución en la temperatura la velocidad de reacción también disminuye (Rosales-Quintero y Vargas-Villamil, 2011). Por lo que los resultados de este escenario pueden ser explicados por este fenómeno, dado que el hidrógeno tiene un punto de ebullición notablemente bajo y debe disolverse en la fase líquida donde los hidrocarburos están presentes para que la reacción tenga lugar.

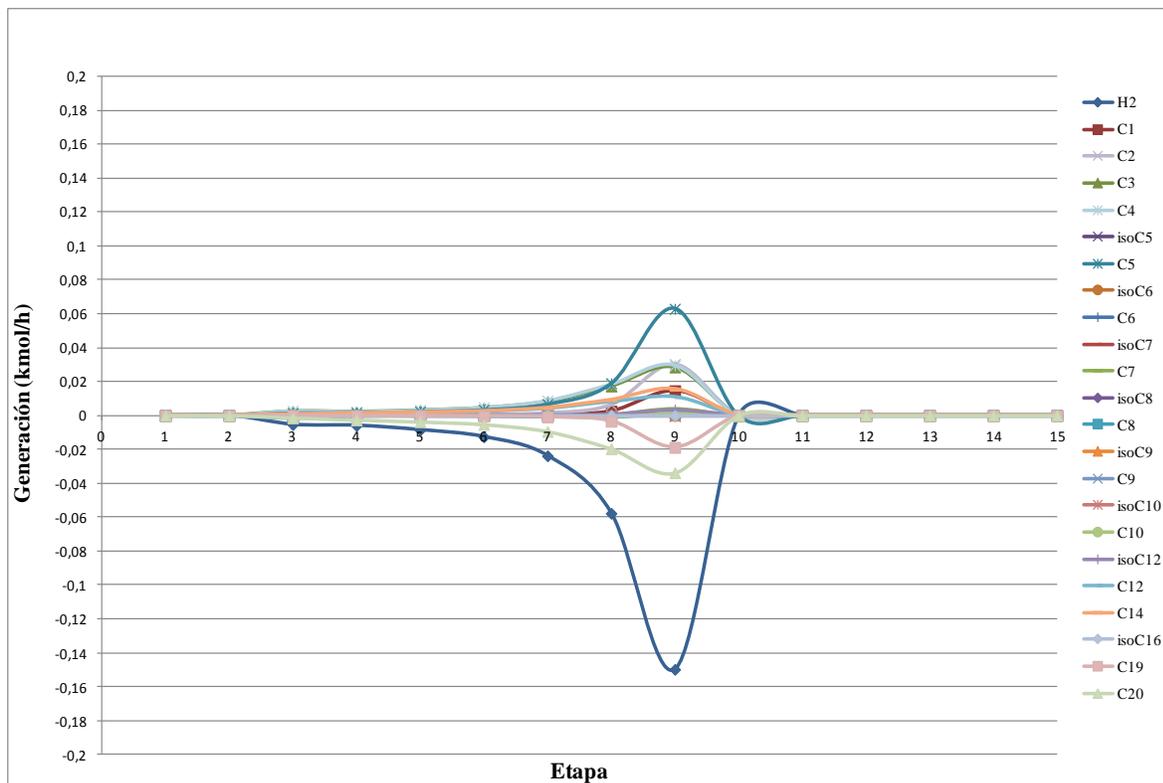


Figura 34. Avance de reacción en la zona reactiva de la columna CR-CRI-4. Escenario 4

Como se observa en la Tabla 36, el rendimiento hacia los hidrocarburos en el rango de la bioturbosina fue de 16.248 %, 9.7 % menor que en el escenario base. Se aprecia también de la Tabla que en la columna de destilación reactiva se disminuyó la producción de gases ligeros y naftas en 41% y 45%, respectivamente; mientras que la producción de diésel verde incrementó en un 50 %, con respecto al escenario base, situación que está directamente asociada a las temperaturas que se verifican en la zona reactiva. El rendimiento hacia el diésel verde se incrementa debido a que las reacciones de craqueo de los hidrocarburos de cadena larga se ven afectadas.

Tabla 36. Composición de los flujos de salida y rendimientos de la columna reactiva CR-CRI-4. Escenario 4

