

---

## **4. SIMULACIÓN DE LOS PROCESOS EN ASPEN PLUS**

---

Para simular los procesos anteriormente descritos en ASPEN PLUS hay que llevar a cabo una serie de pasos:

- ✓ Creación de un entorno de simulación.
- ✓ Introducción de componentes.
- ✓ Elección del modelo de propiedades termodinámicas.
- ✓ Creación del diagrama de flujo del proceso.
- ✓ Introducción de datos iniciales.
- ✓ Especificaciones de diseño.
- ✓ Resultados de la simulación de la planta de fenoles.
- ✓ Resultados de la simulación de la planta de furfural.

En este capítulo se explicarán los distintos pasos que se han realizado, tanto en el caso de la obtención de fenoles como en la obtención de furfural.

#### **4.1 Creación de un entorno de simulación**

Antes de simular se deben definir una serie de aspectos que permanecerán constantes a lo largo de todo el proceso de simulación.

En primer lugar se definen las unidades en las que se introducirán los datos de entrada y se obtendrán los de salida. En nuestro caso se selecciona el Sistema Internacional de Unidades para los datos de entrada y el sistema METCBAR para los valores obtenidos a la salida

También se debe elegir los resultados que se quieren obtener de cada corriente, de cada componente de la misma y de cada equipo del que consta el proceso.

#### **4.2 Introducción de componentes**

Los componentes que intervienen deben ser definidos, tanto los productos resultantes de las reacciones como los compuestos que vienen en la alimentación pero no participan en reacciones. En las tablas 4.1 se muestran los compuestos definidos para el proceso de fenoles y furfural.

**Tabla 4.1.** Componentes definidos para cada planta

Componentes planta fenoles	Componentes planta furfural
H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O
Glucose	Glucose
Xylose	Xylose
Arabinose	Arabinose
Xylan	Xylan
Arabinan	Arabinan
Cellulose	Cellulose
CaSO <sub>4</sub>	CaSO <sub>4</sub>
CaPO <sub>4</sub>	CaPO <sub>4</sub>
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
SiO <sub>2</sub>	SiO <sub>2</sub>
Lignin	Lignin
Lignin soluble	Lignin soluble
Sugar soluble	Sugar soluble
Protein	Protein
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
Acetic acid	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
Methanol	Furfural
CO <sub>2</sub>	Hydroximetilfurfural
CH <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> COONa
CH <sub>3</sub> COONa	
Guaiacol	

Ethylphenol	
Cresol	
Catechol	
Acetone	
Vanillin	
CO	
Char	

### 4.3. Elección del modelo de propiedades termodinámicas

Los modelos termodinámicos permiten al simulador calcular diferentes propiedades de un sistema. Cada método está diseñado para ciertos tipos de sistemas, componentes y condiciones, por tanto es importante conocer cuáles son los criterios de cada uno de ellos. La elección del modelo termodinámico es fundamental para que los resultados que se obtengan sean lo más próximo a la realidad. Nuestros procesos son de tipo bioquímico. Dentro de esta categoría se pueden considerar varios métodos termodinámicos:

- ✓ Chao-Seader
- ✓ Grayson-Streed
- ✓ Peng-Robinson
- ✓ Redlich-Kwong-Soave (RKS)
- ✓ Wilson
- ✓ NRTL
- ✓ UNIQUAC

El método Chao-Seader [39] es uno de los modelos usados para el cálculo de la relación de equilibrio de mezclas vapor/líquido ( $K_i$ ) a partir de la ecuación de estado siguiente (Ec. 2):

$$K_i = y_i/x_i = \gamma_i \cdot v_i^0 \cdot \phi_1 \quad (\text{Ec. 2})$$

$K_i$  = Constante de equilibrio del componente i en la mezcla vapor líquido

$y_i$  = Composición de equilibrio del componente i en la fase vapor

$x_i$  = Composición de equilibrio del componente i en la fase líquida

$\gamma_i$  = Coeficiente de actividad del componente i en la fase líquida

$v_i^0$  = Coeficiente de fugacidad del componente i puro en el líquido

$\phi_1$  = Coeficiente de fugacidad del componente en la fase vapor

Fue desarrollado para sistemas que contengan hidrocarburos y gases ligeros en condiciones moderadas, es decir que no operen a alta presión ni temperatura. No es recomendable usarlo en sistemas que contengan hidrógeno.

El método de Grayson-Streed es muy similar al anterior pero sí puede usarse para sistemas que contengan hidrógeno. Está recomendado para un rango de temperatura de entre 15-427°C.

El método de Peng-Robinson también pertenece a la misma categoría de los dos métodos anteriores. Puede tratar mezclas no polares o semipolares, como por ejemplo hidrocarburos o gases ligeros (CO<sub>2</sub>, SH<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, etc). Este método es especialmente apropiado en regiones de alta temperatura y presión, como en las aplicaciones de procesado de hidrocarburos o extracciones supercríticas. Se obtienen resultados fiables a cualquier temperatura y presión sin presentar ningún comportamiento anómalo. Sin embargo, los resultados son menos exactos en la región cercana al punto crítico de la mezcla.

El método de Redlich-Kwong-Soave (RKS) es similar al método de Peng-Robinson y sirve para las mismas aplicaciones y las mismas condiciones de operación. Por tanto, se puede utilizar indistintamente un método u otro.

Los métodos de Wilson, NRTL y UNIQUAC son utilizados también para el cálculo de  $K_i$  basándose en modelos de coeficientes de actividad (ec. 3):

$$K_i = \frac{\gamma_i \cdot v_i^0}{P \cdot \phi_i} \quad (\text{ec. 3})$$

Donde  $v_i^0 = V \cdot P_i$  y  $\phi_i = 1$

V= Volumen total de la mezcla

$P_i$  = Presión parcial del componente i

Se emplean principalmente en sistemas con soluciones polares (altamente no ideales), donde la no idealidad procede fundamentalmente de asociaciones moleculares, no pueden estar cerca de su temperatura crítica. La fase vapor se trata como una solución regular, es decir en este caso la no linealidad procede de interacciones físicas moderadas. En la tabla 4.2 se presentan sus características.

**Tabla 4.2.** Características de modelos termodinámicos

CARACTERÍSTICA	MODELO TERMODINÁMICO		
	NRTL	WILSON	UNIQUAC
Modelo de coeficientes de actividad	X	X	X
Utiliza la ley de los gases ideales para modelar la fase vapor	X	X	X
Se debe trabajar a bajas presiones (menores de 10 bar)	X	X	X
Predice el equilibrio líquido-vapor	X	X	X
Predice el equilibrio líquido-líquido	X		X
Predice el comportamiento de soluciones líquidas no ideales	X	X	X
Se puede trabajar con componentes polares y no polares	X	X	X
No se puede trabajar con compuestos cerca de su temperatura crítica	X	X	X

Como en los procesos a modelar la gran mayoría de corrientes son líquidas se descartan los métodos especializados en gases, excepto para la simulación de la combustión del char en la planta de producción de fenoles en la que todos los productos son gases, en este caso se ha tomado el método de Redlich-Kwong-Soave. Salvo esta excepción para el resto de simulaciones se ha elegido el modelo NRTL al tratarse de soluciones polares.

#### 4.4. Diagrama de flujo

Es necesario plantear diagramas de flujo de cada proceso con los equipos disponibles en el programa.

Se van a plantear dos diagramas uno para configurar la planta de producción de fenoles y otro para la planta de obtención de furfural. Las dos opciones han

sido explicadas con detalle en el capítulo 3 del presente proyecto, señalando las condiciones en las que suelen darse cada tipo de proceso.

#### **4.4.1 Planta de fenoles**

En la figura 4.1 se muestra el primero de los diagramas creados en Aspen Plus para modelar el proceso de transformación de lignina a compuestos fenólicos. La primera etapa que se modela es el secado de la corriente de lignina. Este paso tiene lugar en un bloque flash donde se especifica la presión y el calor a aportar hasta conseguir la humedad requerida en la corriente de salida (inferior al 1%).

A continuación se modela la etapa de pirólisis rápida. Antes de elegir el reactor hay que conocer las características de todos los reactores que posee el programa para que el proceso a modelar se ajuste en la mayor medida a un proceso real. Los reactores que se disponen son:

- Reactor estequiométrico: se necesita especificar la conversión o la extensión de la reacción. Se usa para reactores donde la cinética es desconocida o no importante, pero sí se conoce la estequiometría y la conversión de la reacción.
- Reactor de rendimiento: hay que especificar el rendimiento de la reacción. Se usa para reactores donde la cinética es desconocida o no importante, pero sí se conoce una distribución del rendimiento.
- Reactor de equilibrio: REquil puede calcular el equilibrio de una sola fase química o simultáneas. REquil calcula el equilibrio químico mediante la resolución de ecuaciones estequiométricas y fase de equilibrio. [40]
- Reactor de equilibrio con minimización de la energía libre de Gibbs: modela equilibrios químicos y de fase mediante la minimización de la energía libre de Gibbs. Se usa para reactores en equilibrio químico y de fase simultáneo.
- Reactor continuo de tanque agitado: se usa para reactores continuos de tanque agitado con una, dos o tres fases, con reacciones controladas, , basadas en estequiometrías y cinéticas conocidas.

- Reactores de flujo pistón: se usa para reactores de flujo pistón con una, dos o tres fases, con reacciones controladas en cualquier fase, basadas en estequiometrias y cinéticas conocidas.
- Reactores *Batch*: se usa para reactores *batch* o *semi-batch* con una, dos o tres fases, con reacciones controladas, en cualquier fase, basadas en estequiometrias y cinéticas conocidas.

En esta etapa sólo se conocen la presión, la temperatura y los rendimientos de cada producto que se han estimado según publicaciones confidenciales por lo que se ha elegido un Reactor de rendimiento (**RYield**). En este equipo se introduce la corriente de lignina previamente precalentada, vapor y gases procedentes del proceso aguas abajo como agente gasificante. La corriente producto se lleva a un ciclón para eliminar partículas sólidas como char y cenizas. En esta etapa se ha elegido un bloque **separator** para simular el ciclón especificando para cada componente la fracción a separar. La corriente libre de partículas sólidas se enfría en un bloque **flash** y de esta forma se consigue condensar gran parte de la corriente dando lugar al conocido bio-oil. La fracción de gases no condensables se recirculan al reactor de pirólisis.

