

Uso de simulador "COCO" para el diseño de plantas químicas. Caso de estudio: Planta de producción de Ciclohexano

Jolaine Martínez-Díaz¹, Valentina Martínez-Castro¹ & Deyler Rafael Castilla-Caballero¹ 

¹ Universidad Tecnológica de Bolívar - Colombia

ACCESO  ABIERTO

Para citaciones: Martínez Díaz, J., Martínez Castro, V., & Castilla Caballero, D. (2022). Uso de simulador "COCO" para el diseño de plantas químicas. Caso de estudio: Planta de producción de Ciclohexano. *Ing-NOVA*, 7(1), 66-84. <https://doi.org/10.32997/rin-2022-3728>

Recibido: 21 de julio 2021
Revisado: 18 de octubre 2021
Aprobado: 20 de octubre 2021

Autor de correspondencia:
Deyler Rafael Castilla-Caballero
dcastilla@utb.edu.co

Editor: Miguel Ángel Mueses. Universidad de Cartagena-Colombia.

Copyright: © 2022. Martínez Díaz, J., Martínez Castro, V., & Castilla Caballero, D. Este es un artículo de acceso abierto, distribuido bajo los términos de la licencia <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/> la cual permite el uso sin restricciones, distribución y reproducción en cualquier medio, siempre y cuando que el original, el autor y la fuente sean acreditados.



RESUMEN

Se evaluó el uso del simulador de procesos *COCO* en la producción de ciclohexano a partir de la hidrogenación catalítica del benceno determinando las ventajas y desventajas del uso de software libre frente a un simulador comercial. Con el uso de esta herramienta se diseñaron los equipos, el esquema general del proceso industrial, y se compararon los resultados de pureza con los resultados obtenidos por medio del software comercial ASPEN HYSYS. Se realizó el diseño partiendo de flujos de alimentación, temperaturas, presiones de operación y diagrama de flujo reportados en la literatura. Los resultados indicaron que el simulador *COCO* es adecuado y ventajoso para hacer simulaciones de este tipo de procesos a nivel académico al arrojar errores menores al 1% y una capacidad anual de la planta mayor a la prevista.

Palabras clave: Simulación de procesos; software libre; caso de estudio.

Use of "COCO" simulator for plant design. Case study: cyclohexane production plant

ABSTRACT

The use of the *COCO* process simulator in the production of cyclohexane from the catalytic hydrogenation of benzene was evaluated, determining the advantages and disadvantages of the use of free software compared to a commercial simulator. With the use of this tool, the equipment was designed, the general scheme of the industrial process, and the purity results were compared with the results obtained by means of the commercial software ASPEN HYSYS. The design was carried out based on feed flows, temperatures, operating pressures and flow diagram reported in the literature. The results indicated that the *COCO* simulator is suitable and advantageous for simulating this type of process at the academic level, as it shows errors of less than 1% and an annual capacity of the plant greater than expected.

Keywords: Process simulation; free software; case study.

¹ Departamento de Ingeniería Química, Universidad Tecnológica de Bolívar, Parque Industrial & Tecnológico Carlos Vélez Pombo, Km 1 Vía Turbaco, Código postal: 130001, Área Metropolitana de Cartagena, Colombia.

1. Introducción

El desarrollo de la industria química resulta ser una actividad sumamente importante para el ser humano pues mediante esta se satisfacen las necesidades de las personas a través de la transformación de materias primas en productos de uso generalizado. Debido a su gran importancia en la calidad de vida de las personas, constantemente las operaciones dentro de la industria química están sometidas a cambios y mejoras. Estas operaciones siguen un orden lógico para garantizar que se cumplan las leyes de la termodinámica y las leyes de transferencia de calor y de masa y una vez unificadas, estos procesos están sujetos a cambios que los ingenieros deben ser capaces de analizar y resolver. La simulación de procesos es una de las herramientas útiles para analizar estos cambios.

La simulación de un proceso químico es una técnica numérica que utiliza modelos matemáticos para comprender y representar las transformaciones químicas, físicas de materiales y compuestos en las diferentes operaciones unitarias que presenta un proceso. Tiene como objetivo describir y predecir el comportamiento de un sistema que puede incluir numerosas variables de operación. Los modelos usados en la simulación generalmente se alteran como una estrategia para observar los efectos de cambios internos y externos en el sistema permitiendo anticipar resultados que no estaban supuestos en un sistema real.

Actualmente existen numerosos programas para la simulación de procesos, ya sean comerciales o privados como *Aspen Plus*, *Hysys*, *Pro II*, *ChemCAD* o de código abierto como *COCO* y *ChemSep*. *COCO Simulator (CAPE OPEN to CAPE OPEN)* es uno de los simuladores de uso libre y gratuito. Este funciona en estado estacionario, es gráfico y modular y permite a través de su entorno de modelación añadir nuevas operaciones unitarias o paquetes termodinámicos [1]. Es una gran herramienta para el diseño de procesos de la industria química, que crea una alternativa a softwares de tipo comercial. El simulador *COCO* incluye el simulador *ChemSep* para los procesos de separación, además, cuenta con varios componentes que ayudan al desarrollo del simulador, entre estas están *COFE* que es la interfaz gráfica para los diagramas de flujo, *TEA*, que se basa en el código de la biblioteca termodinámica de *ChemSep*, *COUSCOUS*, que ofrece un paquete simple de unidad de procesos, *CORN* para el paquete de reacciones, *COFE.xlt* para trabajar con plantillas de Excel, entre otros.

COCO se muestra como un simulador con buen desempeño. Según Sanchis y colaboradores [2], quienes emplean el simulador en el diseño de un proceso de regeneración de aguas de lavado de recubrimientos metálicos, el simulador *COCO* se presenta como una buena alternativa frente al simulador

comercial *Chemcad* por su flexibilidad, versatilidad, gran interoperabilidad y libre accesibilidad, por lo que permite implementar prácticas de simulación para la formación académica. Sanchis reitera que a pesar que el simulador tiene funcionalidades limitadas, permite adaptarse a las necesidades por la alta operabilidad que tiene con otros softwares de ingeniería [2]. En el trabajo se abordaron a cabalidad procesos de alta complejidad como es el comportamiento de una cascada de tanques de lavado; esto se realizó debido a la conexión permitida del simulador *COCO* con *MATLAB*. Igualmente Gonzalo y colaboradores [3] refieren a *COCO* como una buena herramienta para "representar de forma más didáctica los flujos de entrada, salida del proceso y también seleccionar los equipos que más se utilizan en cada operación".