Componente	Fracción másica	Flujo Másico (kg/h)	Producto	Flujo másico total (kg/h)	Alimentación aceite (kg/h)	%Rendimiento
C1	0.01064	0.296	Gases ligeros	8.473	100	8.473
C2	0.04360	1.211				
C3	0.10481	2.911				
C4	0.14604	4.056				
ISOC5	4.41E-05	0.001	Naftas	7.654		7.654
C5	0.25348	7.040				
ISOC6	2.80E-06	0.000				
C6	9.68E-04	0.027				
ISOC7	0.00229	0.064				
C7	0.01881	0.522				
ISOC8	8.26E-04	0.057				
C8	6.11E-03	0.421	Bioturbosina	16.248		16.248
ISOC9	1.18E-03	0.081				
C9	4.64E-04	0.032				
ISOC10	1.38E-03	0.095				
C10	1.09E-06	0.000				
C11	1.95E-03	0.134				
ISOC12	0.00974	0.672				
C12	0.07247	4.996				
C13	2.30E-03	0.159				
ISOC16	3.30E-05	0.002				
C14	0.10273	7.082			Diésel verde	
C15	0.02987	2.059				
C16	6.65E-03	0.458				
C17	0.03382	2.331				
C18	0.03366	2.320				
C19	1.46E-01	10.082				
C20	1.14E-01	7.833				
C21	0.44570	30.724				

Como se observa en la Tabla 37, las presiones de salida de la columna CR-CRI-4 son 10 bar, por lo que previo a su separación ambas corrientes son acondicionadas. Para la corriente del destilado se utiliza una válvula de alivio de presión (VALV-01), con la cual se logra acondicionar la corriente (corriente D1) a 1.36 bar.

Tabla 37. Características de las corrientes de salida columna CR-CRI-4. Escenario 4

	Flujo de destilado (D1)	Flujo de fondos (F1)
Flujo molar (kmol/h)	6.06	0.27
Flujo másico (kg/h)	27.77	68.93
Temperatura (°C)	5.22	449.98
Presión (bar)	10	10.69
Fracción de vapor	1	0

Para modelar la separación del hidrógeno se utiliza el módulo SEP (SEP-03), con lo que el hidrógeno removido se puede acondicionar para su recirculación al proceso. Este

separador es un equipo virtual, que en la práctica puede implementarse mediante una válvula una membrana acoplada al reactor. Por otro lado, la corriente de fondos (corriente F1) que abandona la columna reactiva se acondiciona mediante otra válvula de alivio de presión (VALV-02) que la lleva de 10.69 bar a 1.71 bar, y mediante un enfriador (INT-03) se acondiciona a una temperatura de 250 °C.

Las principales características de los equipos de acondicionamiento así como las características de las corrientes acondicionadas se muestran en la Tabla 38. La corriente HCR-02 se compone por gases ligeros-naftas mientras que HCR-04 por bioturbosina-diésel. La fracción de vapor de la corriente HCR-02 pasa de 1 a 0.629.

Tabla 38. Acondicionamiento de la corriente entrada a la zona de separación. Escenario 4

	Corriente HCR-02	Corriente HCR-03		Enfriador (INT-03)
Flujo molar (Kmol/h)	0.3	0.27	Temperatura de entrada (°C)	410.06
Flujo másico (Kg/h)	16.16	68.93	Temperatura de salida (°C)	250
Temperatura (°C)	4.93	250	Fracción de vapor	0
Presión (bar)	1.36	1.71	Carga térmica (kW)	13.03
Fracción de vapor	0.629	0		

Una vez acondicionadas ambas corrientes se ingresan a las columnas de destilación respectivas. En la columna CD-01-4 se recupera el 99% de los gases ligeros por el destilado, mientras que el 99% de las naftas se recupera por los fondos. En la columna CD-02-4 se obtiene la bioturbosina por destilado con una recuperación de 99%, y el diésel verde se obtiene por el fondo con una recuperación del 99%. En la Tabla 39 se señalan las principales características de cada columna. De la cual, se observan los diámetros de las columnas, éstos son consistentes con los escenarios anteriores. Las relaciones de reflujo son similares a las correspondientes al proceso convencional. Respecto al número de etapas totales para esta secuencia de separación, la columna que requiere más es la CD-02-4; sin embargo, son ocho etapas menos que para la columna con mayor número de etapas en el tren de separación del escenario convencional. Ello implica que se tienen columnas de menor tamaño en el escenario 4, con menores costos de capital.

Tabla 39. Secuencia de separación para el escenario 4

	Columna 1 (CD-01-4)	Columna 2 (CD-02-4)
Número de etapas totales	17	57
Tipo de condensador	Parcial-Vapor	Total
Flujo de destilado (Kmol/h)	0.194	0.0831
Relación de reflujo (RR)	1.24	0.89
Presión del domo (bar)	1.014	1.014
Etapas de alimentación	9	29
Diámetro (m)	0.048	0.09
Flujo de fondos (Kmol/h)	0.105	0.188
Carga térmica (kW)	1.72	7.72
Recuperación del producto	0.998	0.999