Una vez formado el bio-oil se trata con agua para separar la fracción orgánica. Esta etapa tiene lugar en un bloque **separator** donde se especifican la fracción de separación de cada componente según la solubilidad en agua de cada uno. La corriente orgánica se trata con NaOH en otro bloque **separator** donde se simula la disolución de compuestos fenólicos en esta base.

Finalmente la corriente rica en compuestos fenólicos se concentra en un bloque **Flash** especificado como un evaporador.

En este mismo diagrama de flujo se ha realizado la integración de calor de todo el proceso mediante corrientes de calor (líneas discontinuas del diagrama). La integración ha consistido básicamente en aprovechar el calor procedente de la combustión del char (simulada en otro modelo) para aportar el nivel térmico adecuado en la etapa de pirólisis, en el secado de lignina y en la concentración de la corriente fenólica.

Para la combustión de char se ha tomado como método termodinámico el Redlich-Kwong-Soave (RKS) caracterizado por ser apto para procesos gaseosos a alta temperatura. La combustión tiene lugar en un **reactor tipo**

**Gibbs** donde además de la presión y la temperatura se han identificado los posibles productos a obtener.

A continuación en la Tabla 4.3 se muestran todos los equipos y corrientes que aparecen en la planta, así como las etiquetas con las que son nombrados en el diagrama de flujo.

**Tabla 4.3.** Etiquetas de equipos y corrientes de la planta de fenoles

<b>EQUIPOS</b>	<b>CORRIENTES ENTRADA</b>	<b>CORRIENTES SALIDA</b>
<b>DRYER:</b> Secado lignina	<b>LIGNIN:</b> Lignina	<b>11:</b> Entrada Heater 1 <b>12:</b> Salida vapor
<b>PIROLISI:</b> Reactor pirólisis	<b>01:</b> Entrada lignina <b>GAS:</b> Entrada gas <b>STEAM:</b> Entrada vapor	<b>02:</b> Entrada ciclón
<b>CYCLONE:</b> Ciclon	<b>02:</b> Entrada ciclon	<b>03:</b> Entrada Qcooler <b>CHAR COMB:</b> Entrada combustion
<b>QCOOLER:</b> Quench Cooler	<b>03:</b> Entrada Qcooler	<b>04:</b> Salida gases <b>BIO-OIL:</b> salida Qcooler
<b>EXTRACT1:</b> Extraccion con agua	<b>13:</b> Entrada bio-oil <b>14:</b> Entrada agua	<b>ORGANIC:</b> Entrada Pump 4 <b>06:</b> Salida Extract 1
<b>EXTRACT2:</b> Extraccion con NaOH	<b>19:</b> Entrada NaOH <b>15:</b> Entrada extract2	<b>NEUTRAL:</b> Salida Neutra <b>PHENOLS:</b> Entrada pump 6
<b>EVAPORAT:</b> Evaporador	<b>16:</b> Entrada evaporador	<b>WATPHASE:</b> Fase vapor <b>PHEFRACT:</b> Fraccion fenólica
<b>H1:</b> Intercambiador de calor	<b>11:</b> Entrada H1	<b>01:</b> Entrada pirólisis
<b>H2:</b> Intercambiador de calor	<b>WAT:</b> Entrada agua	<b>STEAM:</b> Entrada pirólisis
<b>SP1:</b> Separador 1	<b>QCOMB:</b> Calor combustion	<b>Q2:</b> Entrada calor pirólisis <b>Q4:</b> Entrada calor separador 2
<b>SP2:</b> Separador 2	<b>Q4:</b> Ent. calor separador 4	<b>Q5:</b> Entrada calor evaporador <b>Q6:</b> Entrada calor separador 4
<b>SP3:</b> Separador 3	<b>04:</b> Salida gases	<b>GAS:</b> Entrada gas
		<b>20:</b> Purga
<b>SP4:</b> Separador 4	<b>Q6:</b> Entrada calor separador 4	<b>Q8:</b> Entrada calor separador 5 <b>Q9:</b> Entrada calor secado
<b>SP5:</b> Separador 5	<b>Q8:</b> Entrada calor separador 5	<b>Q14:</b> Entrada calor H1 <b>Q11:</b> Entrada calor H2
<b>P1:</b> Bomba 1	<b>BIO-OIL:</b> salida Qcooler	<b>13:</b> Entrada bio-oil
<b>P2:</b> Bomba 2	<b>14:</b> Entrada agua	<b>WATER:</b> Entrada agua P2
<b>P4:</b> Bomba 4	<b>ORGANIC:</b> Entrada Pump 4	<b>15:</b> Entrada extract2
<b>P6:</b> Bomba 6	<b>PHENOLS:</b> Entrada pump 6	<b>16:</b> Entrada evaporador
<b>P7:</b> Bomba 7	<b>PHEFRACT:</b> Fraccion fenólica	<b>17:</b> Salida bomba 7

<b>COMBUSTION CHAR</b>		
<b>COMBUST:</b> Reactor combustión	<b>4:</b> Entrada reactor	<b>GAS:</b> Salida gas combustion
<b>H2:</b> Intercambiador de calor	<b>3:</b> Entrada intercambiador	<b>4:</b> Entrada reactor
<b>M1:</b> Mezclador	<b>AIR:</b> Entrada aire <b>CHAR:</b> Entrada char	<b>3:</b> Entrada intercambiador



#### 4.4.2. Planta de furfural

En este diagrama se representa la planta de transformación azúcares C5 a furfural. La corriente de alimentación de azúcares C5 procede de la planta de hidrólisis enzimática. Esta corriente se acondiciona para la entrada al reactor. El acondicionamiento consiste primero en la impulsión con una bomba (**bloque *pump***) y un calentamiento previo en un bloque ***heater***.

Por otra parte esta misma corriente se mezcla en un bloque ***mixer*** con una solución de ácido sulfúrico diluido ya preparada para ser llevada al reactor. En este caso se ha elegido un reactor estequiométrico (***Rstoic***) ya que se conoce la estequiometría de la reacción. Para mantener el nivel térmico de transformación se introduce también vapor. Este vapor no está en contacto con el medio de reacción si no que se ubicaría en torno al mismo en una camisa exterior del reactor.

A continuación se modela la etapa de expansión y separación de condensados. Se ha simulado tomando un bloque ***heater*** para modelar el enfriamiento y otro bloque ***separator*** para modelar la separación de condensados, principalmente agua, y recircularla aguas arriba para conseguir el grado de disolución del ácido.

La etapa de extracción de furfural con tolueno se modela en un bloque ***separator*** en el que se han especificado las fracciones de separación de cada sustancia. La corriente residual resultante de la extracción es filtrada para eliminar residuos sólidos en un bloque ***separator***.

En una etapa final ambos compuestos se separan por destilación en una **torre DSTW**. La corriente de tolueno obtenida por cabeza se recircula a la entrada de tolueno fresco.

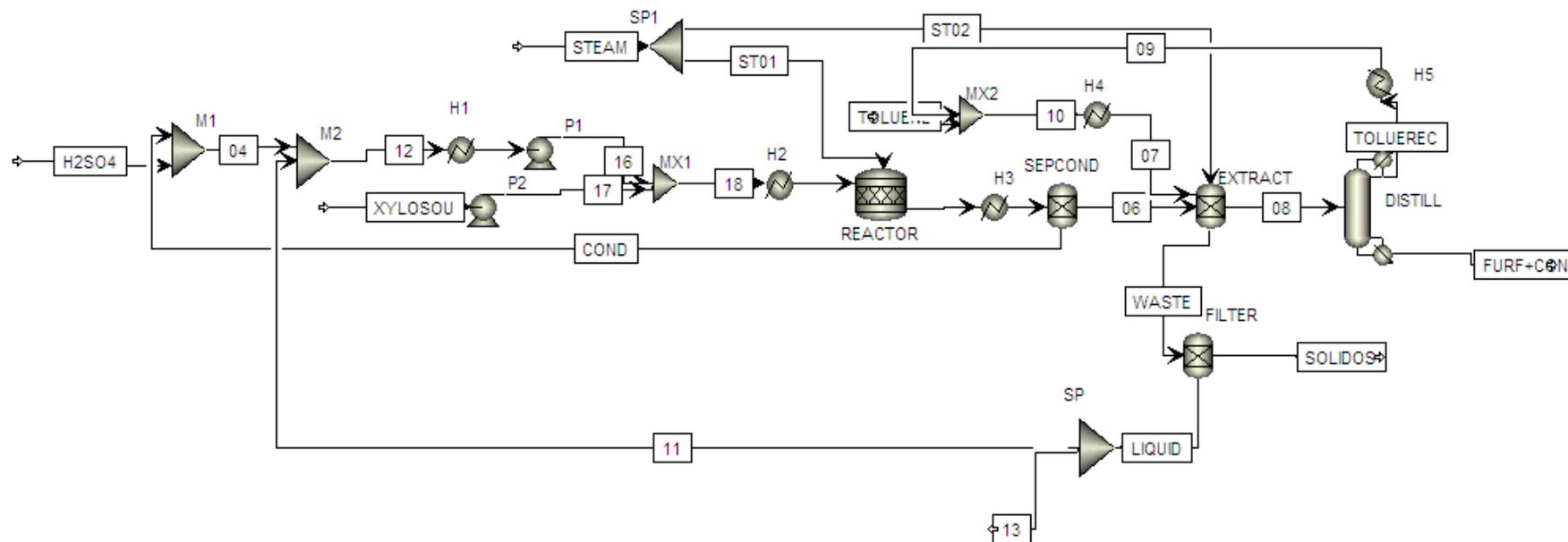
A continuación en la tabla 4.4 se muestran todos los equipos y corrientes que aparecen en la planta, así como las etiquetas con las que son nombrados en el diagrama de flujo.