Por otro lado, *COCO* se presenta como una alternativa para simular procesos biológicos. En la ref. [4], se logró determinar a partir del simulador las variables más influyentes para la producción de hongo orellana a partir de residuos agroindustriales. Además, Tangsathikulchai y colaboradores [5] hacen uso del simulador *COCO* para estudiar el comportamiento de pirólisis lenta por lotes de biomasa; los autores indicaron que el programa generó para cada biomasa el mejor conjunto de parámetros cinéticos y números estequiométricos para la reacción que se lleva a cabo, adicionalmente la simulación con *COCO* pudo predecir los rendimientos de los productos de pirólisis con una precisión razonable. Estos autores señalan que *COCO* ofrece resultados más precisos para un conjunto particular de condiciones de pirólisis, sin embargo, los resultados arrojados para las condiciones usados en la simulación presentaron una precisión razonable con valores de 6.02, 5.45 y 7.03% para los productos sólidos, líquidos y gaseosos, respectivamente.

Cortez y colaboradores [1] evaluaron mediante la norma ISO/IEC 25010:2011 la funcionalidad del simulador *COCO* como herramienta didáctica para ingeniería química, al ejemplificar con dos procesos de producción de ácido sulfúrico y producción de caña de azúcar. Determinaron menor puntuación para factores como: adecuación funcional, fiabilidad y portabilidad debido al cierres inesperados en el programa, falta de herramientas y equipos usados generalmente en la industria química; por otro lado, los factores que tuvieron mayor puntuación fueron: la eficiencia de desempeño, compatibilidad, usabilidad y mantenibilidad que se explica por el poco tiempo de respuesta del simulador, compatibilidad con diferentes programas, facilidad de uso y uso de bajos recursos.

El conjunto de componentes que comprende el simulador *COCO* se puede usar para simular numerosos procesos industriales, como el proceso de obtención de Ciclohexano. El Ciclohexano de fórmula C_6H_{12} es un compuesto

nafténico, cristalino de alta pureza, usado como precursor para la producción de ácido adípico y caprolactama, compuestos para la producción del Nylon 6 y Nylon 6,6 respectivamente, unas de las fibras que tienen gran presencia y auge en la industria química (Tabla 1) [6], [7].

Tabla 1. Distribución de la producción de Ciclohexano a nivel mundial

Producción de Ciclohexano a nivel mundial	
54%	Ácido adípico
39%	Caprolactama
7%	Disolventes, Insecticidas y Plastificantes

El ciclohexano tiene su consumo principal en fibras, resinas y películas de Nylon, por esto está vinculado a la industria automotriz, de materiales y textil. Particularmente en Colombia el sector textil tiene gran demanda de ciclohexano debido a su amplia variedad de prendas como los Jeans. Según PROCOLOMBIA, Estados Unidos es el mayor importador de Jeans colombianos, por lo que uno de los materiales más usados en las exportaciones colombianas es el Nylon [8]. Debido al gran uso y demanda del nylon y a la insuficiencia actual de empresas productoras de ciclohexano, que es uno de los principales compuestos para la producción de esta fibra sintética tan demandada, las empresas productoras de nylon deben recurrir a la importación del ciclohexano para satisfacer la demanda. [9]. Una manera de suplir esto, podría ser mediante la construcción de una planta de producción de Ciclohexano, que no solo contribuiría a una mejora en la economía local, sino que también impulsaría a una mayor exportación del producto.

La industria del ciclohexano parece prometedora, por lo que realizar este tipo de diseños de planta enfocados a este mercado resulta conveniente. Con la ayuda del simulador *COCO* se logró realizar el diseño del proceso de producción de ciclohexano, lo que permitió asimismo evaluar este software de código abierto. El diseño de la planta está enfocado a una capacidad de 150,000 ton/año con una pureza del 99.9%, días de servicios de 365 días al año y 24 horas de trabajo. Se utilizó como referencia el trabajo realizado por Gutiérrez y Antonio [10], donde se realizó el diseño de una planta de ciclohexano con el simulador *ASPEN HYSYS* para una capacidad nominal de 150,000 toneladas al año con una pureza del 99.9% del ciclohexano.

2. Materiales y Métodos

2.1 Revisión sobre los métodos de obtención de ciclohexano

conversión de la reacción, pues se debe establecer un límite de temperatura para evitar la aparición de productos secundarios, lo que ofrece una conversión de 87% en el primer reactor PBR y esta es aumentada al 99% con un acople de otro reactor PBR.

Seguidamente el producto es llevado a un separador flash para separar la corriente líquida de la corriente gaseosa que no reaccionó. La corriente gaseosa resultante del flash es guiada una unidad de división con tal de separar y recircular el hidrogeno del resto de gases, mientras que la corriente líquida es llevada a una columna de destilación. Finalmente, en la cima de la columna de destilación salen los gases y en los fondos de la columna se obtiene el producto deseado que es llevado a un tanque de almacenamiento para destinarlo a sus diferentes usos.

En el diseño del proceso se tuvieron en cuenta integraciones energéticas al establecer los puntos donde se producía consumo de energía y donde se aportaba o desprendía calor, así como los puntos donde hubo consumo de compuestos que podían reutilizarse con el fin de generar alternativas de diseño para la optimización del proceso al minimizar la energía y los recursos empleados en los distintos equipos. Se realizó un estudio paramétrico para determinar la temperatura óptima de operación del flash, teniendo como objetivo los flujos de salida de la unidad y sus composiciones. Asimismo, se realizó un estudio paramétrico para determinar el porcentaje de reciclaje de la corriente que sale de la unidad flash hacia el proceso teniendo como respuesta el flujo que reingresa al proceso y la conversión del primer reactor.

Con la herramienta *COCO-ChemSep* se optimizó la columna de destilación relacionado al costo y gasto de energía dado que estos equipos son unidades que conllevan más gasto de energía anual. Finalmente, a través de la opción *COFE.xlt* presente en *COCO*, se realizó el diseño del tanque de almacenamiento para el producto final utilizando datos de la secuencia del diagrama de flujo. Esta opción permitió el diseño automático del tanque ya que, al realizar cambios en la simulación de otros equipos o corrientes, se realizaban cambios automáticos en el tanque.