Por último, se presenta el resumen de los equipos de proceso involucrados en el escenario de estudio 4. En la Tabla 40 se señala que el número de equipos requeridos tanto para acondicionamiento de corrientes como para reacción y separación es 15. De éstos, los equipos principales son 4 equipos en total. Esto es resultado de la intensificación del proceso mediante destilación reactiva, el cual permite obtener procesos más compactos. La demanda de energía térmica global considerando: 1) servicios de calentamiento de todo el escenario (42.33 kW) y 2) carga térmica de los rehervidores de todas las columnas, incluyendo la columna reactiva (212.64 kW) es de 254.97 kW. Mientras que la cantidad de energía que es liberada o removida tomando en cuenta: 1) el reactor de hidroxigenación (-46.05 kW), 2) servicios de enfriamiento requeridos en todo el proceso (-13.03 kW) y 3) condensadores de todas las columnas del escenario, incluyendo la columna reactiva (-212.72 kW) es de - 271.81 kW. Este excedente resulta principalmente de la carga térmica del condensador de la columna reactiva; ello implica que la energía liberada proviene de las reacciones de hidrocraqueo e hidroisomerización que se llevan a cabo dentro de la columna. Este resultado resulta bastante interesante, pero se recomienda su validación experimental.

Tabla 40. Resumen de equipos de proceso del escenario 4

No. Equipo	Clave	Descripción	Energía (kW)	Eficiencia
1	CMPR-01	Compresor de corriente entrada de hidrógeno	1.78	0.72
2	INT-01	Calentador de corriente entrada de hidrógeno	28.31	N/A
3	B-01	Bomba de corriente entrada de aceite	3.33	0.296
4	INT-02	Calentador de corriente entrada de aceite	14.02	N/A
5	M-01	Mezclador de corrientes antes de R-HDO	N/A	N/A
6	R-HDO	Reactor/Hidrodesoxigenación	-46.05	N/A
7	SEP-01	Separador de corriente de hidrocarburos y gases e H ₂	-1.88	N/A
8	SEP-02	Separador de CO, CO ₂ y H ₂ O del hidrógeno	-0.07	N/A
9	TURB-1	Acondiciona hidrocarburos entrada a columna CR	-0.09	0.296
10	TURB-2	Acondiciona hidrógeno entrada a columna CR	-9.16	0.72
11	INT-03	Enfriador/acondiciona corriente entrada a CD-02-4	-13.03	N/A
12	SEP-03	Separador/ Extraer hidrógeno de corriente HCR-01	-0.80	N/A
13	CR-CRI-4	Condensador parcial-vapor	-206.86	N/A
		Rehervidor	201.38	N/A
14	CD-01-4	Condensador parcial-vapor	-3.58	N/A
		Rehervidor	3.54	N/A
15	CD-02-4	Condensador	-2.29	N/A
		Rehervidor	7.72	N/A

	Equipos de reacción		Equipos de separación
	Equipos de reacción-separación		Equipos auxiliares

4.6 Resultados del análisis económico

A continuación se presentan los costos totales anuales así como el precio de la bioturbosina para cada escenario. La Tabla 41 concentra los resultados del cálculo de costos totales anuales para los cuatro escenarios. De esta Tabla se observa que dos escenarios intensificados poseen costos totales anuales por debajo del monto del escenario convencional.

Tabla 41. Estimación de costos por escenario de estudio

Escenario	Análisis de costos				
	Equipos (\$USD/año)	Servicios (\$USD/año)	Electricidad (\$USD/año)	Materia prima (\$USD/año)	Costo total (\$USD/año)
Convencional	\$234,017.41	\$27,670.93	2,087.39	\$4, 470,116.83	\$4,751,742.59
1	\$281,967.40	\$622,169.03	\$0.00		\$5,374,253.27
2	\$204,030.48	\$18,136.67	\$0.00		\$4,692,283.98
3	\$191,115.13	\$359,712.31	\$0.00		\$5,020,944.16
4	\$176,472.95	\$31,936.34	\$0.00		\$4,678,526.13

El escenario de menor costo es el 4, con un costo total anual 1.54% menor en comparación con el escenario convencional; seguido por el escenario 2 cuyo costo se incrementa tan sólo 0.3 % con respecto al escenario 4. Este es un resultado importante, ya que la intensificación del proceso no sólo es factible desde el punto de vista técnico sino también económico. Respecto al costo de equipos, la reducción en el costo total anual es de 24.6% para el escenario 4 con respecto al escenario base, un porcentaje importante que resulta de un proceso más compacto debido a la implementación de destilación reactiva. El costo total anual del escenario 4 está asociado al menor costo de equipos. En particular la columna reactiva posee sólo 15 etapas y emplea un condensador parcial; por lo que el uso de agua de enfriamiento también impacta positivamente en el costo de servicios. De la misma manera, las columnas dentro del tren de destilación tienen un menor número de etapas totales, en comparación con el proceso convencional.

Ahora bien, en el escenario 2 los costos por servicios son los menores, ya que la columna reactiva cuenta con un condensador parcial que emplea agua de enfriamiento, lo que tiene un impacto positivo en los costos totales anuales. En contraparte, en el escenario 1 la columna reactiva requiere un condensador total por lo que es necesario el uso de un refrigerante; aquí el costo de los servicios es un poco más del doble comparado con el costo de sus equipos, el cual también es el más alto entre los escenarios. Esto se debe a que este escenario requiere 16 equipos totales, un equipo más que en el escenario convencional.

