

Modelamiento de Procesos (2020-II)

Producción de Etilbenceno.

Alejandro Gómez, Steven Sanchez, Luis M. Ceballos

ajgomezf@unal.edu.co, juassanchezcas@unal.edu.co,
lmceballos@unal.edu.co

Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín.

Resumen

El presente trabajo tiene como objetivo el análisis y desarrollo de una planta para la producción de etilbenceno, implementando un reactor PFR catalizado con lecho fijo, siendo este ultimo previamente seleccionado, como requisito para el desarrollo del trabajo.

Keywords: simulación, modelamiento de procesos, matlab.

1. INTRODUCCIÓN

Etilbenceno (C_8H_{10}) es un líquido flamable e incoloro, que se encuentra en productos naturales como el carbón y el petróleo, así mismo en productos comerciales como pinturas, tintas e insecticidas, y es usado principalmente para fabricar otros productos químicos base como el estireno que puede dar lugar al poliestireno empleado para el desarrollo de resinas, plásticos y hules, como un caso puntual (Wikipedia (2020)).

El objetivo principal de este trabajo se centra la producción de etilbenceno, con el fin de realizar la conversión en los reactores y lograr las condiciones en la línea de separación.

2. DESCRIPCIÓN PLANTA

Para este trabajo, se considera la planta de producción de etilbenceno, cuyo diagrama se presenta en la Figura 1, las condiciones de operación del proceso fueron extraídas de (Turton (2012)) y de (Peaster (2018)).

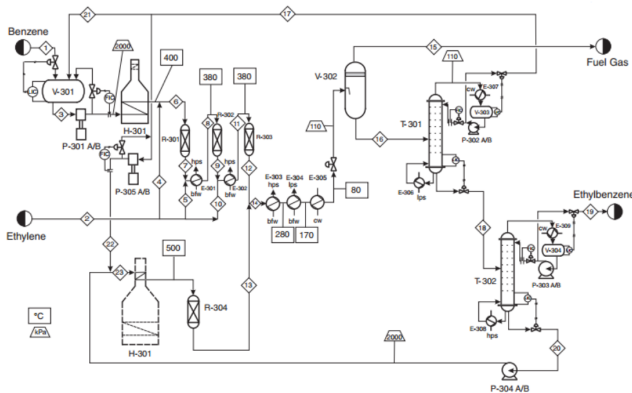
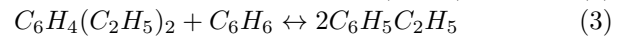
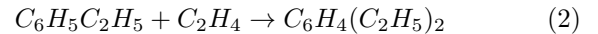
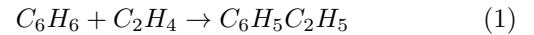


Figura 1. Diagrama de proceso para la producción de etilbenceno (Turton (2012))

La producción de etilbenceno se realiza mediante la alquilación de benceno con etileno, como se muestra en

la Reacción 1. Además se encuentran otras reacciones adicionales del etileno con el etilbenceno para producir componentes de mayor orden, siendo estas las reacciones 2 y 4. La reacción 3 ocurre en R-304 con el objetivo de aumentar la efectividad para obtener el resultado final.

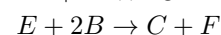
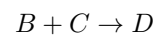
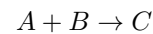


Por comodidad al lector, en la Tabla 1 se hace referencia a cada uno de los componentes con su respectiva fórmula molecular, y la letra que lo representa para el análisis en el resto del documento.

Nombre de componente	Formula molecular	Letra
Benceno	C_6H_6	A
Etileno	C_2H_4	B
Etilbenceno	$C_6H_5C_2H_5$	C
Dietilbenceno	$C_6H_4(C_2H_5)_2$	D
Tolueno	$C_6H_5CH_3$	E
Propileno	C_3H_6	F

Tabla 1. Nombre de componente y fórmula.