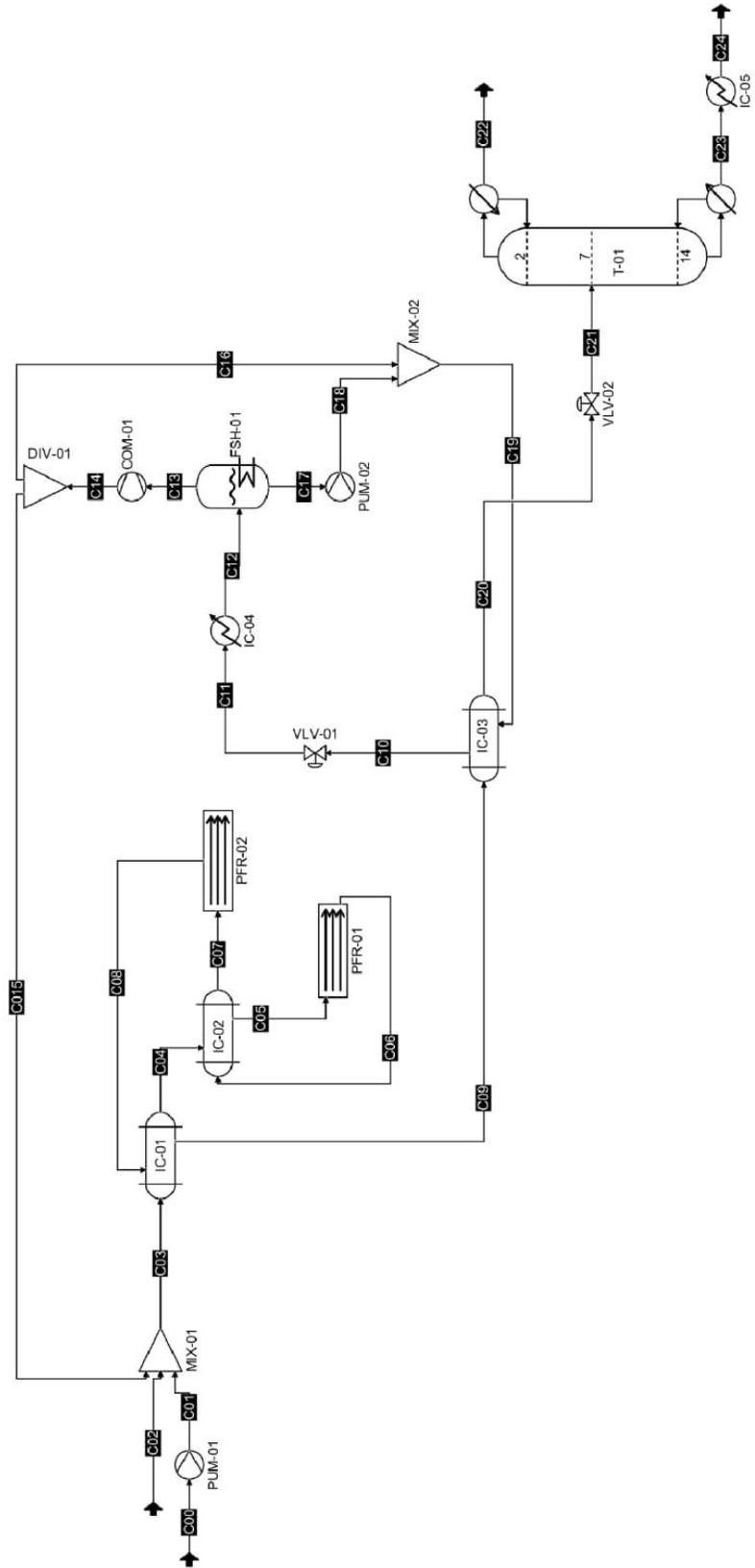


Figura 1. Diagrama del proceso realizado en el simulador COCO

2.3 Modelado del Proceso en el Simulador COCO

Para la simulación del proceso de obtención del Ciclohexano se diseñó un esquema general donde se incluyeron todos los equipos necesarios. El simulador *COCO* permitió realizar el diseño del reactor PBR, de la columna de destilación junto con su optimización, definición de parámetros de operación del proceso e integraciones energéticas.

En primera instancia, para modelar en el simulador se identifican las sustancias involucradas en el proceso, las cuales deben cargarse al simulador en *Property Packages*. Para esto, se selecciona la opción "*Settings*", de la cual se despliega la ventana "*Flowsheet Configuration*" en la que se selecciona la opción "*Property Packages*" y se da clic en "*Add*" para seleccionar el paquete de propiedades que se desee, en este caso se utilizó el paquete de propiedades *ChemSep* como se muestra en la Figura 2. Luego de esto, se despliega una ventana emergente para la configuración del paquete (Figura 3); en esta sección se introduce el método termodinámico y las sustancias o reactivos químicos involucrados en el proceso de obtención del Ciclohexano (Tabla 2).

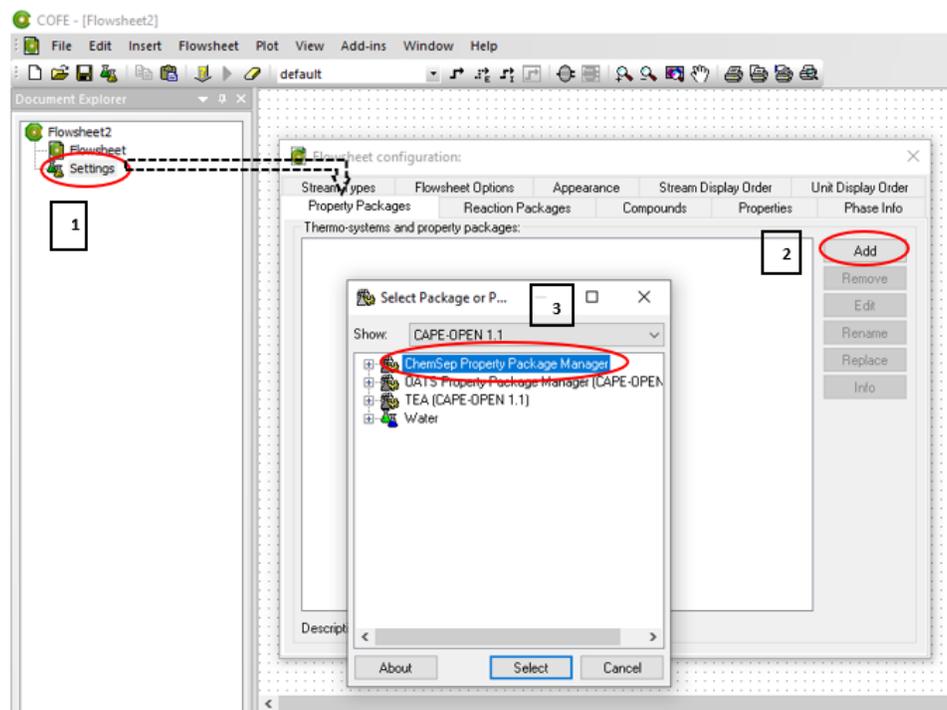


Figura 2. Paquete de propiedades en el simulador COCO

La elección del modelo termodinámico es importante para validar el diseño de los equipos debido a que ayuda al cálculo de propiedades, equilibrios de fases que son fundamentales para la resolución de balances de materia y energía en los equipos para el dimensionamiento de los mismos. *COCO* cuenta con los paquetes termodinámicos principales, entre los que se

encuentran *Soave Redlich Kwong (SRK)*, *Wilson*, *UNIQUAC*, *Peng Robinson*, *Non-Random Two-Liquids (NRTL)*, *Chemical Theory* y *UNIFAC*.