En el escenario tres, la columna de destilación reactiva cuenta con condensador total que requiere el uso de refrigerante. Comparando con la columna del escenario uno, en la Tabla 42 se observa que en la columna reactiva del escenario 3 se debe retirar 75 % menos energía del flujo de destilado. El costo de equipos en el escenario tres resulta atractivo, tan sólo un 8 % arriba del escenario con el menor costo en equipos.

En la Tabla 42 se muestran los resultados de la energía para cada escenario de estudio; se señalan en color azul las columnas cuyo condensador requiere refrigerante. Se presentan los requerimientos energéticos de cada proceso para llevar a cabo las reacciones de hidrocrackeo/hidroisomerización así como la purificación de los productos.

Tabla 42. Requerimientos energéticos por escenario de estudio

Escenario	Carga térmica (kW)	Columna reactiva/Reactor	Columna 1	Columna 2	Columna 3	Total
Convencional	Reactor convencional	13.01	-1.69	-2.47	-2.79	-6.95
			4.10	11.24	4.86	33.21
1	Condensador	-1509.31	0.00	-1.97	-	-1511.29
	Rehervidor	1461.24	20.86	4.89	-	1486.99
2	Condensador	-550.67	-3.58	-2.22	-	-556.47
	Rehervidor	546.20	3.54	4.71	-	554.45
3	Condensador	-853.64	-3.55	-8.35	-	-865.53
	Rehervidor	821.39	4.01	2.45	-	827.86
4	Condensador	-206.86	-3.58	-2.29	-	-212.72
	Rehervidor	201.38	3.54	7.72	-	212.64

De esta Tabla se aprecia que el uso de columnas de destilación reactiva representará una ventaja energética cuando la energía sea integrada en una red de intercambio para su aprovechamiento. Sin embargo, las columnas reactivas presentan altas cargas térmicas en los rehervidores; esto puede deberse a las altas recuperaciones especificadas, que implican altas relaciones de reflujo. Resalta que las columnas de destilación convencional de los escenarios intensificados, a excepción del escenario uno, presentan un menor consumo energético en los rehervidores en comparación con el proceso de hidrotreamiento convencional. Finalmente se observa también que el costo de la materia prima representa

poco más del 90% del costo de la producción de bioturbosina, por lo que es necesaria la búsqueda de materias primas de reducido costo.

En la Tabla 43 se presenta el balance de generación y consumo de energía eléctrica para los cinco escenarios de estudio. En esta Tabla se observa que la energía eléctrica requerida para todos los escenarios es la misma, ya que ésta es utilizada para el acondicionamiento de las corrientes de entrada de aceite de *Jatropha curcas* e hidrógeno al reactor de HDO; sin embargo, para los procesos intensificados se tiene un excedente de energía, la cual es producida mediante turbinas que permiten el acondicionamiento de las corrientes de entrada a la columna reactiva. Por ello, para todos los escenarios intensificados el costo por electricidad es \$0.00. La energía excedente podría venderse generando así un ingreso económico adicional; dicho excedente también representa un impacto ambiental positivo, ya que contribuye a la disminución de las emisiones de CO₂ asociadas a la producción de electricidad. En la columna cinco de la Tabla 42 se muestra el cálculo de la posible ganancia por concepto de venta de la electricidad excedente.

Tabla 43. Excedente de energía eléctrica producida

Escenario	Electricidad requerida (kWh)	Electricidad generada (kWh)	Excedente energía eléctrica (kWh)	Posible ganancia del excedente de energía eléctrica (\$USD/año)
Convencional	5.1171	3.66	-	-
1	5.1171	9.155	4.038	\$ 4,813.89
2	5.1171	8.07	2.953	\$ 3,520.81
3	5.1171	9.308	4.279	\$ 5,101.03
4	5.1171	9.155	4.038	\$ 4,813.89

Por otra parte, en la Tabla 44 se presentan los precios de venta estimados para la bioturbosina para cada escenario. Como es de esperarse, los menores costos estimados para la bioturbosina se obtienen en el escenario 4 seguido por el escenario 2, pues son los procesos de menor costo. En el escenario 4, el precio de la bioturbosina es tan sólo un 8.2% mayor que el precio de la turbosina de origen fósil.