**Tabla 4.4.** Etiquetas de corrientes equipos de la planta de furfural

<b>EQUIPOS</b>	<b>CORRIENTES ENTRADA</b>	<b>CORRIENTES SALIDA</b>
<b>M1:</b> Mezclador 1	<b>COND:</b> Entrada mezclador 1 <b>H2SO4:</b> Entrada ac. Sulfúrico	<b>04:</b> Entrada Mezclador 2
<b>M2:</b> Mezclador 2	<b>11:</b> Entrada condensados <b>04:</b> Entrada mezclador 2	<b>02:</b> Entrada ciclón
<b>MX1:</b> Mezclador X1	<b>16:</b> Entrada MX1 ácido <b>17:</b> Entrada MX1 azúcares	<b>18:</b> Entrada heater 2
<b>MX2:</b> Mezclador X2	<b>09:</b> Entrada MX2 recirculacion <b>TOLUENE:</b> Entrada tolueno	<b>10:</b> Entrada heater 4
<b>SP:</b> Divisor	<b>STEAM:</b> Entrada vapor	<b>ST02:</b> Entrada vapor extraccion <b>ST01:</b> Entrada vapor reactor
<b>SP1:</b> Divisor 1	<b>LIQUID:</b> Entrada SP	<b>11:</b> Entrada mezclador 2 <b>13:</b> Salida divisor
<b>H1:</b> Intercambiador de calor 1	<b>12:</b> Entrada heater 1	<b>15:</b> Entrada heater 2
<b>H2:</b> Intercambiador de calor 2	<b>18:</b> Entrada heater 2	<b>19:</b> Entrada reactor
<b>H3:</b> Intercambiador de calor 3	<b>02:</b> Entrada heater 3	<b>05:</b> Entrada sepcond
<b>H4:</b> Intercambiador de calor 4	<b>10:</b> Entrada heater 4	<b>07:</b> Entrada extraccion
<b>H5:</b> Intercambiador de calor 5	<b>TOLUEREC:</b> Entrada heater 5	<b>09:</b> Entrada mezclador X2
<b>REACTOR:</b> Reactor	<b>19:</b> Entrada reactor <b>ST01:</b> Entrada vapor reactor	<b>02:</b> Entrada heater 3
<b>SEPCOND:</b> Separacion condensados	<b>05:</b> Entrada sepcond	<b>06:</b> Entrada extraccion <b>COND:</b> Entrada mezclador 1
<b>EXTRACT:</b> Torre de extracción	<b>ST02:</b> Entrada vapor extraccion <b>07:</b> Entrada tolueno <b>06:</b> Entrada extraccion	<b>08:</b> Entrada torre destilación <b>WASTE:</b> Entrada filtro
<b>DISTILL:</b> Torre destilacion	<b>08:</b> Entrada torre destilación	<b>TOLUEREC:</b> Entrada heater 5 <b>FURFU+CON:</b> Salida furfural
<b>FILTER:</b> Filtro	<b>WASTE:</b> Entrada filtro	<b>SOLIDOS:</b> Salida sólida <b>LIQUID:</b> Entrada SP



Figura 4.2. Diagrama de flujo de la planta de furfural



## **4.5 Introducción de datos**

Después de haber dibujado el diagrama de flujo del proceso, con todas las corrientes y equipos que lo constituyen, hay que introducir los datos de los distintos equipos.

### **4.5.1 Planta de fenoles**

Para poder simular el proceso es necesario introducir las condiciones de trabajo y especificaciones de los distintos equipos de los que consta el proceso.

#### **4.5.1.1 Secado**

Este equipo se utiliza para eliminar la humedad inicial contenida en la corriente de alimentación de lignina. La cantidad de calor a aportar para alcanzar el grado de humedad requerido se determina por especificación de diseño que se explicará en otro apartado. Las especificaciones para este equipo son la presión (1 bar) y el calor aportado (30.000 cal/s).

#### **4.5.1.2 Reactor de pirólisis**

Para la simulación de la etapa de pirólisis rápida se optó según el capítulo anterior por un reactor de lecho fluido circulante. El modelo elegido en el programa es un reactor de rendimiento (RYield). Las especificaciones necesarias para este equipo son la presión y temperatura (1 bar, 450°C) y la fracción que se desea obtener de cada producto. En este caso el calor a aportar necesario para la transformación procede de la combustión del char.

Aunque no se trata de una especificación de este tipo de reactores se ha determinado el caudal de gas gasificante necesario para mantener la circulación del lecho. Para tal hecho se ha usado la corriente de gases no condensables procedente de la etapa de condensación de bio-oil y otra corriente de vapor, ambas representadas en el diagrama de flujo.

#### **4.5.1.3 Ciclón**

En este equipo se simula la eliminación de partículas sólidas como cenizas, sales y char. Se ha utilizado un bloque *separator* en el que se ha especificado una fracción de eliminación de 99% para el char y 50% para las sales. Las partículas eliminadas salen por la corriente de fondo (CHARCOMB) y se dirigen a la etapa de combustión mientras el resto de componentes son llevados a la etapa de condensación.

#### **4.5.1.4 Tren de enfriamiento**

Se ha elegido para modelar esta etapa un bloque flash. Este equipo se puede usar para simular varios procesos y en este caso se trata de un proceso de enfriamiento. Sólo se ha especificado la presión y la temperatura de la corriente de salida (1 bar, 25°C) y según el equilibrio líquido/vapor alcanzado en estas condiciones se obtendrá más o menos condensado. Los gases no condensables se recirculan al reactor de pirólisis tal y como se ha descrito en líneas anteriores y la corriente líquida de fondo se dirige a la etapa de extracción.

#### **4.5.1.5 Extracción con agua**

En esta etapa se quiere eliminar el resto de sales, azúcares no convertidos y cenizas, por ello se elige una extracción con agua para asegurar la disolución de estas sustancias (alcoholes, ácido acético, fórmico, etc) mientras los compuestos orgánicos debido a su baja polaridad permanecen insolubles en medio acuoso. Esta característica es la que permite la separación. Para modelar esta etapa en principio se probó con varios bloques: torre de destilación DSTW, RADFRAC, EXTRACT pero en todos los casos la simulación daba errores debido a la presencia de impurezas sólidas y en los dos últimos casos no se disponía de datos suficientes para especificar completamente la torre. Por este motivo se optó por un bloque *separator*, aunque no se trate de la opción más real pero si se puede aproximar a la realidad. Las especificaciones en este caso fueron las solubilidades (o fracción

de separación) en medio acuoso de cada compuesto. Se han considerado totalmente solubles todas las sustancias excepto los compuestos orgánicos.

#### **4.5.1.6 Extracción con NaOH**

Para el modelado de esta etapa se han seguido las mismas pautas que en la etapa anterior. En este caso se usa como disolvente una solución diluida de NaOH. El caudal del NaOH se ha estimado por especificación de diseño. Al mezclar esta solución con la corriente orgánica los compuestos fenólicos se disuelven debido al pH básico. De esta forma se consigue separar los compuestos neutros (derivados carbonilos y del furfural) y los fenólicos. Se ha especificado una fracción de separación del 80% para compuestos fenólicos.

#### **4.5.1.7 Evaporador**

En esta etapa se quiere eliminar agua de la corriente de fenoles hasta conseguir una concentración del 80%. Para este proceso se ha elegido nuevamente un bloque flash especificado como un evaporador, es decir se introduce la presión (1bar) y un valor aproximado de calor a aportar. Este valor más tarde se ajusta con una especificación de diseño.

De forma similar que en el reactor de pirólisis se aprovecha parte de del calor cedido en la combustión de char.

#### **4.5.1.8 Intercambiadores de calor**

En el diagrama de flujo se visualizan dos intercambiadores de calor H1 y H2. Ambos se usan para precalentar en un caso la corriente de lignina justo antes de su entrada en el reactor de pirólisis y otro para precalentar vapor. Su especificación consiste en indicar la presión y la temperatura de la corriente de salida.

#### **4.5.1.9 Bombas**

Se han modelado un total de 6 bombas. El objetivo de su modelado no es otro que aproximar el consumo eléctrico para más adelante realizar los cálculos económicos ya que en esta planta todas las operaciones tienen lugar a presión

atmosférica. Para este tipo de bloque es necesario indicar la presión de la corriente de salida y la eficiencia. En todos los casos se ha supuesto bombas de comportamiento ideal.

#### **4.5.1.10 Divisores de corriente**

Como su nombre indica estos equipos se usan para separar cualquier tipo de corrientes, ya se trate de flujo de energía, masa o trabajo. En esta planta se han utilizado para los dos primeros usos. Se especifican indicando la fracción de distribución de la corriente de entrada a otras corrientes. Generalmente se introduce un valor aproximado y después se ajusta con una especificación de diseño.

#### **4.5.1.11 Combustor**

En el reactor de Gibbs se han especificado las condiciones de operación ( $p=1$  bar y  $t=900^{\circ}\text{C}$ ) y se han identificado los productos por equilibrio según las condiciones dadas. Los productos que se obtienen en este caso son  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{H}_2$ . Por otra parte también se ha calculado el calor liberado durante la combustión por especificación de diseño. Esta energía se utilizará en los procesos endotérmicos de toda la planta.

### **4.5.2 Planta de furfural**

De forma análoga para la simulación de la planta de furfural es necesario introducir las condiciones de trabajo y especificaciones de los distintos equipos de los que consta cada proceso.

#### **4.5.2.1 Reactor**

Para la transformación de azúcares C5 a furfural se ha elegido un reactor Rstoic. En este equipo es necesario definir la presión y temperatura (60 bar y  $220^{\circ}\text{C}$ ) e introducir la reacción y su rendimiento. En este caso el rendimiento es del 70% según fuentes consultadas y la reacción:



#### **4.5.2.2 Expansión y separación de condensados**

Como en todo proceso de expansión al disminuir la presión se produce simultáneamente un enfriamiento y en este caso una posible condensación, por ello se ha elegido para modelar simultáneamente la expansión y el enfriamiento un heater especificado con 1 bar y 60°C. Para separar los condensados (agua principalmente) se ha especificado en el separator la fracción de separación mediante especificación de diseño para diluir el ácido sulfúrico.

#### **4.5.2.3 Extracción**

Después de la etapa de expansión, una vez ya formado furfural se pone en contacto con tolueno, extractivo inmiscible, para separarlo del resto de compuestos. Esto se consigue por la gran solubilidad que posee el furfural en este tipo de disolventes. Para esta operación se ha elegido nuevamente un bloque *separator* en el que se especifica que todo el furfural pasa a formar parte de la corriente de tolueno mientras el resto de componentes permanecen en la solución original.