Las reacciones con su respectivas letras quedan de la siguiente manera:



En este escenario, la alquilación del benceno toma lugar con un catalizador (Zeolita mineral, ZSM-5), en un reactor de lecho fijo a una temperatura entre $380^\circ C$ y $400^\circ C$, es por esto que la reacción principal (Reacción 1) se ve restringida en gran medida por el tipo catalizador y sus propiedades, en este caso la temperatura máxima permisible del catalizador es $500^\circ C$.

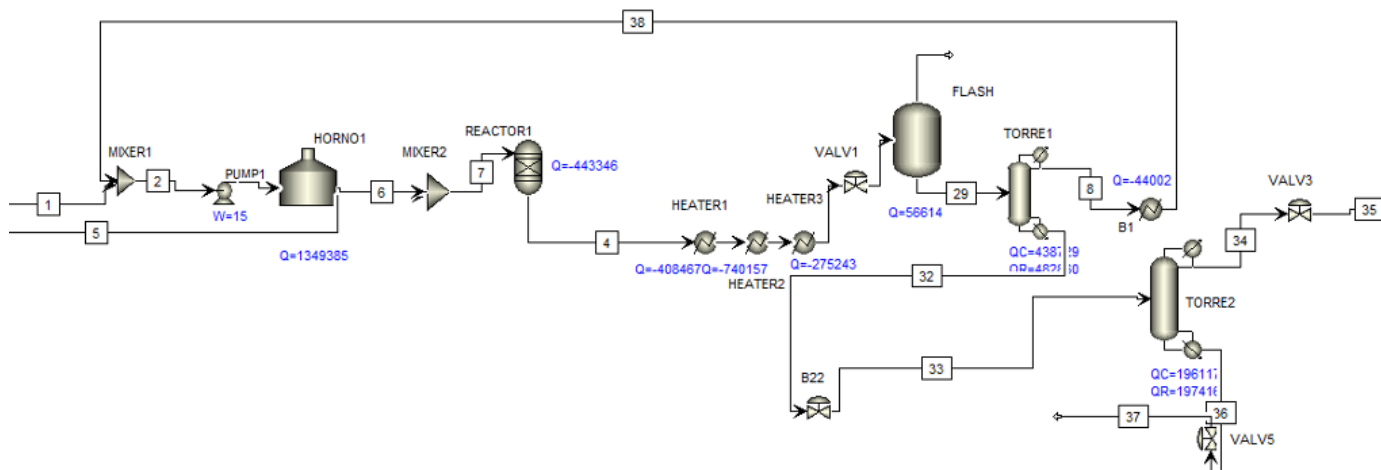


Figura 2. Diagrama de flujo de planta de producción de etilbenceno, realizado en Aspen Plus.

Una parte del benceno es alimentado desde la refinería hasta un tanque de almacenamiento V-301, donde es mezclado con benceno recirculado. Luego se bombea para alcanzar la presión requerida para la reacción, aproximadamente 20 atm , y posteriormente se lleva a un horno H-301 para llevarlo a la temperatura de reacción (aproximadamente 400°C). El benceno precalentado es mezclado con el etileno justo antes de entrar a la etapa de conversión constituida por tres reactores adiabáticos de lecho fijo (R-301 a R-303), con alimentación adicional y refrigeración entre reactores. La reacción ocurre en fase gaseosa y es exotérmica.

A la salida del reactor (sustancia parcialmente convertida) hay un punto de mezcla para alimentar etileno y posteriormente un intercambiador para cada reactor (E-301 y E-302). El objetivo de dichos intercambiadores es el de enfriar las corrientes de salida de los reactores hasta 380°C y generar vapor a alta presión, en las corrientes de servicio, que posteriormente se emplea en la unidad de producción de estireno. La corriente de salida del último reactor (R-303) contiene productos, subproductos y cantidades de benceno y etileno sin reaccionar. Dicho efluente es enfriado en dos calderas de calor residual (E-303 y E-304) en las cuales vapor a alta y baja presión son generados respectivamente; este vapor también es consumido por la unidad de estireno.