Tabla 44. Precio de venta estimado para la bioturbosina

Escenario	Precio de venta Bioturbosina, (\$MX/L)	Precio de venta turbosina, (\$MX/L)
Convencional	\$12.75	\$11.61
1	\$14.42	
2	\$12.59	
3	\$13.48	
4	\$12,56	

Así, puede observarse que la aplicación de estrategias de intensificación, mediante columnas de destilación reactiva, permite obtener procesos más compactos (con menor número de equipos) para ciertas configuraciones; por lo que los costos de capital (asociado a equipos) y los costos de operación (asociado a servicios) se ven disminuidos en comparación con el escenario convencional. Si bien el precio de venta de la bioturbosina no se encuentra por debajo del combustible fósil, si puede decirse que es competitivo. En este contexto, con la adecuada participación de los grupos involucrados (gobierno, academia e inversionistas) se podrían buscar estrategias como los subsidios para lograr disminuir este precio y que pueda competir con la turbosina.

4.7 Resultados del cálculo de emisiones de CO₂

En la Tabla 45 se muestran los resultados de las emisiones de CO₂ por escenario. De todos los procesos el escenario 2 es el que presenta los menores valores de emisiones de CO₂, lo que significa una disminución de 25 % con respecto al escenario convencional. El segundo escenario con menor huella de carbono es justamente el convencional. De acuerdo con dichos resultados, los escenarios 3 y 4 generan la mayor cantidad de emisiones, dados los altos consumos de vapor para la columna reactiva; incluso su generación de CO₂ es 6.4% (escenario 4) y 3% (escenario 3) mayor que la del proceso convencional.

Las emisiones de CO₂ debidas por generación de electricidad son cero para todos los procesos intensificados, dado que esta electricidad se genera dentro del mismo proceso; por lo que no es necesaria la compra de energía eléctrica, y por consiguiente tampoco la consideración de emisiones por este concepto.

Tabla 45. Estimación de las emisiones de CO₂ por escenario de estudio, (kgCO₂/año)

Escenario	Emisiones vapor	Emisiones electricidad	Emisiones totales
Convencional	286,458,714.13	8,692.48	286,467,406.6
1	293,336,823.87	0	293,336,823.87
2	214,537,247.66	0	214,537,247.66
3	295,031,520.66	0	295,031,520.66
4	354,361,426.43	0	354,361,426.43

Por otra parte, en la Tabla 46 se presentan el excedente eléctrico por escenario (kWh) así como la cantidad de CO₂ que se deja de emitir por este concepto. Estas emisiones no generadas contribuyen en la disminución del impacto ambiental de los escenarios intensificados. De la Tabla se aprecia que el 3 es el escenario que genera mayor cantidad de energía eléctrica excedente evitando emitir 6 037.73 kg CO₂/año. Por lo tanto, el escenario 3 permite una disminución en las emisiones de CO₂ de 170% con respecto a las emisiones por generación de electricidad del proceso convencional.

Tabla 46. Estimación por escenario de CO₂ no emitido

Escenario	Excedente energía eléctrica (kWh)	CO ₂ que no se emite (KgCO ₂ /año)
Convencional	-	-
1	4.038	5, 821.06
2	2.953	4, 281.61
3	4.279	6, 037.73
4	4.038	5,821.06

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES

5.1 Conclusiones

En el presente trabajo se ha propuesto la intensificación del proceso de hidrotreatmento para la producción de bioturbosina mediante el uso de columnas de destilación reactiva. Mediante la simulación del proceso, se encontró que el uso de columnas de destilación reactiva para la producción de bioturbosina resulta factible, obteniéndose un proceso más compacto resultado de la disminución tanto en equipos principales como auxiliares.

En la simulación y modelado de las columnas de destilación reactiva se obtuvieron rendimientos hacia bioturbosina hasta en un 5.34 % por arriba del rendimiento obtenido en el escenario convencional. El mayor rendimiento fue obtenido bajo condiciones de presión y temperatura menores que aquellas del proceso convencional, por lo que los procesos intensificados son más seguros. Asimismo, en los procesos intensificados se logra la producción de un excedente de energía eléctrica, debido al acondicionamiento de las corrientes de entrada a la columna reactiva. Esto repercute positivamente en el proceso, ya que puede ser vendido y obtener una ganancia extra. Desde el punto de vista ambiental también su repercusión es positiva, logrando disminuir las emisiones asociadas de CO₂, hasta en un 25 %. Con base a esta evaluación de los escenarios en términos de consumo energético, costo total anual y generación de emisiones de CO₂ asociadas se concluye que el escenario 2 es el más promisorio. En este escenario intensificado la columna de destilación reactiva emplea un condensador parcial que requiere agua de enfriamiento. Se considera que es el más promisorio en términos de menor impacto ambiental (25 % menos emisiones de CO₂) y un costo total anual sólo tan 0.3% superior al escenario intensificado de menor costo total anual. Cabe añadir que se espera que la integración energética de este escenario ayudara a disminuir aún más su impacto ambiental así como su consumo energético.