Se seleccionó la Ecuación de Estado (EOS) Peng-Robinson ideal para trabajar con mezclas de hidrocarburos, comportamiento no ideal, amplios rangos de presión y temperatura, además, proporciona buenos resultados para equilibrio de fase, densidad de líquidos, usa pocos parámetros como temperatura crítica (T_c), presión crítica (P_c) y factor acéntrico (w) y tiene en cuenta parámetros de interacción binaria con correlaciones de datos de equilibrio.

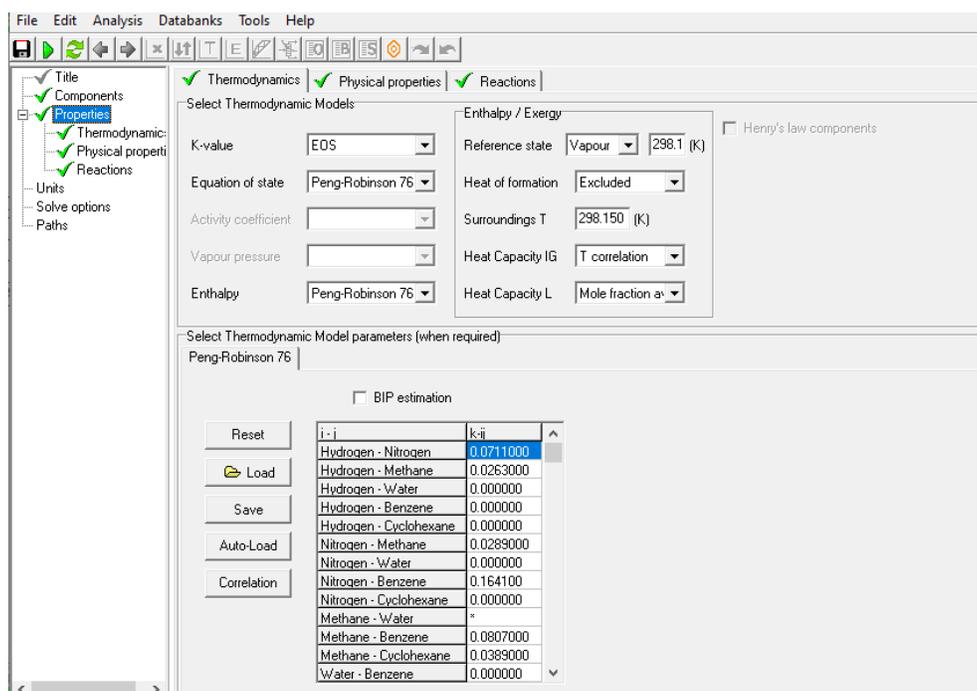


Figura 3. Vista de la configuración del paquete de propiedades ChemSep.

Tabla 2. Sustancias químicas en el proceso de obtención del ciclohexano.

Sustancia	Descripción
Benceno	En la alimentación se considera benceno puro en estado líquido a condiciones normales de 20°C y 110 kPa.
Hidrógeno	Se emplea hidrogeno en una mezcla de gases con trazas de metano y nitrógeno Condiciones de alimentación: 3600 kPa y 25°C.
Metano	Impureza contenida en el hidrógeno con una fracción molar 2%.

Nitrógeno	Impureza contenida en el hidrógeno con una fracción molar 0.5%.
Ciclohexano	Producto deseado.

Se debe establecer un paquete de reacción para llevar a cabo la simulación de la reacción de hidrogenación de benceno, para esto se selecciona la opción Reaction Packages desde Settings >> Flow Configuration >> Add (Figura 4). En este caso se agregó un paquete con la opción "CORN" "Reaction Package Manager" como se muestra en la Figura 5.

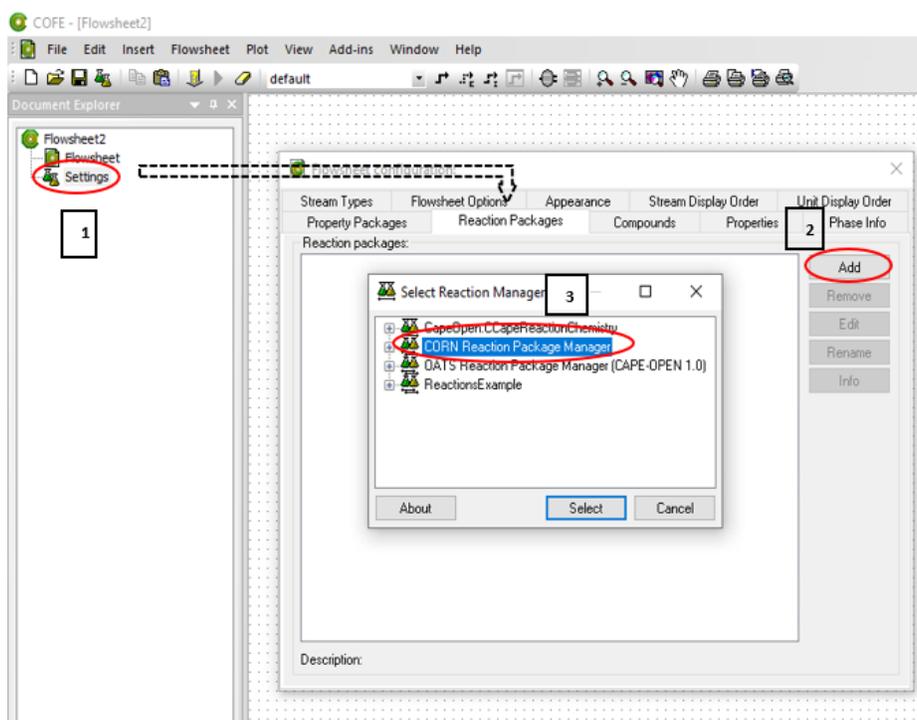


Figura 4. Paquete de reacción en el simulador COCO.