Una mezcla de dos fases deja E-304 y es enviada a un dispositivo de refrigeración E-305, donde se enfría hasta 80°C y luego a un separador de flash de 2 fases V-302, donde los gases livianos son separados, generando una corriente rica en etileno que sale por la parte superior de la torre como gas combustible. El líquido condensado (Corriente inferior del flash) es luego enviado a la torre de destilación T-301 donde el benceno sin reaccionar es separado como destilado en la parte superior y recirculado al inicio del proceso. Las colas de la primera columna, ricas en etilbenceno y dietilbenceno son enviadas a una segunda torre de destilación T-302, donde el destilado es etilbenceno (al 99% molar con menos de 2 ppm de dietilbenceno (DEB)) que es el producto final enviado a la sección de producción de estireno. Por otro lado, las colas (ricas en DEB), son mezcladas con parte de la corriente de

benceno recirculada de T-301 y se calientan en un horno H-301 para ser pasadas por un cuarto reactor R-304 con el fin de que los excesos de benceno y DEB reaccionen para formar Etilbenceno (con residuos de benceno) que se mezclará con la corriente de salida del reactor R-303 para continuar en el proceso a partir del intercambiador E-303.

Analizando el trabajo desarrollado en [afasdf], se revisó el diagrama del proceso del mismo, como se ilustra en la Figura 2, en el software Aspen Plus v8.4. Este diagrama presenta algunas modificaciones:

- Se utilizó un único reactor (que compila la información contenida en R-301, R-302 y R-303)
- No se tuvo en cuenta la corriente de reciclo de los productos de cola en T-302 (Reacción 3).

La simplificación de este proceso se realiza, al partir del diagrama de bloques que se ilustra en la Figura:

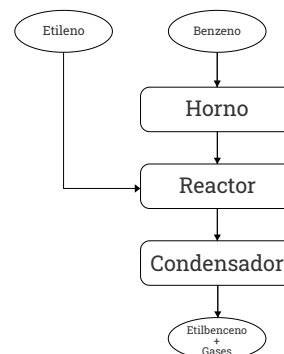


Figura 3. Simplificación del proceso para la producción de Etilbenceno.

3. DERIVACIÓN DE MODELOS

3.1 Horno

Un horno es un dispositivo que genera calor y que lo mantiene dentro de un compartimento cerrado. La energía calórica utilizada para alimentar un horno puede obtenerse

directamente por combustión, radiación, o indirectamente por medio de electricidad. Asumiendo que se realiza mantenimiento constante al horno por lo que el deterioro en el material no es considerable, la transferencia de calor se toma unidireccional y no hay cambios considerables en la presión del sistema. Por lo tanto, se tiene que no hay puntos muertos dentro del horno ya que el calor se distribuye de forma uniforme con el tiempo dentro del horno.

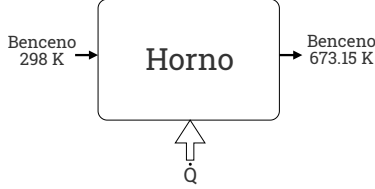


Figura 4. Sistema Horno.

A partir de la representación del horno que se ilustra en la Figura 4, se realiza un balance de masa y energía. Para el balance de masa, se hacen las siguientes consideraciones:

- La presión dentro del horno se asume controlado, es decir se mantiene constante.
- No hay variación en el nivel de líquido, es decir el nivel esta controlado y por lo tanto se mantiene constante.

De esta manera, al hacer el balance de masa se obtiene:

$$0 = \frac{dM}{dt} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} \quad (5)$$

Para el balance de energía, se parte de la siguiente ecuación:

$$\frac{dH_{horno}}{dt} = \dot{m}_{in}\hat{H}_{in} - \dot{m}_{out}\lambda_A + \dot{Q}$$

A partir del balance de masa en 5, se obtiene $\dot{m}_{in} = \dot{m}_{out} = \dot{m}$. Por lo tanto, al emplearla en el balance de energía obtenemos:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{m}}{M}(T_{in} - T) - \frac{UA}{MC_p}(T_{op} - T)$$