La principal contribución de este trabajo radica en la propuesta de un proceso intensificado, mediante una columna de destilación reactiva, para un sistema multireactivo-multicomponente (15 reacciones y 23 componentes). Los resultados muestran la

factibilidad del uso de destilación reactiva en el proceso de hidrotratamiento, con los múltiples beneficios que ello conlleva.

5.2 Trabajo futuro

Con base en los resultados obtenidos del presente proyecto de investigación se sugiere el siguiente trabajo futuro:

Realizar la optimización de los procesos intensificados mediante una herramienta multiobjetivo (modelos meta-heurísticos).

Efectuar un análisis de la existencia de multiplicidades en la solución de las ecuaciones que describen la columna de destilación reactiva.

Estudiar los procesos intensificados en estado dinámico, para analizar la controlabilidad del proceso y establecer la síntesis de una estructura de control.

Desarrollar nuevos materiales catalíticos para las reacciones que se verifican en el proceso de hidrotratamiento.

Estudios experimentales que permitan tener modelos cinéticos de las reacciones catalíticas del proceso de hidrotratamiento a partir de aceites renovables.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aca, M. 2012. Diseño conceptual de un proceso de reacción separación para la producción de biodiésel. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Aca-Aca, M. ., E. Campos González, and O. Sánchez-Daza. 2009. Estimación de propiedades termodinámicas de los compuestos involucrados en la producción de biodiésel. *Superf. y vacío* 22:15–19.
- Almeida-Rivera, C. P. 2005. Designing Reactive Distillation Processes with Improved Efficiency. Economy , exergy loss and responsiveness. Universidad Tecnológica de Delft.
- Ancheyta, J. 2011. Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining. 1 Ed. Wiley, New Jersey.
- Bernabei, M., R. Reda, R. Galiero, and G. Bocchinfuso. 2002. Proceedings of the 25th international symposium on capillary chromatography Riva Del Garda, Italy.
- BP. 2015. BP Statistical Review of World Energy. Available from: <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:BP+Statistical+Review+of+Worl d+Energy#0>
- Calemma, V., S. Peratello, and C. Perego. 2000. Hydroisomerization and hydrocracking of long chain n-alkanes on Pt / amorphous SiO₂ – Al₂O₃ catalyst. *Appl. Catal.* 190:207–218.
- Carrera-Rodríguez, M., J. G. Segovia-Hernández, and A. Bonilla-Petriciolet. 2011. Short-Cut Method for the Design of Reactive Distillation Columns. *Ind. Eng. Chem. Res.* 50:10730–10743.
- CFE. 2015. Tarifas generales de alta tensión. :<http://app.cfe.gob.mx/Aplicaciones/CCFE/Tarifas/Ta>.
- Chávez-Rodríguez, M. F., and S. a. Nebra. 2010. Assessing GHG emissions, ecological footprint, and water linkage for different fuels. *Environ. Sci. Technol.* 44:9252–9257.
- Chevron Product Company U.S.A. Inc. 2000. Aviation Fuels: Technical Review.
- Chevron. 2006. Alternative Jet Fuels.
- Choudhary, T. V., and C. B. Phillips. 2011. Renewable fuels via catalytic hydrodeoxygenation. *Appl. Catal. A Gen.* 397:1–12. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2011.02.025>
- Demirbas, A. 2009. Biorefineries: Current activities and future developments. *Energy Convers. Manag.* 50:2782–2801. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2009.06.035>
- Fan, K., J. Liu, X. Yang, and L. Rong. 2014. Hydrocracking of Jatropha oil over Ni-H₃ PW₁₂ O₄₀ / nano-hydroxyapatite catalyst. *Int. J. Hydrogen Energy* 39:3690–3697. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.12.123>
- FAO, and RLC-Caribe. 2013. La Bioenergía en América Latina y El Caribe El estado de arte en países seleccionados.

Furimsky, E. 2013. Hydroprocessing challenges in biofuels production. *Catal. Today* 217:13–56. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cattod.2012.11.008>

Global Hydrogen. 2015. Hidrógeno más barato. :<http://www.motordehidrogeno.net/el-hidrogeno-mas-b>.

Gómez Castro, F. I. 2010. Diseño y optimización de sistemas reactivos térmicamente acoplados para la producción de biodiésel por el método supercrítico. Instituto Tecnológico de Celaya.

Granados-Aguilar, A. S., T. Viveros, and E. S. Pérez-Cisneros. 2008. Thermodynamic analysis of a reactive distillation process for deep hydrodesulfurization of diésel: Effect of the solvent and operating conditions. *Chem. Eng. J.* 143:210–219. Available from: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1385894708002076>

Gutiérrez-Antonio, C., F. I. Gómez-Castro, S. Hernández, and A. Briones-Ramírez. 2015. Intensification of a hydrotreating process to produce biojet fuel using thermally coupled distillation. *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 88:29–36. Available from: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0255270114002578>

Gutiérrez-Antonio, C., F. I. Gómez-Castro, J. G. Segovia-Hernández, and A. Briones-Ramírez. 2014. Process Intensification of the production process of biojet fuel. In: 10th International Conference on Distillation & Absorption.