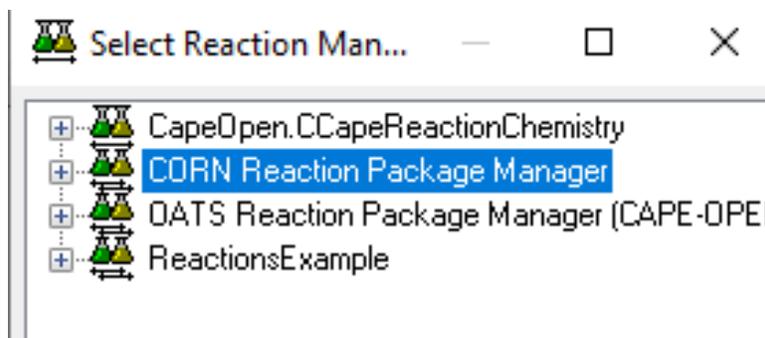


Figura 5. Selección de la opción CORN

Luego, desde la ventana de *Reactions Packages*, se hace clic en la opción "Edit", de donde se despliega una ventana para precisar los componentes que participan en la reacción y la estequiometría de la reacción. Se deben especificar, de ser requeridos, constantes de Arrhenius, ley de velocidad, fase, calor de reacción y coeficientes estequiométricos (negativos para reactivos y positivos para productos) (Figura 6).

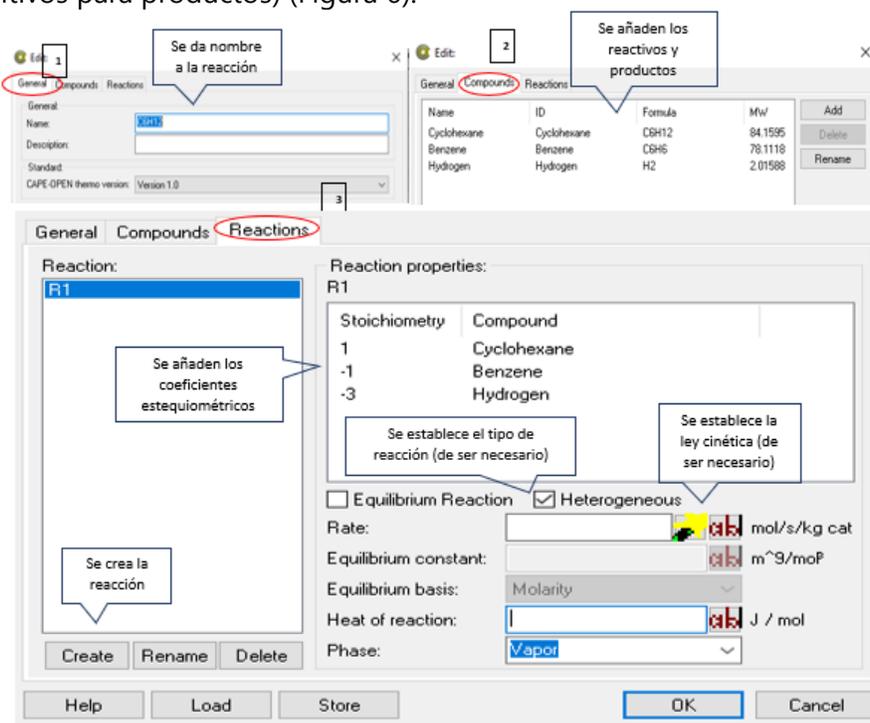


Figura 6. Configuración de la reacción con sus componentes.

Para continuar con el diseño del proceso en el simulador, se seleccionaron el resto de los equipos pertinentes desde la opción "Insert Unit Operation" ubicada en la barra de herramientas del simulador (Figura 7 **Error! Reference source not found.**): reactores, mezclador, columna de destilación, divisor, separador flash, intercambiador de calor, válvulas, bomba y compresor. Una vez especificado los diferentes equipos con los parámetros exigidos por el simulador COCO, se unificaron los equipos con el orden lógico del proceso para dar inicio a la simulación.

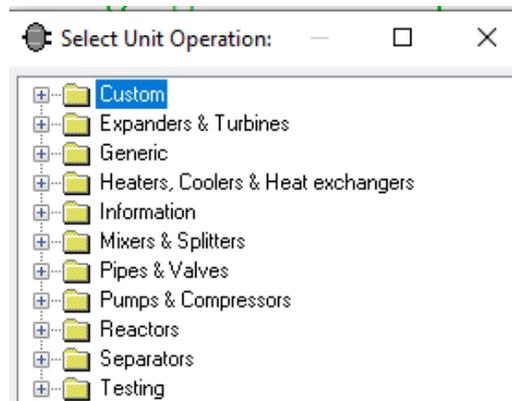


Figura 7. Lista de equipos en el simulador COCO

A partir de los múltiples equipos disponibles en el simulador se seleccionó *FixedConversionReactor* (Figura 8) para la unidad de reacción, la cual requiere especificar la conversión que se debe alcanzar y la temperatura de operación.

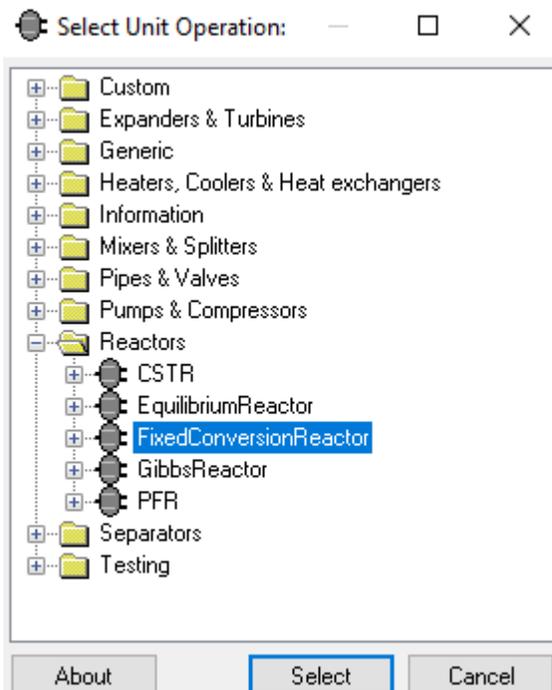


Figura 8. Reactores disponibles en el simulador COCO

3. Resultados y Discusión

3.1 Unidad de reacción

En la Tabla 3 se muestran las condiciones de los dos reactores de conversión fija empleados para la conversión del benceno e hidrógeno a ciclohexano. Si bien se pudo hacer uso del reactor de lecho empacado en el que se estime la masa del catalizador, se hizo la selección de este tipo de reactor para establecer una comparación con el trabajo de Gutiérrez y Antonio en el que

realizan la simulación del mismo proceso con el simulador comercial *ASPEN HYSYS*.

Tabla 3. Condiciones de los reactores

	Reactor 1	Reactor 2
Temperatura de entrada	125°C	137°C
Temperatura de salida	227°C	160°C
Presión	33010 kPa	3183 kPa
Conversión	87%	99%

3.2 Integración Energética

Dado que la reacción es altamente exotérmica, se pudo realizar una integración energética que permitió aprovechar el calor desprendido durante la reacción. Como se evidencia en la Figura 1, se usó el calor desprendido por los reactores PBR-01 y PBR-02 para calentar la corriente de alimentación del proceso C05, a una temperatura de 125°C. Para facilitar el proceso de calentamiento, se dividió la etapa de calentamiento en dos pasos. Con el calor desprendido del PBR-01 se logró que la corriente C04 alcanzara una temperatura de 85°C para posteriormente llevarla a 125°C con el calor desprendido en el PBR-02.

3.3 Tanque de almacenamiento del ciclohexano

Se diseñó el tanque de almacenamiento vinculando Excel con el simulador COCO. En la Tabla 4 se muestran las condiciones de operación de esta unidad. Como datos de entrada se necesita la relación de altura/diámetro, factor de seguridad y autonomía que hace referencia al tiempo que dura el ciclohexano dentro del equipo.

Tabla 4. Datos del tanque de almacenamiento

Tanque de almacenamiento		
Parámetro	Valor	Unidades
Volumen cilindro	269.867	m ³
Volumen líquido	224.856	m ³
Altura	10.5609	m
Altura líquido	10.2676	m
Diámetro	5.2804	m
Espesor del cilindro	0.0078	m
Espesor de la tapa	0.0049	m
Relación H/D	2	-

3.4 Estudios paramétricos

La Figura 9 muestra que a medida que aumenta la temperatura, disminuye el flujo de la corriente C16 que corresponde a la alimentación de la columna de destilación, lo que implica que se obtendría menos producto final; también muestra que a medida que aumenta la temperatura, la fase de vapor arrastra partículas de ciclohexano disminuyendo su pureza. Además, a medida que decrece la temperatura disminuye el flujo de vapor que reingresa en el reactor como corriente de reciclo lo que permite que menos gases se acumulen en estos equipos; por lo tanto, se usó una temperatura óptima de operación del flash de 39°C.

La Figura 10 muestra que a medida que aumenta el factor de reciclo, aumenta el flujo de gases que reingresa al reactor, con esto el hidrógeno que no reaccionó vuelve a ser útil en la corriente del proceso, sin embargo, la corriente de reciclo contiene gases inertes que se acumularían en el reactor disminuyendo la conversión de benceno lo que finalmente afectaría a la pureza del producto. Según este análisis, se tomó como factor de división 0.82 debido a que después de este valor hay un cambio abrupto de las variables del proceso.

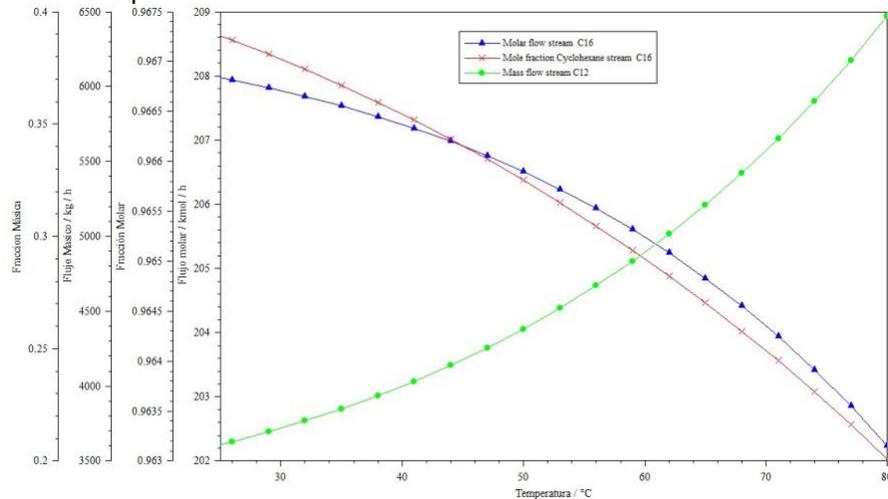


Figura 9. Estudio paramétrico para temperatura óptima del Flash.

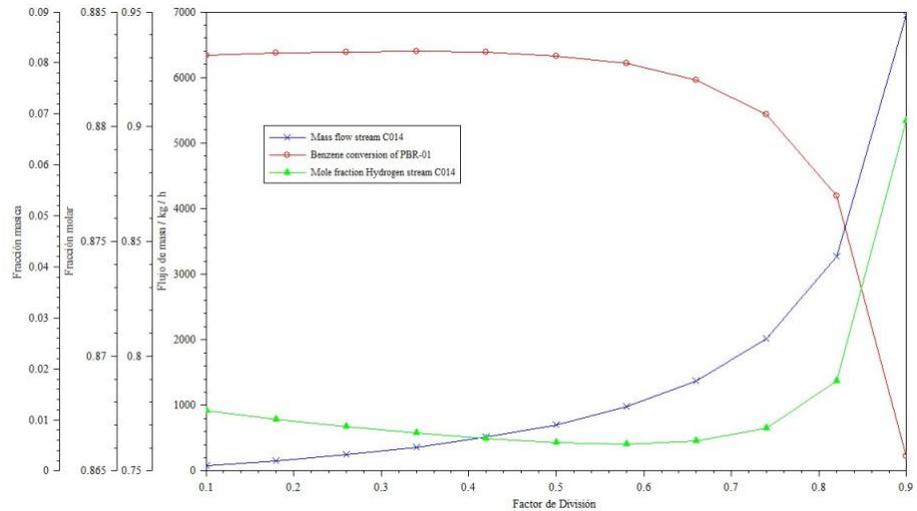


Figura 10. Estudio paramétrico para factor óptimo de división

3.5 Reporte de resultados

Finalmente, el software arrojó resultados globales a través de reportes por unidad de proceso y por flujo. Se presentaron reportes por parámetros de unidad que presentan información por equipo como los mostrados en la Tabla 5 y reporte de los flujos en la simulación como los de la Tabla 5, Tabla 6 y Tabla 7.

Tabla 5. Reporte de equipos obtenidos del simulador COCO

UO	Parámetro	Valor	Unidades
FSH-01	Calor	-6.0229	kW
FSH-01	Temperatura	39.55	°C
FSH-01	Fracción de vapor	0.7939	
PUM-02	Demanda de energía	74499.35	W
PUM-02	Incremento de presión	900000	Pa
DIV-01	Factor de división	0.82	
COM-01	Incremento de presión	1000000	Pa
COM-01	Demanda de energía	263020.56	W
VLV-01	Diferencia de presión	453207.57	Pa
VLV-02	Diferencia de presión	1000000	Pa

Tabla 6. Corrientes de alimentación

Corriente	C00	C01	C02	C015	Unidades
Presión	110	3500	3600	3600	kPa
Temperatura	20	21.63	25	77.97	°C
Velocidad de flujo	204	204	753.2	654.88	kmol/h
Flujo de Hidrógeno	0	0	734.3	569.03	kmol/h
Flujo de Nitrógeno	0	0	3.766	16.404	kmol/h
Flujo de Metano	0	0	15.06	61.413	kmol/h

Flujo de Benceno	204	204	0	0.0936	kmol/h
Fracción molar de Hidrógeno	0	0	0.975	0.8689	
Fracción molar de Nitrógeno	0	0	0.005	0.0250	
Fracción molar de Metano	0	0	0.02	0.0937	
Fracción molar de Benceno	1	1	0	0.0001	

Tabla 7. Corrientes de equipos de reacción

Corriente	C05	C06	C07	C08	Unidades
Presión	3313	3274.67	3183.1	3600	kPa
Temperatura	125	227	137.985	77.97	°C
Velocidad de flujo	1612.1	1079.49	1079.49	654.88	kmol/h
Flujo de Metano	76.47	76.478	76.478	76.478	kmol/h
Flujo de Benceno	204.09	26.550	26.5502	2.0212	kmol/h
Flujo de ciclohexano	7.937	185.481	185.481	210.01	kmol/h
Flujo de Hidrógeno	1303.44	770.808	770.808	697.2	kmol/h
Flujo de Nitrógeno	20.17	20.170	20.1709	20.17	
Fracción molar de Benceno	0.1266	0.024	0.0245	0.002	
Fracción molar de Ciclohexano	0.0049	0.171	0.1718	0.2087	

Tabla 8. Corrientes de columna de destilación (T01)

Corriente	C21	C22	C23	Unidades
Presión	2500	101.325	101.325	kPa
Temperatura	107.853	-50.472	80.535	°C
Velocidad de flujo	351.03	147.24	203.79	kmol/h
Fracción molar de ciclohexano	0.5756	0.00136	0.9905	
Fracción molar de Benceno	0.0054	6.60E-05	0.0094	
Fracción molar Hidrógeno	0.3620	0.8706	7.92E-21	
Fracción molar de Nitrógeno	0.0107	0.2558	0	
Fracción molar de Metano	0.0429	0.1023	1.51E-23	

Con todas las condiciones previamente especificadas se logró una capacidad de la planta de 150.139 ton/año de ciclohexano con una pureza del 99% y flujos de gases de separación de 5459.91 ton/año. Se necesitó 139588.98 ton/año (204 kmol/h) de benceno, 16010 ton/año (753.23 kmol/h) de hidrógeno y una masa de catalizador de 8117 kg. Con respecto a los equipos, el primer reactor presentó medidas de 8 m de longitud y 2.5 m de diámetro, el segundo reactor 9 m de longitud y 2.5 m de diámetro y la columna de destilación medidas de 20.08 m de longitud y 1.28 m de diámetro.

Mediante el diseño por medio del simulador *COCO* se obtuvo satisfactoriamente el producto de interés. Realizando una comparación de la pureza con los resultados obtenido en la referencia [10], donde hacen uso del simulador ASPEN HYSYS con la misma meta de capacidad de planta y mismos flujos de alimentación, se obtuvo un error del 0,9% con respecto a la

pureza. Tomando los mismos flujos de alimentación con el simulador COCO se logró más de la meta en la capacidad anual de la planta con un flujo de 150.139 toneladas por año y corrientes del proceso con valores muy similares al comparar los dos simuladores.

3.6 Optimización de la columna de destilación

Con respecto a la optimización mediante el simulador COCO se diseñaron varios modelos de columnas de destilación variando etapas y platos de alimentación con el fin de obtener un diseño con el menor gasto anual posible. Con el simulador se obtuvieron valores de diámetro, cargas de ebulidores y condensadores. Se diseñó un estudio paramétrico en ChemSep para saber cuál es el plato que minimizaba la carga en el ebuldador; los resultados se muestran en la Figura 11.

OPTIMIZACIÓN DE COLUMNA DE DESTILACIÓN										
Número de etapas	11	13	14	15	16	17	18	20	22	25
Etapas de alimentación	10	12	13	13	14	15	15	19	20	20
Qcondensador (MW)	-1,841	-1,836	-1,834	-1,832	-1,831	-1,827	-1,824	-1,82	-1,821	-1,821
Qebulidor (MW)	1,231	1,2267	1,2243	1,2218	1,2215	1,2167	1,2142	1,2096	1,2113	1,2113
Diámetro (m)	1,17	1,17	1,17	1,17	1,29	1,18	1,17	1,28	1,28	1,29
Altura (m)	11,38	13,17	14,37	15,57	15,86	17,37	18,57	20,08	22,48	25,48
Costo de coraza (k\$)	147	167	180	193	193	212	224	243	236	236
Costo de los equipos internos (k\$)	21	24	27	30	31	34	36	40	44	50
Costo de condensador (k\$)	272	271	271	271	271	270	270	270	270	270
Costo ebuldador (k\$)	209	209	208	208	208	208	207	207	207	207
C2 OPEX (k\$/yr)*	3826	3817	3812	3807	3806	3796	3791	3782	3785	3785
LPS OPEX (k\$/yr)**	232	231	231	230	230	229	229	228	228	228
Costo anual total (k\$/yr)	4265	4263	4262	4262	4261	4257	4256	4253	4257	4259

*Fluido de enfriamiento

**Fluido de calentamiento (gas de baja presión)

Figura 11. Comparación de las columnas propuestas para la optimización de la unidad

En la Figura 11 se presentaron diez diseños de columnas de destilación con variaciones del número de etapas. ChemSep realiza el conteo de las etapas incluyendo el rehervidor y el condensador. Se observa que a medida que aumenta el número de etapas disminuye el costo total anual de la columna, sin embargo, a partir de la etapa 20 el costo total anual aumenta; igualmente aumenta la altura de la columna. La columna está hecha totalmente de acero al carbón y tiene un rendimiento de 8016 h/año. De acuerdo a los distintos diseños y el diagrama de la Figura 12, la columna

de destilación que resulta en la mejor relación costo anual total y número de etapas es la columna que consta de 20 etapas.

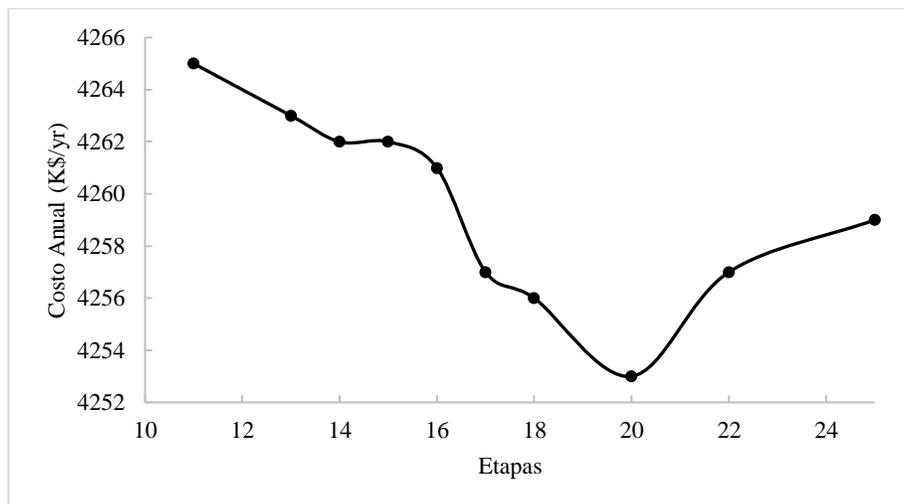


Figura 12. Costo anual total de la columna de destilación en relación al número de etapas de la columna

4. Conclusiones

La simulación resulta ser una herramienta muy útil para el diseño de procesos, dado que no solo permite analizar el comportamiento simultáneo y de manera ordenada, de todas las unidades que hacen parte del proceso, sino que también permite analizar qué modificaciones se deben hacer para mejorar la eficiencia del proceso. Realizando una comparación con trabajos publicados de planta de obtención de Ciclohexano en los que se usan simuladores comerciales, COCO se presenta como una muy buena alternativa para simular dado que se obtienen resultados con altos grados de pureza y alta capacidad nominal de una planta. Al comparar con los resultados mostrados con ASPEN, el simulador COCO resulta en muy buena correspondencia con un simulador altamente respetable y de alta confianza, presentando errores mínimos entre los resultados de las dos simulaciones.

COCO presenta algunos problemas de convergencia al simular equipos complejos de forma simultánea, lo que dificulta el estudio del proceso a diferentes escalas. Además, al ingresar algunos cálculos y ecuaciones que el programa no puede resolver, este se vuelve inestable y se deben realizar modificaciones manuales. Pese a esto, el programa COCO resulta muy ventajoso a la hora de hacer simulaciones puesto que presenta una amplia gama de equipos comunes en la industria de procesos químicos, de paquetes termodinámicos que están muy bien detallados y que resultan bastante intuitivos para el operario. Cuenta con la opción de estudios paramétricos que facilitan la toma de decisiones y definición de parámetros claves en el

proceso, tiene la ventaja de trabajar con programas como Excel para la resolución de algunas unidades, en el simulador pueden añadirse unidades de operación con equipos con unidades previamente establecidas lo que proporciona una amplia gama de configuraciones para lo que el operador disponga, como intercambiadores de calor con múltiples entradas y salidas, variedad de ciclos termodinámicos, entre otros. Además, tiene la opción de realizar una simulación más rigurosa al posibilitar la adición de controladores al proceso. Debe añadirse que este software es de licencia gratuita, de fácil acceso, manejo y tiene recurrentes actualizaciones.

Referencias

- [1] C. M. Cortez, N. A. Saballos, F. M. Sorto, "Aplicación del programa 'Coco Simulator' en la simulación de componentes de procesos de industrias químicas en El Salvador, como una herramienta didáctica para la Ingeniería Química," B.S. Thesis, Esc. Ing. Quím. Ing. Alim., U. del Salvador, Ene. 2017.
- [2] D. D. E. La, M. Trabajo, and D. E. F. I. N. D. E. Grado, "Trabajo fin de grado en biología," pp. 1–5, 2013.
- [3] G. A. Gómez, "Propuesta para la pulverización de lactosuero que se genera en la producción de quesos en Bogotá, utilizando simuladores de procesos 'COCO' y optimizadores de procesos agroalimentarios 'MINITAB'," <https://repository.unad.edu.co/handle/10596/36918>
- [4] E. Al. Cabrera, "Propuesta para el aprovechamiento biotecnológico de residuos agroindustriales bagazo de caña y salvado de maíz para la producción de hongo orellana pleurotus ostreatus, utilizando simulador de procesos coco y como herramienta de optimización distribución", <https://repository.unad.edu.co/handle/10596/40126>
- [5] C. Tangsathitkulchai, N. Punsuwan, and P. Weerachanchai, "Simulation of batch slow pyrolysis of biomass materials using the process-flow-diagram COCO simulator," *Processes*, vol. 7, no. 11, 2019, doi: 10.3390/pr7110775.
- [6] E. A. Dada and L. Achenie, *Production of Cyclohexane from Hydrogenation of Benzene using Microreactor Technology*, vol. 31, Elsevier B.V., July. 2012.
- [7] IHS Markit, "Cyclohexane," *Chemical Economics Handbook*, 2021. <https://ihsmarkit.com/products/cyclohexane-chemical-economics-handbook.html>
- [8] P. A. Espinel González, D. M. Aparicio Soto, A. J. Mora, "Sector Textil Colombiano Y Su Influencia En La Economía Del País," *Punto de vista*, vol. 9, no. 13, 2018, doi: 10.15765/pdv.v9i13.1118.
- [9] Veritrade, "290211: Ciclohexano," 2018.

<https://www.veritradecorp.com/es/colombia/importaciones-y-exportaciones/ciclohexano/290211>

- [10] R. Gutiérrez, A. Rubio, "Modelado y Simulación de una Planta de Producción de Ciclohexano con Capacidad de 150.000 tn/año," B.S. Thesis, Dep. Ing. Quím. Amb., U. de Sevilla, Sevilla, España, 2016, <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/20515/fichero/PFC+Rosario+Guti%E9rrez+Tabares.pdf>
- [11] Z. Karpyn, M. Samir, J. Trujillo, J. Papa, "Evaluation of W-Ni-Pd and W-Ni catalyst supported over Al₂O₃-TiO₂ using the reaction model of hydrogenation of benzene in the presence of dimethyldisulfide dimetildisulfuro," *Rev. la Fac. Ing.*, vol. 16, pp. 55–60, Oct. 2001.
- [12] J. P. Garcia-Villaluenga, A. Tabe-Mohammadi, "A review on the separation of benzene/cyclohexane mixtures by pervaporation processes," *J. Memb. Sci.*, vol. 169, no. 2, pp. 159–174, 2000, doi: 10.1016/S0376-7388(99)00337-3.
- [13] F. Domínguez, E. Choren, J. Sánchez, G. Arteaga "Efecto de la galia en catalizadores de Pt soportado para la hidrogenación de benceno," *Ciencia*, vol. 13, no 1, pp. 103–112, Mar. 2005.