Simplificando la expresión anterior obtenemos la variación de la temperatura:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_{in}}{V}(T_{in} - T) - \frac{UA}{\rho_A V C_p}(T_{op} - T) \quad (6)$$

3.2 Reactor

El balance de masas por componentes queda de la siguiente manera:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{F_{in_i}C_{i0} - F_{out}C_i}{V} + r_{i1} - r_{i2} \quad (7)$$

Donde C_i representa la concentración del componente i ; el subíndice i toma valores del conjunto $\{A, B, C, D, E, F\}$; C_{i0} representa la concentración inicial del componente en el flujo de entrada F_{in_i} . Los valores de r_{i1} y r_{i2}

representan la velocidad con la que se produce y consume el componente, respectivamente. Los valores r_{i1} y r_{i2} son presentados en la Tabla 2.

i	r_{i1}	r_{i2}
B	0	$r_1 + r_2 + 2r_4$
C	$r_1 + r_3 + r_4$	r_2
D	r_2	$r_3/2$
E	0	r_4
F	r_4	0

Tabla 2. Valores empleados para el modelo presentado en la ecuación 7

Las velocidades de reacción se expresan de la siguiente forma:

$$r_j = k_{0,j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) C_A^a C_B^b C_C^c C_D^d C_E^e C_F^f$$

Donde k corresponde a la reacción k y las condiciones de la energía de activación, el valor de $k_{0,k}$ y las constantes a, c, b, d, e se especifican en la Tabla 3.

i	E_i	$k_{0,i}$	a	b	c	d	e
1	22500	1.00×10^6	1	1	0	0	0
2	22500	6.00×10^5	0	1	1	0	0
3	25000	7.80×10^6	1	0	0	1	0
4	20000	1.80×10^8	0	2	0	0	1

Tabla 3. Parámetros para la cinética de reacción.

Para el balance de energía, partimos de la siguiente expresión:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum \dot{n}_{in} \hat{H}_{C_i} - \sum \dot{n}_{out} \hat{H}_{C_i} - \sum r_j \Delta \hat{H}_{r_j} V - \dot{Q}_r}{\sum C_i C_{p_i} V}$$

En las Tablas 4, 5 y 6 se presentan los valores que se usaran para el proceso de simulación, a partir de la información extraída de (Gutierrez (2019)).

Parametro	Componente	Entalpia
\hat{H}_{C_A}	Benceno	82.93 kJ/mol
\hat{H}_{C_C}	Etilbenceno	-121 kJ/mol
\hat{H}_{C_D}	Dietilbenceno	-24.67 kJ/mol
\hat{H}_{C_E}	Tolueno	50 kJ/mol
\hat{H}_{C_F}	Propileno	-124 kJ/mol

Tabla 4. Entalpías consultadas.

Nombre	Calor específico	Peso molecular
Benceno	81.67 J/mol °K	78.12 g/mol
Etileno	42.84 J/mol °K	28.05 g/mol
Etilbenceno	128.41 J/mol °K	106.16 g/mol
Dietilbenceno	257.29 J/mol °K	134.22 g/mol
Tolueno	157.23 J/mol °K	92.14 g/mol
Propileno	64.31 J/mol °K	42.08 g/mol

Tabla 5. Calores específicos consultados.

Reaccion	C. Cinetico	tipo
R_1	114 kJ/mol	Exotermica

Tabla 6. Coeficientes cinéticos.

3.3 Condensador

Las reacciones del reactor ocurren en fase gaseosa, es por ello que en esta etapa, se implementa un condensador para lograr extraer el componente de interés del resto de elementos que son mas volátiles, con la finalidad de obtener una mezcla líquida donde se encuentra un porcentaje de la concentración del producto deseado. En fase líquida se asume que estarán el Benceno, Etilbenceno, y Dietilbenceno, los cuales tienen una volatilidad más pequeña.

Para modelar el estado dinámico se harán una serie de suposiciones:

- El sistema opera en modo continuo.
- El líquido y el gas están en equilibrio térmico (esta suposición es buena dado que el efecto del calor sensible es mucho mayor que el efecto del calor latente).
- Presión en el sistema se asume como constante.
- Volumen del gas en el sistema se asume constante.
- En fase líquida estarán presentes el benceno, etilbenceno y dietilbenceno. Estos tres elementos en conjunto los identificaremos con la letra R .
- No hay acumulación de gases ni de líquidos en el sistema.
- el flujo volumétrico de gases para la entrada y salida es el mismo.

$$\begin{aligned}\dot{n}_{in} &= \dot{n}_{Rin} + \dot{n}_{gases} \\ \dot{n}_{out} &= \dot{n}_{Rout} + \dot{n}_{gases}\end{aligned}\quad (8)$$

Siendo \dot{n}_{Rin} el flujo de benceno, etilbenceno y dietilbenceno a la entrada del condensador, y \dot{n}_{gases} como el flujo de gases no se condensarán (otros gases). \dot{n}_{Rout} el flujo de R que no se condensa.

Realizando un balance de moles total sobre el gas dentro del condensador y considerando las suposiciones realizadas previamente, se obtiene:

$$\frac{dN_{gases}}{dt} = 0 = \dot{n}_{in} - \dot{n}_{out} - \dot{n}_{Rliq}\quad (9)$$

Para el balance por componentes obtenemos lo siguiente:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{C_{i0}F_{in} - C_iF_{out} - \dot{n}_{i(liq)}}{V}$$

A partir de las suposiciones realizadas:

$$F_{in} = F_{out}\quad (10)$$

Por lo tanto:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{F_{in}C_{i0}}{V} - \frac{\dot{n}_{i(liq)}}{V}$$

Suponemos que todo el benceno, etilbenceno y dietilbenceno se vuelven líquido, por lo tanto para este escenario:

$$\frac{dC_j}{dt} = 0; \quad F_{in}C_{j0} = \dot{n}_{j(liq)}$$

4. SIMULACIÓN

La simulación se llevo a cabo en el software MATLAB (2020), donde se desarrollaron las funciones respectivas de cada una de las plantas. Estas son:

- Horno
- Reactor
- Condensador

En la Tabla ?? se muestran los parámetros empleados para realizar la simulación de los procesos, considerando un tiempo de ejecución de 10 segundos.

Cada una con sus respectivas funciones que fueron implementadas en *Simulink* como se ilustra en la Figura 5.

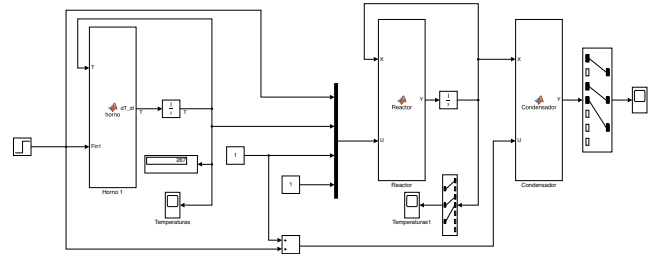


Figura 5. Desarrollo de la simulación en lazo abierto en *Simulink*

En la Figura 6 se observa el resultado de la simulación en el Horno, empleando una entrada escalón con cambio de 100 lt/s a 150 lt/s, donde se aprecia el cambio de la temperatura reflejado en la dinámica de la planta.

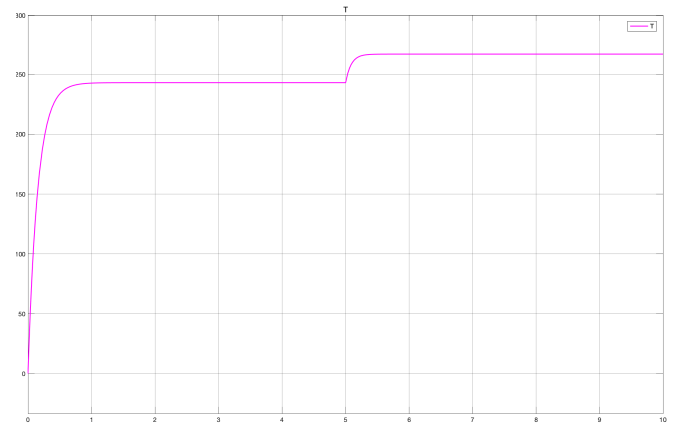


Figura 6. Resultado simulación Horno en *Simulink*

En la Figura 7 se aprecia el resultado de la simulación, en la variación de la concentración para C_A , C_C , y C_D , a partir del cambio de flujo mencionado con una entrada escalón. Y por último, en la Figura 9 se aprecia el resultado final del proceso en el condensador.

??

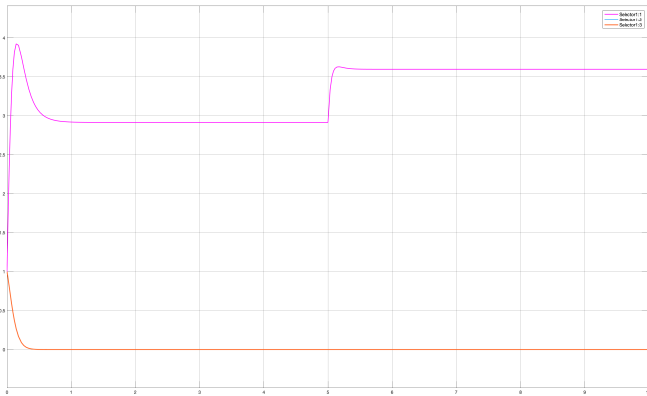


Figura 7. Resultado simulación Reactor en *Simulink*

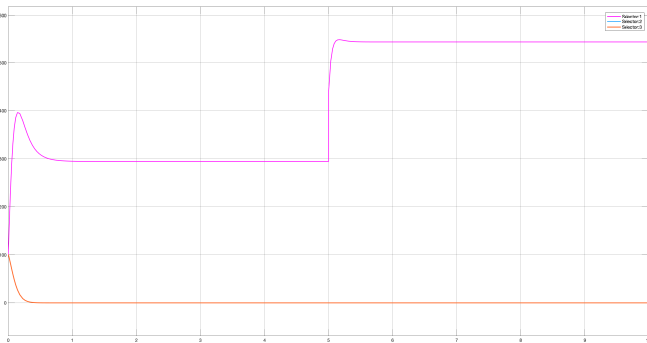


Figura 8. Resultado simulación Condensador en *Simulink*

5. SISTEMA DE CONTROL

Para el sistema de control, se pretende realizar una manipulación del flujo de entrada del benceno, considerando el flujo de etanol fijo, con un valor de 150 lt/s, para realizar las pruebas.

5.1 Actuador

Para la elección del actuador, se optó por una electroválvula, considerando factores como el tipo de fluido que se va a intervenir, factores técnicos como la tensión y corriente disponible en el lugar de conexión y los factores de seguridad. Se optó por una electroválvula solenoide doble vía marca Jefferson de la serie 1342. Su estado en reposo será normalmente cerrado (N.C.), es decir, que con corriente la válvula cerrará. La electroválvula por recomendaciones de los fabricantes se recomienda que su cuerpo sea en latón. Esta puede ser con conexión roscada BSP o NPT. El tipo de membrana o asiento será de Viton la cual soporta una temperatura máxima de 150°C. Cuenta con protección IP65 y NEMA 4. Esta electroválvula, depende de una señal de acción, que se realiza de manera digital a través de un pulso de ancho cuadrado, con una variación de valores entre 0 y 255, que representa valores entre el cierre y apertura completa de la electroválvula respectivamente, según la especificación que se encuentra disponible en la referencia Ergio-Controles (2020).



Figura 9. Imagen real de electroválvula Jefferson 1342.

5.2 Sensor

La medición de la concentración del etilbenceno se realiza con la ayuda de un sensor de concentración, que implementa una medición por microondas a través de la sección transversal de la tubería, lo que permitiría obtener el valor de la concentración de salida para realimentar el sistema de control que requerirá de dicho valor para hacer los respectivos ajustes. En la referencia Hitech (2020) se obtiene la información asociada al sensor de referencia U-ICC-245, cuya imagen puede apreciarse en la Figura 10



Figura 10. Sensor U-ICC-245 de la marca HITECH.

5.3 Controlador

Para el sistema de control, se parte del montaje realizado en Simulink que se ilustra en la Figura 11. El controlador seleccionado fue un PID, el cual fue ajustado de manera manual, para obtener un comportamiento que permitiera realizar un seguimiento de las concentraciones deseadas.

El objetivo es entonces, a partir de la concentración de etilbenceno presente en la salida, considerando que se

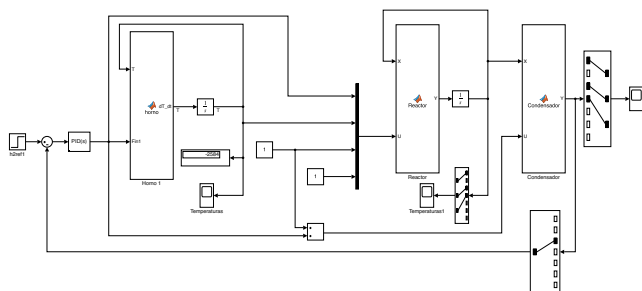


Figura 11. Sistema de control implementado en Simulink.

obtiene la medición de la concentración a partir del sensor seleccionado. Considerando un valor en la concentración de entre 70 y 75 mol/l, se observa un control sobre el sistema como se ilustra en la Figura 12.

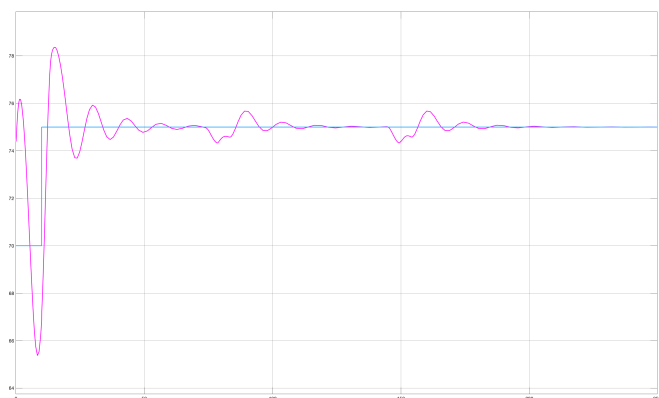


Figura 12. Resultado simulación Control.

Los valores implementados en el PID se presentan en la Tabla 7.

Parametro	Valor
P	0.56
I	1.2
D	0.13

Tabla 7. Valores PID implementados en el controlador.

REFERENCIAS

- Ergio-Controlles (2020). *Electroválvula Jefferson 1342*. Ergio Controlles. <http://ergiocontrolles.com/producto/sistema-de-seguridad-y-control/jefferson-1342/>.
- Gutierrez, R.D.P. (2019). *Diseño preliminar de una planta de producción de 120.000 t/año de etilbenceno*, chapter Anexo 5. Universidad del país vasco. https://addi.ehu.es/bitstream/handle/10810/32718/TFG_DelPino_Gutierrez_Rev.pdf?sequence=1.
- Hitech (2020). *Medidores de concentración y Brix por Micro-ondas*. Hitech

- Argentina. <https://www.hitec.com.ar/medicion-de-concentraciondensidadviscosidad/>.
- MATLAB (2020). *version 9.8.0 (R2020a)*. The Math-Works Inc., Natick, Massachusetts.
- Peaster, W.G. (2018). A case study on the design and optimization of an ethylbenzene production plant. University of Mississippi. URL https://egrove.olemiss.edu/hon_thesis/957.
- Turton, R. (2012). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, chapter 10. Profitability Analysis. Prentice-Hall international series in engineering. Prentice Hall.
- Wikipedia (2020). Etilbenceno — Wikipedia, the free encyclopedia. <https://es.wikipedia.org/wiki/Etilbenceno>. [Online; accessed 1-October-2020].