Gutiérrez-Antonio, C., and F. I. Gómez-Castro. 2010. Estudio de benchmarking para las tecnologías de producción de bioturbosina, Reporte técnico.

Gutiérrez-Antonio, C., F. Gómez-Castro, J. G. Segovia-Hernandez, and A. Briones-Ramírez. 2013. Simulation and optimization of a biojet fuel production process. In: 23rd European Symposium on Computer Aided Process Engineering. p. 13–18.

Gutiérrez-Antonio, C., A. G. Romero-izquierdo, F. . Gómez-Castro, and S. Hernández. 2016. Energy Integration of a Hydrotreatment Process for Sustainable Biojet Fuel Production. *Ind. Eng. Chem. Res.* 55:8165–8175.

Gutiérrez-Antonio, C. 2014. Producción de bioturbosina.

Herrera-Martínez, J. 2007. Experiencia con *Jatropha Curcas L.* en México.

IATA, and OACI. 2013. Overview of Biojet Fuels in 2013.

IATA. 2009. A global approach to reducing aviation emissions – First stop: carbon neutral growth from 2020. Available from: www.iata.org

Jatropha de México. 2015. *Jatropha* de México. Blog Combust. vivos:<http://jatropha.com.mx/blog/>.

Jiménez-Gutiérrez, A. 2003. Diseño de procesos en ingeniería química. (S. A. Reverté, editor.).

Kubi, D., and V. Tuka. 2013. Hydrotreating of Triglyceride- Based Feedstocks in Refineries.

Lang, A., and H. Farouk. 2014. The current developments regarding technologies, feedstocks , and

innovative new R&D developments.

Liu, G., B. Yan, and G. Chen. 2013a. Technical review on jet fuel production. *Renew. Sustain. Energy Rev.* 25:59–70. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2013.03.025>

Liu, G., B. Yan, and G. Chen. 2013b. *Renewable and Sustainable Energy Reviews.* 25:59–70.

Luyben, W. L., and Y. Cheng-Ching. 2008. *Reactive Distillation Design and Control.* John Wiley & Sons, Inc., New Jersey.

MAGRAMA. 2011. Cálculo de emisiones. :<http://www.magrama.gob.es/es/ceneam/programas-de-e>.

McCall, M. J., J. A. Kocal, A. Bhattacharyya, T. N. Kalnes, and A. Timothy. 2009. Production of aviation fuel from renewable feedstocks. 2.

Mendes, G. S., R. L. Victoria, C. A. Joly, and L. M. Verdade. 2015. *Bioenergy & Sustainability: bridging the gaps.*

Mohammad, M., T. Kandaramath Hari, Z. Yaakob, Y. Chandra Sharma, and K. Sopian. 2013. Overview on the production of paraffin based-biofuels via catalytic hydrodeoxygenation. *Renew. Sustain. Energy Rev.* 22:121–132. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2013.01.026>

Montesdeoca, D. . 2013. Simulación de la unidad de reformado catalítico de la refinería estatal Esmeraldas. Universidad Politécnica de Madrid.

OACI. 2011. Hoja de ruta global y eficaz de medidas basadas en criterios de mercado.

Oficina Catalana de Cambio Climático. 2013. Guía práctica para el cálculo de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI). :<http://es.slideshare.net/mediambientcat/120527-gui>.

PEMEX. 2014. Factores de emisión para los diferentes tipos de combustibles fósiles que se consumen en México. Primer informe parcial. Available from: http://www.inecc.gob.mx/descargas/cclimatico/2014_inf_parc_tipos_comb_fosiles.pdf

Posada, J. D. 2008. Destilación reactiva. Generalidades. Univ. Nac. Colomb. Available from: www.bdigital.unal.edu.co

ProyectoFSE, and W. Brucialga. 2016. La industria de la aviación y la bioturbosina en México. ProyectoFSE. Available from: <http://proyectofse.mx/2016/03/09/bioturbosina-en-mexico/>

REN21. 2016. Energías renovables 2016. Reporte de la situación mundial.

Romero-Izquierdo, A. 2015. “Integración energética de un proceso para la producción de combustible renovable de aviación.” Universidad de Guanajuato.

Rosales-Quintero, A., F. D. Vargas-Villamil, and E. Arce-Medina. 2008. Sensitivity analysis of a light gas oil deep hydrodesulfurization process via catalytic distillation. *Catal. Today* 130:509–518.

Rosales-Quintero, A., and F. D. Vargas-Villamil. 2011. The role of kinetics and hydrocarbon distribution in the multiplicities of a two-bed catalytic distillation column for deep

hydrodesulfurization. *Chem. Eng. Res. Des.* 89:586–592.