#### **4.5.2.4 Torre de destilación**

En este equipo tiene lugar la separación entre furfural y tolueno. Se ha elegido una torre de destilación modelo DSTW que requiere la especificación de los compuestos clave ligero y pesado, la presión del condensador y los fondos junto con la recuperación de los compuestos en el destilado. En este caso los valores de las purezas son 0,999 mol para el tolueno (compuesto más ligero, t ebullición: 110°C) y 0,001 para el furfural (t ebullición: 160°C). Las presiones especificadas en el hervidor y condensador es de 1 bar (se considerado condensación total), la relación de reflujo usada es 1,2 y el número de platos es de 38. Según estas especificaciones se obtiene el tolueno por cabeza y furfural por fondo ambos con una concentración del 99%.

#### **4.5.2.5 Filtrado**

En esta etapa se eliminan los componentes sólidos de la corriente procedente de la extracción para recircularla nuevamente a la entrada de ácido sulfúrico y ajustar así el grado de disolución. Se ha elegido un bloque *separator* para modelar este proceso.

#### **4.5.2.6 Mezcladores**

En el diagrama de flujo se visualizan 4 bloques de este tipo (M1, M2, MX1, MX2). Su función es unir dos ó más corrientes en una sola, es decir que representan un tanque de una planta real. Apenas requieren especificación alguna sólo basta con conectar las corrientes de entrada y de salida.

#### **4.5.2.7 Intercambiadores de calor**

En este tipo de bloques sólo hay que especificar la presión y la temperatura de la corriente de salida, en algunos casos se utilizan para precalentar una corriente (H2, H4) y otras para enfriarla (H3, H5).

#### **4.5.2.8 Bombas**

En este caso se utilizan bombas en el proceso para impulsar tanto la disolución de ácido sulfúrico como la alimentación de azúcares. Ambas corrientes deben llegar al reactor con una presión cercana a los 60 bares. Para definir las se indica la presión de salida y la eficiencia que en este caso se considera que funciona de forma ideal.

#### **4.5.2.9 Divisores de corriente**

A diferencia de los mezcladores en este caso si se requiere especificar la fracción de separación. En el diagrama de flujo se observan dos divisores, uno para distribuir el vapor entre el reactor y la extracción; y otro para purgar la corriente líquida procedente del filtro.

## **4.6 Especificaciones de diseño**

Para hacer una especificación de diseño hay que definir las variables que se van a utilizar. Se trata de imponer una especificación y obtener el valor de la variable manipulada para el que se cumple dicha especificación. A continuación se van describir las especificaciones de diseño (SD) usadas en cada planta.

### **4.6.1 Planta de fenoles**

#### **4.6.1.1 Dryer**

Esta SD está vinculada al grado de humedad en la lignina de entrada que no debe ser superior al 1%. En este caso la variable manipulada es el calor a aportar en el secador en cal/s.

#### **4.6.1.2 Duty**

En el evaporador de la solución final de fenoles se quiere conseguir una concentración del 80%. Esta especificación se logra con una SD variando el calor a aportar en el tanque flash.

#### **4.6.1.3 NaOH**

El objetivo de SD es indicar el caudal de NaOH necesario conociendo la relación entre la solución de NaOH a aportar y el caudal de corriente orgánica total 0,4:1. En este caso la variable manipulada es el caudal de NaOH.

#### **4.6.1.4 QDryer**

Esta SD es considerada para la integración energética de la planta, es decir aprovechar el calor generado en la combustión de char para cederlo en otros procesos como en este caso es el secado de lignina. Para ello se define que el calor que sale (no necesario) del secador sea nulo, siendo la variable manipulada la fracción de separación del bloque SP4.

#### **4.6.1.5 Qevap**

Esta SD es equivalente a la anterior pero se aplica para conocer la fracción de separación del bloque SP4 siempre que el calor que sale del evaporador sea nulo.

#### **4.6.1.6 QH2**

El mismo procedimiento anterior también se puede aplicar en intercambiadores de calor. En este caso se determina la fracción de separación del bloque SP5 para anular el calor de salida de H2.

#### **4.6.1.7 Qpiro**

En este caso se aplica el mismo método de operación para cubrir la demanda de energía en el reactor de pirólisis. La variable manipulada es la fracción de separación del bloque SP1.

#### **4.6.1.8 Water 1**

Con esta SD se cumple la relación 1:1 entre el flujo másico de bio-oil y el flujo másico de agua a aportar en la primera extracción. La variable manipulada es el caudal de agua.

### **4.6.2 Planta de furfural**

#### **4.6.2.1 Diswat**

Como se ha descrito anteriormente el ácido sulfúrico usado en esta planta debe estar muy diluido. Parte del agua de dilución procede de la condensación que tiene lugar después de la expansión. Con esta SD se consigue diluir al 2% el ácido sulfúrico.

#### **4.6.2.2 H2SO4**

Con esta SD se cumple la relación 1:1 entre el flujo másico de la disolución de H2SO4 y el flujo másico total de la corriente de azúcares. La variable manipulada es caudal de este mismo ácido.

#### **4.6.2.3 Steam**

Esta SD es necesaria para determinar el caudal de vapor de agua necesario en toda la planta. Este caudal viene dado por la relación vapor/furfural que debe ser inferior a 20.

#### 4.6.2.4 Toluene

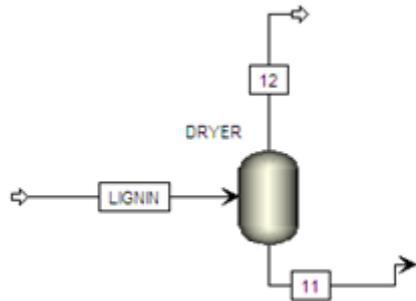
De forma similar se define también esta SD. En este caso la relación a verificar es tolueno/furfural=4. La variable manipulada es el caudal de tolueno.

### 4.7 Resultados de la simulación de la planta de fenoles

Una vez introducidos todos los datos de cada equipo e impuestas las especificaciones de diseño, se pueden obtener los resultados finales de la simulación. Los resultados de las corrientes del proceso, se presentan por secciones.

#### 4.7.1 Eliminación de la humedad inicial

Esta sección se compone sólo de un tanque flash.



**Figura 4.3.** Tanque flash

**Tabla 4.5.** Resultado de las corrientes de la etapa de eliminación de la humedad

Streams	11	12	LIGNIN
Mole Flow kmol/hr	1,13	12,13	13,26
Mass Flow kg/hr	1.436,41	218,59	1.655,00
H <sub>2</sub> O	15,10	218,57	233,68
Glucose	0,93	0,00	0,93
Xilose	2,07	0,00	2,07
Arabinose	0,29	0,00	0,29
Xylan	0,97	0,00	0,97

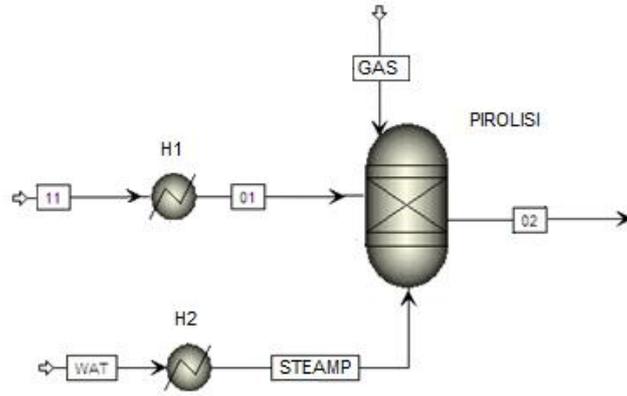
Arabinan	0,14	0,00	0,14
Cellulose	10,43	0,00	10,43
CaSO <sub>4</sub>	0,28	0,00	0,28
CaPO <sub>4</sub>	0,28	0,00	0,28
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,21	0,00	0,21
SiO <sub>2</sub>	0,83	0,00	0,83
Lignin	1.375,82	0,00	1.375,82
Lignin Soluble	3,07	0,00	3,07
Sugar Soluble	0,28	0,00	0,28
Protein	0,97	0,00	0,97
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	22,30	0,01	22,31
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,91	0,00	1,91
CH <sub>3</sub> COONa	0,53	0,00	0,53

**Tabla 4.6. Resultados del Flash 1**

<b>Flash</b>	
Temperature C	108,00
Pressure bar	0,99
Vapor Frac	0,91
Heat duty cal/s	34.230,39

#### **4.7.2 Pirólisis y precalentamiento de la alimentación al reactor**

En esta sección se presenta tanto los flujos de las corrientes que intervienen en la pirólisis como los resultados obtenidos en el intercambiador de calor y el reactor.



**Figura 4.4.** Pirólisis y precalentamientos

**Tabla 4.7.** Flujos másicos en la etapa de pirólisis

Stream	1	11	WAT	STEAMP	GAS	2
Temperature C	400,00	108,10	25,00	120,00	25,00	450,00
Pressure bar	0,99	0,99	1,00	1,00	0,99	0,99
Mole Flow kmol/hr	1,13		21,19		7,47	27,58
Mass Flow kg/hr	1.436,41		381,77		192,80	2.010,98
H <sub>2</sub> O	15,10		381,77		2,52	196,55
Glucose	0,93		0,00		0,00	0,93
Xylose	2,07		0,00		0,00	2,07
Arabinose	0,29		0,00		0,00	0,29
Xylan	0,97		0,00		0,00	0,97
Arabinan	0,14		0,00		0,00	0,14
Cellulose	10,43		0,00		0,00	10,43
CaSO <sub>4</sub>	0,28		0,00		0,00	0,28
CaPO <sub>4</sub>	0,28		0,00		0,00	0,28
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,21		0,00		0,00	0,21
SiO <sub>2</sub>	0,83		0,00		0,00	0,83
Lignin	1.375,82		0,00		0,00	0,00
Lignin soluble	3,07		0,00		0,00	3,07
Sugar soluble	0,28		0,00		0,00	0,28

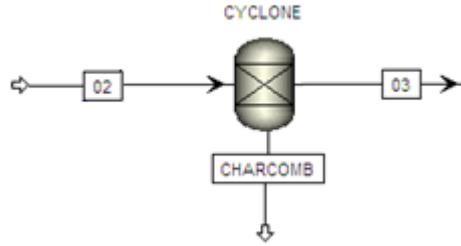
Protein	0,97	0,00	0,00	0,97
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	22,30	0,00	0,00	22,30
H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	0,00	0,00	0,00	0,00
Acetic acid	0,00	0,00	0,67	98,28
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,91	0,00	0,00	1,91
Methanol	0,00	0,00	4,53	58,97
CO <sub>2</sub>	0,00	0,00	52,82	58,97
CH <sub>4</sub>	0,00	0,00	53,06	58,97
CH <sub>3</sub> COONa	0,53	0,00	0,00	0,53
Guaiacol	0,00	0,00	0,01	157,24
Ethylphenol	0,00	0,00	0,00	58,97
Cresol	0,00	0,00	0,00	19,66
Catechol	0,00	0,00	0,00	58,97
Acetone	0,00	0,00	8,63	39,31
Vanillin	0,00	0,00	0,00	294,82
CO	0,00	0,00	70,56	78,62
Char	0,00	0,00	0,00	786,20

**Tabla 4.8.** Resultados del reactor de pirólisis e intercambiadores H1 y H2

Equipment	H1	H2	PIROLISI
Temperature C	400,00	120,00	450,00
Pressure bar	0,99	1,00	0,99
Vapor Frac	0,96	1,00	1,00
Heat duty cal/s	57.224,56	66.199,56	1.188.772,45

#### 4.7.3 Eliminación de partículas sólidas

En esta sección se presenta los flujos de las corrientes que entran y salen del ciclón y los resultados obtenidos referentes al equipo.



**Figura 4.5.** Ciclón

**Tabla 4.9.** Flujos máxicos en el ciclón

Stream	2	3	CHARCOMB
Mass Flow kg/hr	2.010,98	1.230,63	780,36
H <sub>2</sub> O	196,55	196,55	0,00
Glucose	0,93	0,93	0,00
Xylose	2,07	2,07	0,00
Arabinose	0,29	0,29	0,00
Xylan	0,97	0,97	0,00
Arabinan	0,14	0,14	0,00
Cellulose	10,43	10,43	0,00
CaSO <sub>4</sub>	0,28	0,14	0,14
CaPO <sub>4</sub>	0,28	0,14	0,14
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,21	0,11	0,11
SiO <sub>2</sub>	0,83	0,42	0,42
Lignin	0,00	0,00	0,00
Lignin soluble	3,07	3,07	0,00
Sugar soluble	0,28	0,28	0,00
Protein	0,97	0,97	0,00
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	22,30	22,30	0,00
Acetic acid	98,28	98,28	0,00
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,91	0,95	0,95
Methanol	58,97	58,97	0,00
CO <sub>2</sub>	58,97	58,97	0,00

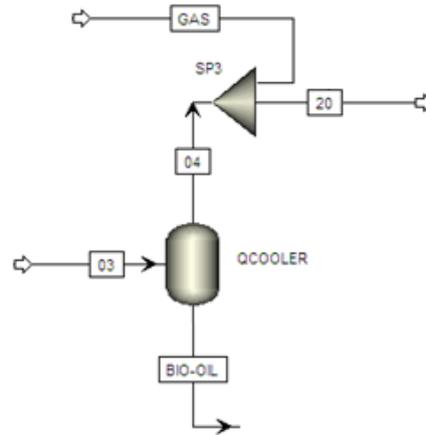
CH <sub>4</sub>	58,97	58,97	0,00
CH <sub>3</sub> COONa	0,53	0,27	0,27
Guaiacol	157,24	157,24	0,00
Ethylphenol	58,97	58,97	0,00
Cresol	19,66	19,66	0,00
Catechol	58,97	58,97	0,00
Acetone	39,31	39,31	0,00
Vanillin	294,82	294,82	0,00
CO	78,62	78,62	0,00
Char	786,20	7,86	778,34

**Tabla 4.10.** Resultados del ciclón

<b>Cyclone</b>			
<b>Stream</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>CHARCOMB</b>
Temperature C	450,00		
Pressure bar	1,00		
Vapor Frac	1,00	1,00	0,00
Heat duty cal/s	0,27		

#### 4.7.4 Condensación

A continuación se presenta los resultados y los flujos de entrada y salida en la sección de enfriamiento de gases.



**Figura 4.6.** Tren de enfriamiento y purga

**Tabla 4.11.** Flujos másicos de la etapa de enfriamiento

Stream	3	4	BIO-OIL	GAS	20
<b>Mass Flow kg/hr</b>	1.230,63	214,22	1.016,40	192,80	21,42
H <sub>2</sub> O	196,55	2,80	193,75	2,52	0,28
Glucose	0,93	0,00	0,93	0,00	0,00
Xylose	2,07	0,00	2,07	0,00	0,00
Arabinose	0,29	0,00	0,29	0,00	0,00
Xylan	0,97	0,00	0,97	0,00	0,00
Arabinan	0,14	0,00	0,14	0,00	0,00
Cellulose	10,43	0,00	10,43	0,00	0,00
CaSO <sub>4</sub>	0,14	0,00	0,14	0,00	0,00
CaPO <sub>4</sub>	0,14	0,00	0,14	0,00	0,00
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,11	0,00	0,11	0,00	0,00
SiO <sub>2</sub>	0,42	0,00	0,42	0,00	0,00
Lignin soluble	3,07	0,00	3,07	0,00	0,00
Sugar soluble	0,28	0,00	0,28	0,00	0,00
Protein	0,97	0,00	0,97	0,00	0,00
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	22,30	0,00	22,30	0,00	0,00
Acetic acid	98,28	0,75	97,53	0,67	0,08

Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,95	0,00	0,95	0,00	0,00
Methanol	58,97	5,03	53,94	4,53	0,50
CO <sub>2</sub>	58,97	58,68	0,28	52,82	5,87
CH <sub>4</sub>	58,97	58,96	0,01	53,06	5,90
CH <sub>3</sub> COONa	0,27	0,00	0,27	0,00	0,00
Guaiacol	157,24	0,01	157,23	0,01	0,00
Ethylphenol	58,97	0,00	58,96	0,00	0,00
Cresol	19,66	0,00	19,65	0,00	0,00
Catechol	58,97	0,00	58,96	0,00	0,00
Acetone	39,31	9,59	29,72	8,63	0,96
Vanillin	294,82	0,00	294,82	0,00	0,00
CO	78,62	78,40	0,22	70,56	7,84
Char	7,86	0,00	7,86	0,00	0,00

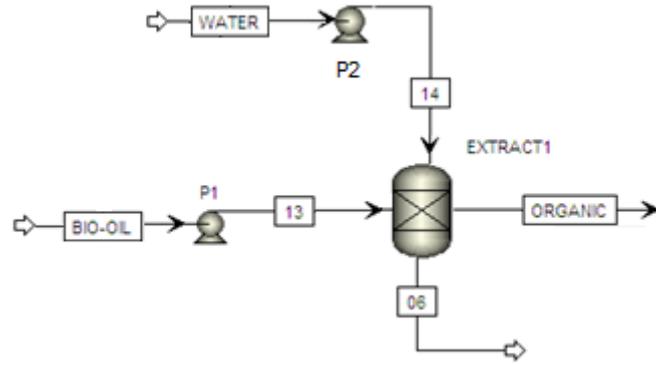
**Tabla 4.12.** Resultados en flash y purga

Equipment	QCOOLER	PURGE
Temperature C	450,00	25,00
Pressure bar	0,99	0,99
Vapor Frac	1,00	1,00
Heat duty cal/s	-121.258,00	

#### 4.7.5 Extracción con agua

En esta sección se exponen los resultados y flujos másicos que intervienen en la extracción de sustancias no deseables usando agua como disolvente.

Las bombas que aparecen en la figura se representan como equipo de impulsión para conocer el consumo eléctrico a efectos del análisis económico que se detallará más adelante.



**Figura 4.7.** Extracción con agua

**Tabla 4.13.** Flujos máxicos de la extracción

Stream	BIO-OIL	WATER	6	ORGANIC
Mass Flow kg/hr	1.016,40	1.008,54	1.378,53	646,41
H <sub>2</sub> O	193,75	1.008,54	1.082,07	120,23
Glucose	0,93	0,00	0,93	0,00
Xylose	2,07	0,00	2,07	0,00
Arabinose	0,29	0,00	0,29	0,00
Xylan	0,97	0,00	0,00	0,97
Arabinan	0,14	0,00	0,00	0,14
Cellulose	10,43	0,00	0,00	10,43
CaSO <sub>4</sub>	0,14	0,00	0,00	0,14
CaPO <sub>4</sub>	0,14	0,00	0,00	0,14
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,11	0,00	0,00	0,11
SiO <sub>2</sub>	0,42	0,00	0,00	0,42
Lignin soluble	3,07	0,00	0,00	3,07
Sugar soluble	0,28	0,00	0,00	0,28
Protein	0,97	0,00	0,00	0,97
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	22,30	0,00	22,30	0,00
Acetic acid	97,53	0,00	97,53	0,00
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,95	0,00	0,00	0,95

Methanol	53,94	0,00	53,94	0,00
CO <sub>2</sub>	0,28	0,00	0,28	0,00
CH <sub>4</sub>	0,01	0,00	0,01	0,00
CH <sub>3</sub> COONa	0,27	0,00	0,00	0,27
Guaiacol	157,23	0,00	18,55	138,68
Ethylphenol	58,96	0,00	2,59	56,37
Cresol	19,65	0,00	0,30	19,36
Catechol	58,96	0,00	2,59	56,37
Acetone	29,72	0,00	29,72	0,00
Vanillin	294,82	0,00	65,16	229,67
CO	0,22	0,00	0,22	0,00
Char	7,86	0,00	0,00	7,86

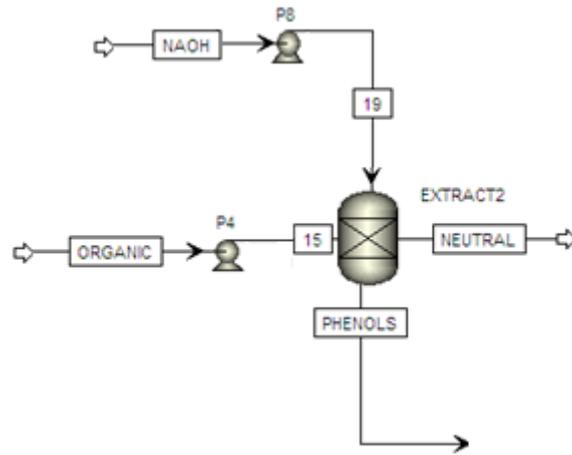
**Tabla 4.14.** Resultados de los equipos Extract, P1 y P2

Equipment	EXTRACTION
Temperature C	25,00
Pressure bar	1,00
Vapor Frac	0,00
Heat duty cal/s	-49,48

Equipment	PUMP 1	PUMP 2
Brake power, W	0,33	0,37

#### 4.7.6 Extracción con NaOH

En esta sección se exponen los resultados y flujos másicos que intervienen en la extracción de compuestos fenólicos usando NaOH como disolvente.



**Figura 4.8.** Extracción con NaOH

**Tabla 4.15.** Flujos másicos de la extracción con NaOH

Stream	NAOH	ORGANIC	PHENOLS	NEUTRAL
<b>Mass Flow kg/hr</b>	1.597,02	646,41	1.831,43	412,00
H <sub>2</sub> O	1.533,75	120,23	1.459,68	194,30
Xylan	0,00	0,97	0,00	0,97
Arabinan	0,00	0,14	0,00	0,14
Cellulose	0,00	10,43	0,00	10,43
CaSO <sub>4</sub>	0,00	0,14	0,00	0,14
CaPO <sub>4</sub>	0,00	0,14	0,00	0,14
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,00	0,11	0,00	0,11
SiO <sub>2</sub>	0,00	0,42	0,00	0,42
Lignin soluble	0,00	3,07	0,00	3,07
Sugar soluble	0,00	0,28	0,00	0,28
Protein	0,00	0,97	0,00	0,97
NaOH	63,27	0,00	63,27	0,00
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,00	0,95	0,00	0,95
CH <sub>3</sub> COONa	0,00	0,27	0,00	0,27
Guaiacol	0,00	138,68	110,94	27,74
Ethylphenol	0,00	56,37	45,10	11,27
Cresol	0,00	19,36	15,49	3,87

Catechol	0,00	56,37	45,10	11,27
Acetone	0,00	0,00	0,00	0,00
Vanillin	0,00	229,67	91,87	137,80
Char	0,00	7,86	0,00	7,86

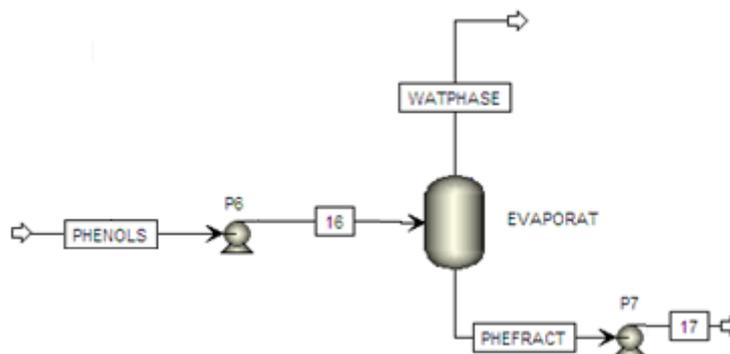
**Tabla 4.16.** Resultados de los equipos Extract 2, P4 y P8

Equipment	EXTRACTION
Temperature C	25,00
Pressure bar	0,99
Vapor Frac	0,00
Heat duty cal/s	0,11

Equipment	PUMP 4	PUMP 8
Brake power, W	0,21	0,57

#### 4.7.7. Concentración del producto

A continuación se presentan los resultados y flujos de corrientes que intervienen en la etapa de concentración de fenoles.



**Figura 4.9.** Concentración de fenoles

**Tabla 4.17.** Flujos máxicos durante la concentración de fenoles

Stream	PHENOLS	WATPHASE	PHEFRACT
Mass Flow kg/hr	1.831,43	1.443,42	388,02
H <sub>2</sub> O	1.459,68	1.383,18	76,50
NaOH	63,27	0,01	63,26
Guaiacol	110,94	39,42	71,52
Ethylphenol	45,10	10,25	34,84
Cresol	15,49	4,43	11,06
Catechol	45,10	4,93	40,17
Acetone	0,00	0,00	0,00
Vanillin	91,87	1,20	90,67

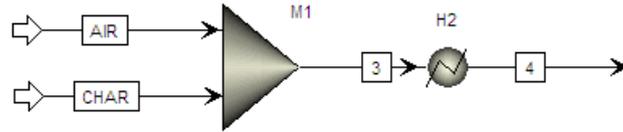
**Tabla 4.18.** Resultados del evaporador y las bombas P6 y P7

Equipment	PHENOLS
Temperature C	117,30
Pressure bar	1,00
Vapor Frac	0,91
Heat duty cal/s	247.104,40

Equipment	PUMP 6	PUMP 7
Brake power, W	0,59	0,13

#### 4.7.8 Alimentación del char al combustor

En esta sección se presentan los flujos de las corrientes de aire y de char justo antes de su entrada al combustor. También se exponen los resultados en los equipos involucrados.



**Figura 4.10.** Acondicionamiento de la alimentación al combustor

**Tabla 4.19.** Flujos másicos de las corrientes de aire y char

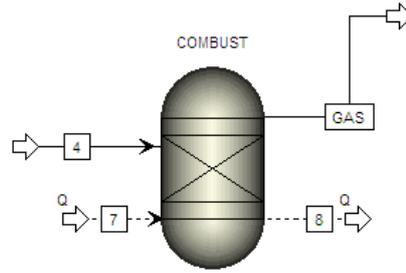
Stream	AIR	CHAR	3	4
Mass Flow kg/hr	11.351,43	715,31	12.066,74	12.066,74
Mole Flow kmol/hr	393,46	68,86	462,31	462,31
O <sub>2</sub>	82,63	2,21	84,84	84,84
N <sub>2</sub>	310,83	0,00	310,83	310,83
H <sub>2</sub>	0,00	15,60	15,60	15,60
CO <sub>2</sub>	0,00	0,00	0,00	0,00
CO	0,00	0,00	0,00	0,00
H <sub>2</sub> O	0,00	0,00	0,00	0,00
C	0,00	51,05	51,05	51,05

**Tabla 4.20.** Resultados del intercambiador H2

Equipment	HEATER 2
Temperature C	900,00
Pressure bar	1,00
Vapor Frac	0,89
Heat duty cal/s	902.777,78

#### 4.7.9 Combustor

A continuación se exponen los flujos de las corrientes de entrada y salida del combustor y los principales resultados obtenidos. En este equipo no se ha representado la corriente correspondiente de residuos sólidos de la combustión. Por otra parte sí se ha considerado las corrientes ficticias de calor por razones de cálculo.



**Figura 4.11.** Combustión de char

**Tabla 4.21.** Flujos máxicos en el combustor

Stream	4	GAS
Mass Flow kg/hr	12.066,74	12.131,78
Mole Flow kmol/hr	462,31	403,47
O2	84,84	25,99
N2	310,83	310,83
H2	15,60	0,00
CO2	0,00	51,05
H2O	0,00	15,60
C	51,05	0,00

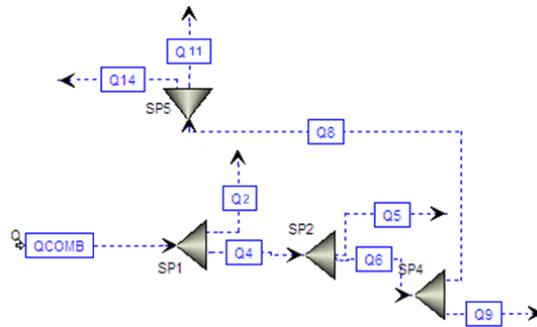
**Tabla 4.22.** Resultados del combustor

Equipment	COMBUSTOR
Temperature C	900,00
Pressure bar	1,00
Vapor Frac	1,00
Heat duty cal/s	-2.005.555,55

#### 4.7.10 Flujos de energía

En esta sección se presenta la distribución de energía en forma de calor entre las diferentes etapas de la planta. Se toma el calor desprendido en la etapa de combustión y se distribuye según las necesidades de cada proceso, es decir se

ajusta mediante especificaciones de diseño la energía necesaria para cada etapa.



**Figura 4.12.** Distribución de energía

Atendiendo a las corrientes de calor finales se observa Q2 sería el calor necesario para la pirólisis; Q5 el calor necesario para la concentración de fenoles; Q9 el calor necesario en la etapa de secado de lignina; Q11, el calor necesario en el intercambiador de calor de vapor alimentado al reactor de pirólisis y Q14 el calor necesario para el precalentamiento de la lignina justo antes de su entrada en el mismo reactor.

**Tabla 4.23.** Flujos de calor

Stream	Energy, cal/s
QCOMB	2.005.555,55
Q2	1.188.772,03
Q4	816.783,52
Q5	247.101,85
Q6	569.681,67
Q8	535.451,63
Q9	34.230,04
Q11	66.198,87
Q14	469.252,76

#### 4.7.11 Balances de materia y energía

A continuación se muestran las figuras donde vienen reflejados los balances de materia y energía de la planta de fenoles

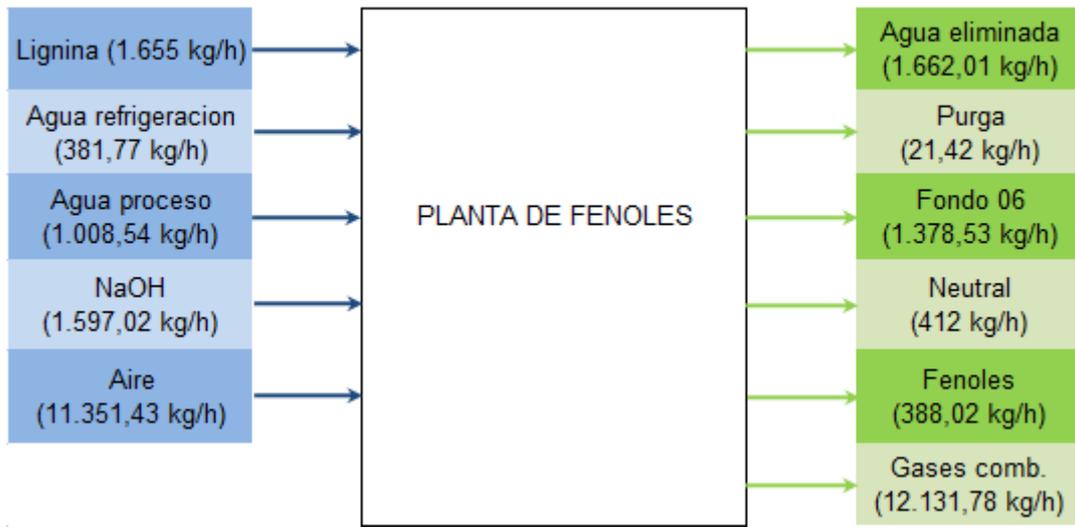


Figura 4.13. Balance de materia

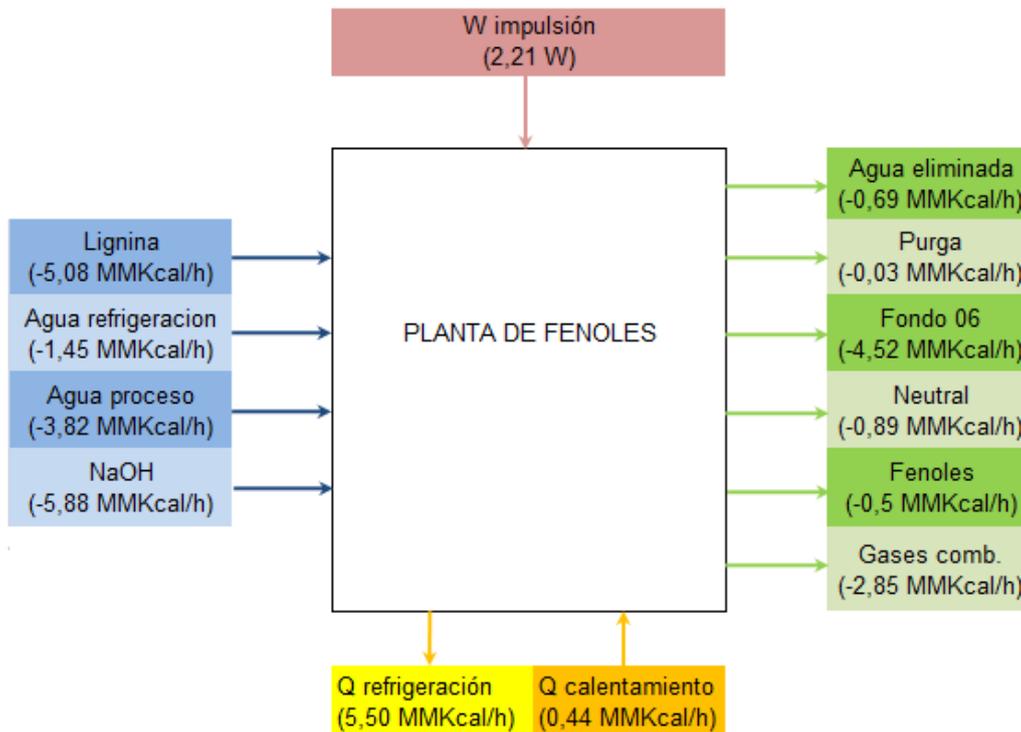


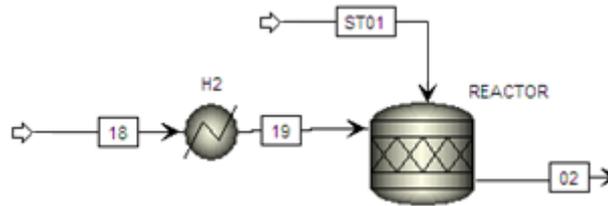
Figura 4.14. Balance de energía

## 4.8 Resultados de la simulación de la planta de furfural

A continuación se exponen los resultados finales de la simulación de la planta de furfural. Se contemplan los flujos de entrada y salida y los principales resultados de los equipos usados en cada etapa.

### 4.8.1 Reactor y precalentamiento de la alimentación

En esta sección se presentan los flujos de las corrientes de entrada y salida del reactor e intercambiador de calor y se exponen los resultados de ambos equipos.



**Figura 4.15.** Reactor de furfural

**Tabla 4.24.** Flujos de másicos en el reactor

Stream	19	02	ST01
Mass Flow kg/hr	738.144,76	750.096,16	11.951,39
H <sub>2</sub> O	729.911,81	742.578,96	11.951,39
Glucose	1.213,85	1.213,85	0,00
Xylose	2.451,98	735,59	0,00
Arabinose	388,43	116,53	0,00
Xylan	1,02	1,02	0,00
Arabinan	0,11	0,11	0,00
Cellulose	7,92	7,92	0,00
CaSO <sub>4</sub>	0,23	0,23	0,00
CaPO <sub>4</sub>	0,23	0,23	0,00

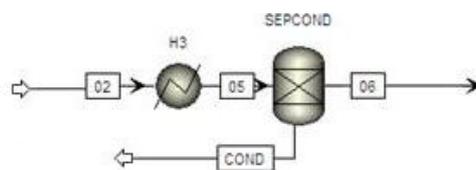
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	279,19	279,19	0,00
SiO <sub>2</sub>	0,66	0,66	0,00
Lignin	4,04	4,04	0,00
Lignin soluble	133,52	133,52	0,00
Sugar soluble	0,25	0,25	0,00
Protein	0,73	0,73	0,00
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2.840,41	2.840,41	0,00
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	230,63	230,63	0,00
Furfural	133,52	1.406,05	0,00
Hydroximetylfurfural	36,42	36,42	0,00
CH <sub>3</sub> COONa	509,82	509,82	0,00

**Tabla 4.25.** Resultados en el reactor e intercambiador

Equipment	REACTOR	H2
Temperature C	220,00	220,00
Pressure bar	59,22	59,22
Vapor Frac	1,00	0,00
Heat duty Kcal/s	183,03	16.998,04

#### 4.8.2 Expansión y separación de condensados

En esta sección se presentan los flujos de materia en la etapa de expansión una vez formado el furfural y los resultados obtenidos en el intercambiador y separador.



**Figura 4.16.** Expansión y separación de condensados

**Tabla 4.26.** Flujos máxicos durante la expansión

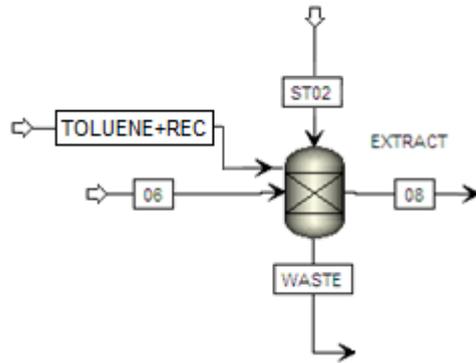
<b>Stream</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>COND</b>
Mass Flow kg/hr	750.096,16	735.734,16	14.361,99
H <sub>2</sub> O	742.578,96	728.216,97	14.361,99
Glucose	1.213,85	1.213,85	0,00
Xylose	735,59	735,59	0,00
Arabinose	116,53	116,53	0,00
Xylan	1,02	1,02	0,00
Arabinan	0,11	0,11	0,00
Cellulose	7,92	7,92	0,00
CaSO <sub>4</sub>	0,23	0,23	0,00
CaPO <sub>4</sub>	0,23	0,23	0,00
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	279,19	279,19	0,00
SiO <sub>2</sub>	0,66	0,66	0,00
Lignin	4,04	4,04	0,00
Lignin soluble	133,52	133,52	0,00
Sugar soluble	0,25	0,25	0,00
Protein	0,73	0,73	0,00
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2.840,41	2.840,41	0,00
H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	0,00	0,00	0,00

**Tabla 4.27.** Resultados en equipos en la etapa de expansión

<b>Equipment</b>	<b>H3</b>	<b>SEPCOND</b>
Temperature C	60,00	60,00
Pressure bar	1,00	1,00
Vapor Frac	0,00	0,00
Heat duty cal/s	-40.061.742,00	-4,09

### 4.8.3 Extracción con tolueno

A continuación se presentan tanto los flujos de materia que entran y salen durante la extracción de furfural con tolueno como los resultados obtenidos en la extracción.



**Figura 4.17.** Extracción con tolueno

**Tabla 4.28.** Flujos máxicos durante la extracción

Stream	6	TOLUENE+REC	WASTE	8	ST02
Mass Flow kg/hr	735.734,16	5.746,12	746.394,40	7.037,27	11.951,39
H <sub>2</sub> O	728.216,97	0,00	740.168,36	0,00	11.951,39
Glucose	1.213,85	0,00	1.213,85	0,00	0,00
Xylose	735,59	0,00	735,59	0,00	0,00
Arabinose	116,53	0,00	116,53	0,00	0,00
Xylan	1,02	0,00	1,02	0,00	0,00
Arabinan	0,11	0,00	0,11	0,00	0,00
Cellulose	7,92	0,00	7,92	0,00	0,00
CaSO <sub>4</sub>	0,23	0,00	0,23	0,00	0,00
CaPO <sub>4</sub>	0,23	0,00	0,23	0,00	0,00
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	279,19	0,00	279,19	0,00	0,00
SiO <sub>2</sub>	0,66	0,00	0,66	0,00	0,00
Lignin	4,04	0,00	4,04	0,00	0,00

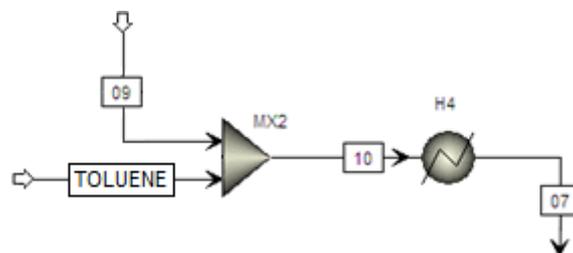
Lignin soluble	133,52	0,00	133,52	0,00	0,00
Sugar soluble	0,25	0,00	0,25	0,00	0,00
Protein	0,73	0,00	0,73	0,00	0,00
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2.840,41	0,00	2.840,41	0,00	0,00
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	230,63	0,00	230,63	0,00	0,00
Furfural	1.406,05	1,41	0,00	1.407,45	0,00
Hydroximetylfurfural	36,42	0,00	36,42	0,00	0,00
CH <sub>3</sub> COONa	509,82	0,00	509,82	0,00	0,00
Toluene	0,00	5.744,71	114,89	5.629,81	0,00

**Tabla 4.29.** Resultados en la etapa de extracción

Equipment	EXTRACT
Temperature C	60,00
Pressure bar	1,00
Vapor Frac	0,00
Heat duty cal/s	-165.496,32

#### 4.8.4 Alimentación de tolueno

En esta sección se observan los flujos de tolueno fresco y recirculado que se unen en una misma corriente y se precalienta para entrar directo a la extracción



**Figura 4.18.** Alimentación de tolueno

**Tabla 4.30.** Flujos másicos de tolueno

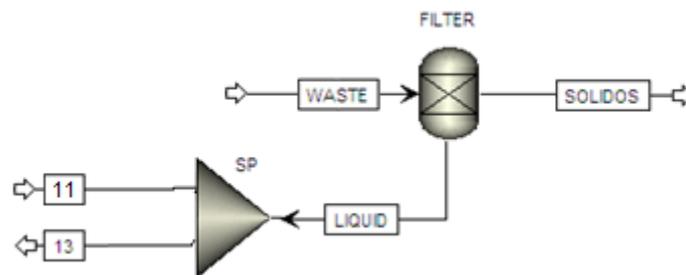
Stream	9	TOLUENE	10	7
Mass Flow kg/hr	5.625,59	120,52	5.746,12	5.746,12
Furfural	1,41	0,00	1,41	1,41
Toluene	5.624,18	120,52	5.744,71	5.744,71

**Tabla 4.31.** Resultados en MX2 y H4

Equipment	MX2	H4
Temperature C	57,20	58,00
Pressure bar	0,99	0,99
Vapor Frac	0,00	0,00
Heat duty cal/s		529,05

#### 4.8.5 Filtración

En esta sección se presentan los flujos de entrada y salida durante la eliminación de partículas sólidas.



**Figura 4.19.** Filtración

**Tabla 4.32.** *Flujos máxicos en la filtración*

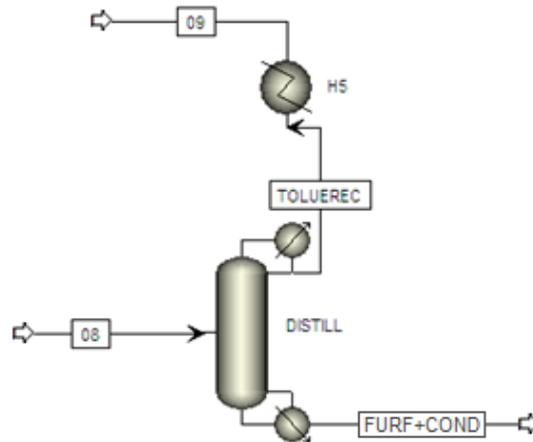
<b>Stream</b>	<b>WASTE</b>	<b>LIQUID</b>	<b>SOLIDOS</b>	<b>11</b>	<b>13</b>
Mass Flow kg/hr	746.394,40	668.991,94	77.402,47	602.092,74	66.899,19
H <sub>2</sub> O	740.168,36	666.151,53	74.016,84	599.536,37	66.615,15
Glucose	1.213,85	0,00	1.213,85	0,00	0,00
Xylose	735,59	0,00	735,59	0,00	0,00
Arabinose	116,53	0,00	116,53	0,00	0,00
Xylan	1,02	0,00	1,02	0,00	0,00
Arabinan	0,11	0,00	0,11	0,00	0,00
Cellulose	7,92	0,00	7,92	0,00	0,00
CaSO <sub>4</sub>	0,23	0,00	0,23	0,00	0,00
CaPO <sub>4</sub>	0,23	0,00	0,23	0,00	0,00
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	279,19	0,00	279,19	0,00	0,00
SiO <sub>2</sub>	0,66	0,00	0,66	0,00	0,00
Lignin	4,04	0,00	4,04	0,00	0,00
Lignin soluble	133,52	0,00	133,52	0,00	0,00
Sugar soluble	0,25	0,00	0,25	0,00	0,00
Protein	0,73	0,00	0,73	0,00	0,00
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2.840,41	2.840,41	0,00	2.556,37	284,04
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	230,63	0,00	230,63	0,00	0,00
Hydroximetylfurfural	36,42	0,00	36,42	0,00	0,00
CH <sub>3</sub> COONa	509,82	0,00	509,82	0,00	0,00
Toluene	114,89	0,00	114,89	0,00	0,00

**Tabla 4.33. Resultados del filtro**

Equipment	FILTER
Temperature C	61,70
Pressure bar	0,99
Vapor Frac	0,00
Heat duty cal/s	-112,02

#### 4.8.6 Destilación

En esta sección se presenta los resultados y flujos que intervienen en la torre de destilación.



**Figura 4.20. Torre de destilación**

**Tabla 4.34. Flujos másicos en la destilación**

Stream	8	FURF+CON	TOLUEREC	9
Mass Flow kg/hr	7.037,27	1.411,68	5.625,59	5.625,59
Furfural	1.407,45	1.406,05	1,41	1,41
Toluene	5.629,81	5,63	5.624,18	5.624,18

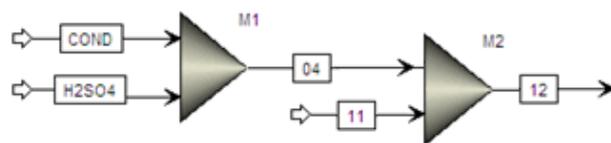
**Tabla 4.35.** Resultados de la torre de destilación e intercambiador

Equipment	Distillation tower
Distillate temperatura °C	110,68
Bottom temperatura °C	160,51
Pressure bar	0,99
Number stages	38
Reboiler heating cal/s	260004,5
Condenser cooling cal/s	208520,55

Equipment	HEATER 5
Temperature C	58,00
Pressure bar	1,00
Vapor Frac	0,00
Heat duty cal/s	-39.052,70

#### 4.8.7 Dilución del ácido sulfúrico

En esta sección se presentan las corrientes de proceso utilizadas para diluir el ácido sulfúrico hasta un 2% tal como se muestra en la figura 4.21.



**Figura 4.21.** Alimentación y dilución del ácido sulfúrico

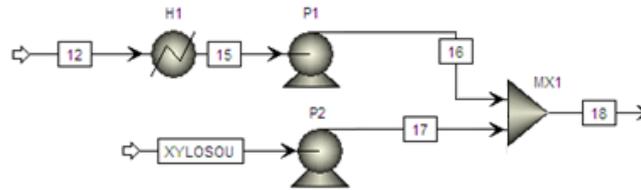
**Tabla 4.36.** Flujos másicos durante la dilución

Stream	H2SO4	COND	4	11	12
Temperature C	20,00	60,00	59,70	61,70	61,60
Pressure atm	1,00	1,00	1,00	0,99	0,99
Mass Flow kg/hr	289,84	14.361,99	14.651,83	602.092,74	616.744,57
H <sub>2</sub> O	5,80	14.361,99	14.367,79	599.536,37	613.904,16

H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	284,04	0,00	284,04	2.556,37	2.840,41
--------------------------------	--------	------	--------	----------	----------

#### 4.8.8 Acondicionamiento de la alimentación de azúcares y de la solución de ácido

En esta sección se muestran las operaciones a las que son sometidas ambas alimentaciones antes de la entrada al reactor. Básicamente se precalientan y se impulsan para alcanzar las condiciones deseadas en el reactor.



**Figura 4.22.** Acondicionamiento de la alimentación de azúcares

**Tabla 4.37.** Flujos máxicos de alimentación al reactor

Stream	12	15	XYLOSOU	16	17	18
Mass Flow kg/hr	616.744,57	616.744,57	121.400,19	616.744,57	121.400,19	738.144,76
H <sub>2</sub> O	613.904,16	613.904,16	116.007,64	613.904,16	116.007,64	729.911,81
Glucose	0,00	0,00	1.213,85	0,00	1.213,85	1.213,85
Xylose	0,00	0,00	2.451,98	0,00	2.451,98	2.451,98
Arabinose	0,00	0,00	388,43	0,00	388,43	388,43
Xylan	0,00	0,00	1,02	0,00	1,02	1,02
Arabinan	0,00	0,00	0,11	0,00	0,11	0,11
Cellulose	0,00	0,00	7,92	0,00	7,92	7,92
CaSO <sub>4</sub>	0,00	0,00	0,23	0,00	0,23	0,23
CaPO <sub>4</sub>	0,00	0,00	0,23	0,00	0,23	0,23
K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,00	0,00	279,19	0,00	279,19	279,19
SiO <sub>2</sub>	0,00	0,00	0,66	0,00	0,66	0,66
Lignin	0,00	0,00	4,04	0,00	4,04	4,04
Lignin soluble	0,00	0,00	133,52	0,00	133,52	133,52
Sugar soluble	0,00	0,00	0,25	0,00	0,25	0,25
Protein	0,00	0,00	0,73	0,00	0,73	0,73

H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2.840,41	2.840,41	0,00	2.840,41	0,00	2.840,41
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,00	0,00	230,63	0,00	230,63	230,63
Furfural	0,00	0,00	133,52	0,00	133,52	133,52
Hydroximetilfurfural	0,00	0,00	36,42	0,00	36,42	36,42
CH <sub>3</sub> COONa	0,00	0,00	509,82	0,00	509,82	509,82

**Tabla 4.38.** Resultados en intercambiador y bombas

Equipment	HEATER 1	
Temperature C	180,00	
Pressure bar	9,87	
Vapor Frac	0,00	
Heat duty Kcal/s	23.019,89	

Equipment	PUMP 1	PUMP 2
Brake power, kW	1.034,13	197,49

#### 4.8.9 Balances de materia y energía

A continuación se muestran las figuras donde vienen reflejados los balances de materia y energía de la planta de furfural.



**Figura 4.23.** Balance de materia



**Figura 4.24.** Balance de energía