Rosales-Quintero, A. 2004. Modelo dinámico de una columna de destilación reactiva para la hidrodesulfuración de gasóleo ligero. Instituto Politécnico Nacional.

RSB. 2009. Principios y Criterios RSB para la producción sostenible de biocombustible.

SAGARPA. 2012. Información técnica de la semilla de *Jatropha curcas*.

Sánchez-Daza, O., E. S. Pérez-Cisneros, E. Ortiz-Muñoz, and C. Luna-Ortega. 2006. Diseño de Procesos de Destilación Reactiva Bajo Control Cinético Caso: Metátesis de Penteno. *AMIDIQ* 5:129–135.

Segovia-Hernández, J. G., and A. Bonilla-Petriciolet. 2016. *Process Intensification in Chemical Engineering. Design Optimization and Control*. Springer.

Sharma, R. K., M. Anand, B. S. Rana, R. Kumar, S. a. Farooqui, M. G. Sibi, and a. K. Sinha. 2012. *Jatropha*-oil conversion to liquid hydrocarbon fuels using mesoporous titanasilicate supported sulfide catalysts. *Catal. Today* 198:314–320.

Shayegh, F., a. Farshi, and a. Dehgan. 2012. A Kinetics Lumped Model for VGO Catalytic Cracking in a Fluidized Bed Reactor. *Pet. Sci. Technol.* 30:945–957.

Stankiewicz, A., and J. a. Moulin. 2000. Process intensification: Transforming Chemical Engineering. *Chem. Eng. Prog.*:22–34.

Stankiewicz, A. 2001. Reactive separations for process intensification : an industrial perspective. *Chem. Eng. Process.* 42:137–144.

Thery, R., X. M. Meyer, X. Joulia, and M. Meyer. 2005. Preliminary Design of Reactive Distillation Columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 83:379–400.

Toop, G., M. Cuijpers, B. Borkent, and M. Spöttle. 2014. Accounting methods for biojet fuel.

Turton, R., R. C. Bailie, W. B. Whiting, J. . Shaeiwitz, and D. Bhattacharyya. 2012. *Analysis , Synthesis , and Design of Chemical Processes*. 4^o Edition. Prentice Hall.

Turton, R., R. C. Bailie, W. B. Whiting, and J. . Shaeiwitz. 1998. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. (P. H. I. Series, editor.).

World Energy Council. 2011. *Global Transport Scenarios 2050*.

Apéndice A

Esquema de reacciones HDO

Reacciones de HDO de la Trioleína:

Ligeros (n-C₅ a n-C₈):



Intermedios (n-C₉ a n-C₁₄):



Pesados (n-C₁₅ a n-C₁₈):



Oligomerizados (n-C₁₉ a n-C₂₁):



Reacciones de HDO de la Trilinoleína:

Ligeros (n-C₅ a n-C₈):



Intermedios (n-C₉ a n-C₁₄):



Pesados (n-C₁₅ a n-C₁₈):



Oligomerizados (n-C₁₉ a n-C₂₁):



Reacciones de HDO de la Tripalmitina:

Ligeros (n-C₅ a n-C₈):



Intermedios (n-C₉ a n-C₁₄):



Pesados (n-C₁₅ a n-C₁₈):

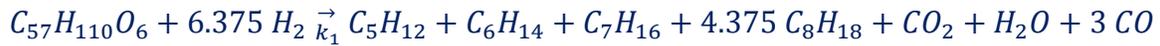


Oligomerizados (n-C₁₉ a n-C₂₁):



Reacciones de HDO de la Triestearina:

Ligeros (n-C₅ a n-C₈):



Intermedios (n-C₉ a n-C₁₄):



Pesados (n-C₁₅ a n-C₁₈):



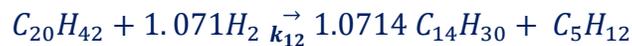
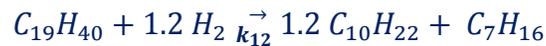
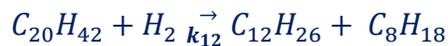
Oligomerizados (n-C₁₉ a n-C₂₁):



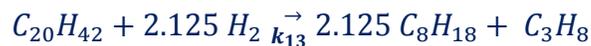
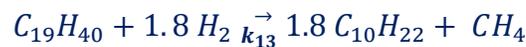
Esquema de reacciones hidrocraqueo/hidroisomerización

Reacciones de hidrocraqueo:

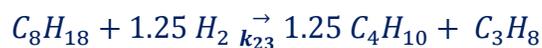
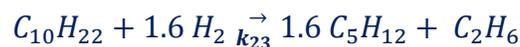
Hidrocraqueo de VGO a gasolinas:



Hidrocraqueo de VGO a gases ligeros:



Hidrocraqueo de gasolinas a gases ligeros:



Reacciones de hidroisomerización:

