

Simulación de una planta para la hidratación de etileno empleando el simulador ProMax 3.2

Espinoza Tapia Julio César^{1-2*}, Colín Luna José Antonio¹, Hernández Pérez Isaías²,
González Reyes Leonardo², Barrera Calva Enrique³, Sánchez Viveros José Manuel⁴

¹Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Departamento de Energía, Av. San Pablo No. 180, Azcapotzalco, Ciudad de México, C. P. 02200, México.

²Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Departamento de Ciencias Básicas, Av. San Pablo No. 180, Azcapotzalco, Ciudad de México, C. P. 02200, México.

³Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Av. San Rafael Atlixo No. 186, Col. Vicentina Iztapalapa Ciudad de México, C. P. 09340, México.

⁴ESFM - IPN, Departamento de Física. Av. IPN S/N, Gustavo A. Madero, Ciudad de México, C. P. 07738, México.

*Autor para correspondencia: julioespinoza294@gmail.com

Recibido:

19/junio/2017

Aceptado:

3/septiembre/2017

Palabras clave

ProMax 3.2,
Simulación,
Etanol

Keywords

ProMax 3.2,
Simulation
Ethanol

RESUMEN

En el presente trabajo se realizó la simulación de las diversas etapas que conforman una planta de producción de etanol, de la cual se utilizó etileno como materia prima, empleando el simulador ProMax 3.2 (Bryan Research & Engineering, Inc.), en dicho proceso se considera una producción de 210 Kg / h. Para el desarrollo del proyecto se realizó el balance de materia y energía correspondiente para cada operación unitaria que en conjunto constituyen el proceso químico; además se determinaron las condiciones óptimas de operación de las corrientes pertinentes. Adicionalmente se determinó eficiencia de operación del reactor; también los rendimientos de los intercambiadores de calor y bombas, por último, se determinaron las dimensiones óptimas de las piezas de los componentes en cada operación unitaria; para concluir se determinó el valor promedio para construcción de la planta.

ABSTRACT

In this work, we performed the simulation of the various stages that make up an ethanol production plant, from which ethylene was used as raw material, using the ProMax 3.2 simulator (Bryan Research & Engineering, Inc.), in this process it's consider a 210 kg / h for production. For the development of the project, the material and energy balance for each unit operation that together constitute the chemical process was made; in addition, the optimum operating conditions of the relevant currents were determined. In addition, reactor operating efficiency, yields of heat exchangers and pumps were also determined; finally, the optimum dimensions of the component parts were determined in each unit operation; to conclude, the average value for the construction of the plant was determined.

Introducción

En nuestro país existen diversos compuestos que son de gran interés industrial y comercial, hoy en día el etanol es uno de estos productos, el cual se obtiene para uso industrial mediante la reacción de hidratación catalítica del etileno (con ácido sulfúrico como catalizador). El etileno suele provenir del etano (un componente del gas natural) o de nafta (derivado del petróleo), y después de la síntesis se obtiene una mezcla de etanol y agua que posteriormente hay que purificar. En México la presencia del etanol ha ido en aumento tanto la demanda como la producción de acuerdo con los datos oficiales, en la demanda gracias al aumento en la producción de bebidas alcohólicas además de ser un compuesto de gran interés tanto en la industria farmacéutica, la industria cosmética, perfumería, como combustible y como disolvente para sintetizar otros productos; en la parte de la producción se realiza en un 70% la producción.

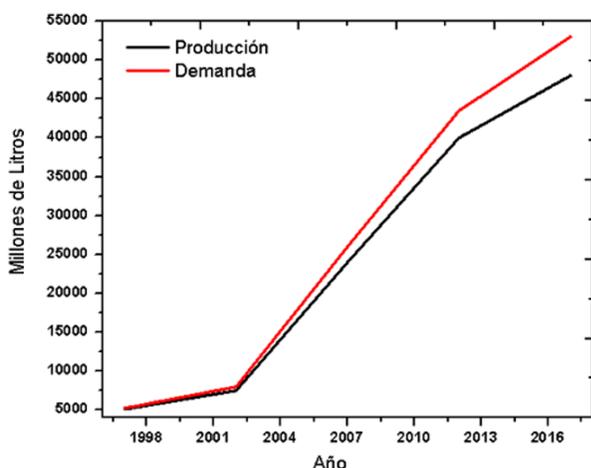


Figura 1. Demanda de etanol en México (Becerra, 2009).

Como se observa la tendencia nacional con respecto al comportamiento en la demanda vs la producción en la última década se tiene cada vez más una mayor demanda por lo cual el contar con una planta de producción de etanol es conveniente para cubrir la fracción no generada en el país (Becerra, 2009). También es importante el mencionar que gracias al uso de herramientas computacionales se han mejorado los diversos diseños de nuevos procesos de producción, además de abrir un amplio campo de oportunidades en la instauración de nuevas plantas a nivel internacional; se obtienen procesos que sean más económicos tanto en su diseño y en su operación, además de que estos se realicen en un menor tiempo (Jiménez, 2003).

El objetivo del presente trabajo fue el estudiar el comportamiento del proceso de fabricación de etanol a gran escala empleando las ecuaciones termodinámicas

y de balance correspondientes utilizando un simulador comercial. Una de las diversas opciones en herramientas computacionales para el desarrollo de este tipo de proyectos, existe hoy en día un excelente paquete de simulación de procesos químicos llamado ProMax 3.2, que fue desarrollado y distribuido por la compañía Bryan Research & Engineering (BR&E) a finales de 2005, el cual trabaja con una diversa gama de compuestos químicos considerando un estándar en la industria para el diseño de tratamiento de gases de aminas y también para unidades de manejo de deshidratación de glicoles (Aspen, 2002).

Este simulador es útil para diseñar y optimizar las instalaciones de procesamiento de gas, refinado e instalaciones químicas de diversos procesos. Es un software utilizado en ambiente Windows y que requiere de una interface gráfica (operacional) basado en el manejo de Microsoft Office Visio, lo cual lo hace un software agradable y de fácil manejo para la simulación de diversas operaciones unitarias (BR&E, 2017).

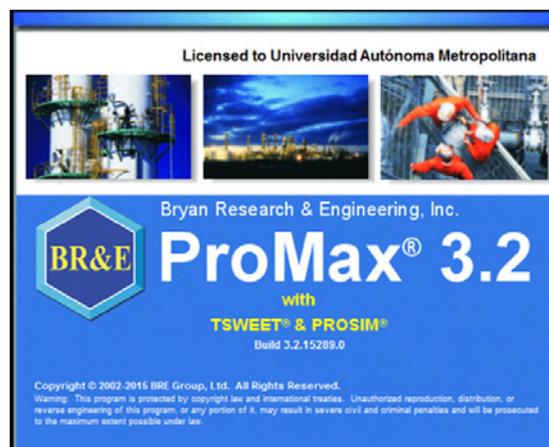


Figura 2. Ventana de inicio del software ProMax 3.2.

Para comenzar la construcción del proceso ingenieril química, se determinó la materia prima y establecer la reacción(es) involucrada(s) durante el proceso; después se define la producción a obtener. En este proyecto se consideró cubrir una producción nominal anual cercana a las 1260 toneladas, lo que involucra contar con un proceso que trabaje de manera continua con un flujo promedio de 210 kg / h aproximadamente (Felder y Rousseac, 2004); se empleará una reacción empleando etileno (gas) y agua (liq) para obtener etanol (liq) utilizando ácido sulfúrico como catalizador empleando un reactor tipo CSTR (Reactor de Tanque Agitado en Continuo), el cual mantiene un flujo continuo tanto en la alimentación de reactivos como en la entrega de productos, en la Fig. 3 se observa el esquema de la reacción para la obtención de etanol a partir de etileno. El etileno o eteno es un

compuesto químico orgánico conformado por dos átomos de carbono enlazados mediante un doble enlace, es uno de los productos de mayor interés en la industria química debido a que se obtiene a gran escala en los procesos de refinación de crudo; es un gas incoloro de olor agradable y dulce que se emplea en diversas síntesis químicas, una de estas reacciones es la de hidratación (adicionarle agua) para generar etanol empleando ácido sulfúrico o ácido fosfórico como catalizador.

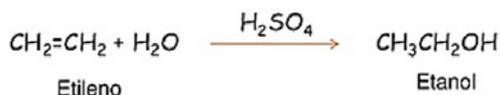


Figura 3. Reacción de obtención de etanol a partir de etileno.

La reacción de hidratación de etileno es un fenómeno reversible, la cual se controla mediante el equilibrio químico ($\Delta H = -43.4$ KJ/mol), proceso en el cual se obtiene una eficiencia del producto deseado dentro del 95-96%, y el resto es una mezcla de dietiléter acompañado de compuestos ligeros y agua residual (Logsdon, 2000); el catalizador empleado se encuentra soportado en material zeolítico o tierra de diatomeas, el cual puede sufrir de envenenamiento provocado por que el etileno alimentado ocasionalmente contiene trazas de acetaldehído (el cual es un producto indeseable dentro de este proceso). La cinética de reacción se considera gracias a un mecanismo de reacción dividido en cuatro etapas (Nelson and Courter, 1954) que son:

- 1.- La formación del complejo activado (Π) mediante la adición de un protón a la molécula de etileno.
- 2.- Se lleva a cabo la conversión del complejo activado (Π) a un carbocatión (etapa dominante en la reacción).
- 3.- Adición del carbocatión.
- 4.- Extracción del protón del etanol protonado.

La cinética de reacción está controlada por la segunda etapa del mecanismo de reacción, de la cual se requieren una energía de activación de 125 KJ/mol (Robinson, 1956), y la velocidad de reacción se expresa mediante la siguiente expresión:

$$V_{\text{reac}} = K_1 \left(\frac{P_e - P_a}{P_w K_f} \right)$$

En donde

- K_1 : Constante Cinética de la reacción.
- P_e : Presión parcial del etileno.
- P_a : Presión parcial del etanol.
- P_w : Presión parcial de vapor de agua.
- K_f : Constante de equilibrio.

También la cantidad de etanol producido está limitada por las consideraciones de equilibrio, por lo cual es necesario el determinar la constante de equilibrio y la conversión de la reacción (Logsdon, 2000).

$$\log K_f = \frac{2132}{T - 6.240} \quad ; \quad \Delta G_f = \frac{28.6}{T - 6.741}$$

En donde

- f : Fugacidad.
- K_f : Constante de equilibrio.
- G_f : Energía libre de Gibbs en base a fugacidad.
- T : Temperatura.

Un factor que modifica el equilibrio químico en un proceso es el realizarlo con modificación de la presión en el mismo, por lo cual en la siguiente grafica se observa el comportamiento de la conversión al equilibrio en función de la temperatura y a distintas presiones (Statman and Martin, 1971).

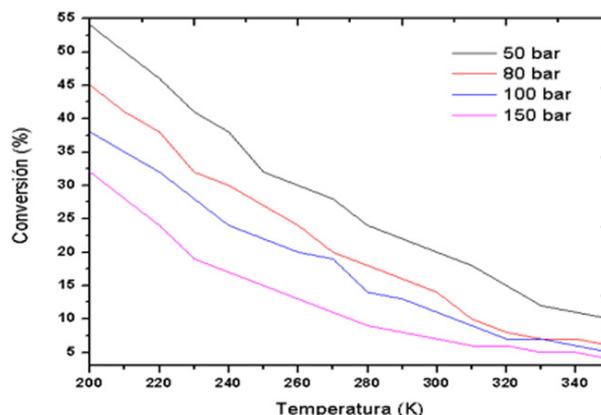


Figura 4. Porcentaje de conversión en equilibrio de la reacción en hidratación de etileno.

Por lo cual las principales variables en una planta de producción real en un proceso de hidratación de etileno operan en promedio a 265 K y 70 Bar; se mantiene un flujo de alimentación de etileno - agua de relación molar de 1.2 y una velocidad espacial de 1725 h⁻¹, recordando que la velocidad espacial por definición es el recíproco del tiempo espacial y representa el número de volúmenes de alimentación tratados en un reactor por unidad de tiempo (Turton et al., 2009).

Desarrollo

Una vez definido el proceso químico a tratar, es necesario el diseñar las diferentes etapas involucradas para el desarrollo del proceso, y en base a los reactivos

y catalizadores utilizados se requieren de un tanque reactor con una cubierta de cobre (como protección de un ataque ácido), los intercambiadores y las tuberías expuestas que sean recubiertas o hechas de cobre, y el resto de los recipientes involucrados sean de acero inoxidable (Turton et al., 2009). A continuación, se enlistan las diferentes etapas de proceso involucradas:

Un tanque de almacenamiento de etileno (TK-101).

Un tanque de almacenamiento de agua (TK-201).

Dos compresores para el propiciar el transporte de un flujo constante (C-101, C-102).

Un reactor del tipo CSTR (R-101).

Un recipiente vertical para separación de componentes que no reaccionaron (V-101).

Un recipiente horizontal para la recolección del condensado (V-102).

Una torre de destilación para realizar la separación del producto (T-101).

Intercambiadores de calor (5) entre enfriadores y calentadores de corriente (HE-101, HE-102, HE-103, HE-104, HE-105).

Una bomba con motor para trasladar el fluido deseado (P-101).

A continuación, en la figura 5 se muestra el diagrama de flujo de los diversos procesos unitarios que constituyen la planta de hidratación de etileno considera para el presente proyecto.

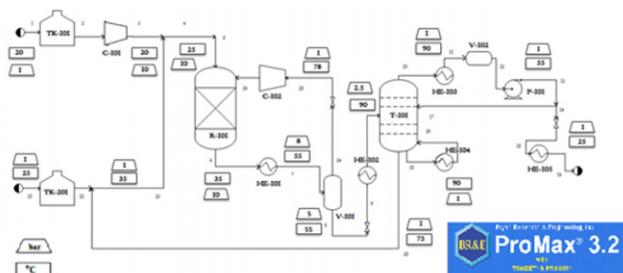


Figura 5. Diagrama de flujo de los procesos unitarios involucrados en una planta de hidratación de etileno.

Una vez definidas las etapas participantes del proceso es necesario establecer las corrientes involucradas, para posteriormente realizar los balances de masa y energía correspondientes, dichos resultados se vislumbran más adelante en la Tabla 1. También se especifican las condiciones de óptimas de operación para el proceso temperaturas entre 290 K – 360 K, y una manejar una presión entre 1 bar – 10 bar (González, 2016).

Resultados

Como se mencionó previamente se requiere de un reactor tipo CSTR; y como consecuencia de la formación de especies no deseadas y de la recirculación del proceso se tiene una conversión global del reactor está dado por la expresión siguiente:

$$\text{Conversión Global} = \frac{\text{Reactivo Consumido en el proceso}}{\text{Reactivo Alimentado al proceso}}$$

$$\text{Conversión Global} = \frac{4.70}{4.95} (100) = 95\%$$

Se sabe que la velocidad de reacción está condicionada por la segunda etapa del mecanismo de reacción; pero también dentro del diseño de la planta se emplea la metodología necesaria para el simulado ser cercano a la realidad de los diferentes equipos a las condiciones iniciales indicadas; por lo que para la selección de método termodinámico a emplear depende de las sustancias que se ven involucradas en el proceso, además de los intervalos de operación de presión y temperatura. Para este caso particular se recurrió al método termodinámico de UNIQUAC, modelo adecuado para tratar mezclas binarias (etanol – agua) además de ser una excelente opción para trabajar en el intervalo de reacción indicado previamente.

El simulador ProMax 3.2 dispone de una base datos para sustancias puras y mezclas multicomponentes, así como las herramientas matemáticas necesarias para aplicar el método termodinámico que se seleccionó, por lo que determina las propiedades necesarias para obtener los balances de materia y energía a las corrientes implicadas en el proceso. En la Tabla 1 siguiente se muestran dichos resultados.

Tabla 1. Balances de materia a las diversas corrientes involucradas en el proceso.

	Etanol Kg/min	Étileno Kg/min	Agua Kg/min	Flujo Kg/min	Presión bar	Temperatura K
1	0	4.95	0	4.95	1	290
2	0	4.95	0	4.95	1	290
3	0	4.95	0	4.95	10	290
4	0	4.95	24.75	29.70	10	295
5	0	4.95	24.75	29.70	10	295
6	4.70	0.25	19.80	24.75	10	305
7	4.70	0.25	19.80	24.75	8	325
8	4.375	0	19.80	24.175	5	325
9	4.375	0	19.80	24.175	2.5	360
10	4.375	0	0	4.375	1	360
11	4.375	0	0	4.375	1	330
12	4.375	0	0	4.375	1	325
13	4.375	0	0	4.375	1	325
14	3.50	0	0	3.50	1	325
15	3.50	0	0	3.50	1	325
16	3.50	0	0	3.50	1	295
17	0.875	0	0	0.875	1	325
18	0	0	0.675	0.675	1	360
19	0	0	0.675	0.675	1	345
20	0	0	3.15	3.15	1	345
21	0	0	21.60	21.60	1	295
22	0	0	21.60	21.60	1	295
23	0	0	24.75	24.75	1	305
24	0.575	0.25	0.575	1.40	1	348
25	0.575	0.25	0.575	1.40	1	348
26	0.575	0.25	0.575	1.40	5	348

Con los resultados obtenidos de la simulación con respecto a los balances correspondientes para las diversas corrientes que involucran el proceso, estos fueron empleados posteriormente para dimensionar y encontrar las especificaciones necesarias para los diversos equipos que componen el sistema (González, 2016).

Para el caso de una primera etapa en el proceso, los tanques TK-101 y TK-102, cada uno cuenta con una capacidad de 3000 BLS (Barril Estándar de Petróleo) equivalente a 42 gal., una altura de 7.2 m y un diámetro de 9 m (cada uno); adicionalmente el costo promedio por unidad es de \$ 66500.00 (USD). También dentro de esta etapa se consideró al compresor C-101, el cual cuenta operara a un flujo molar de 0.00294 Kmol/s, se tomó en cuenta una eficiencia del 75 % y una entrega de potencia de 44.56 kW, por último, con un costo alrededor de los \$ 77300.00 (USD). En la Figura 6 siguiente se muestra

el diagrama de los equipos que conforman la primera etapa del proceso (considere que dentro del esquema los rectángulos proporcionan el dato de temperatura y el trapecio nos otorgan el dato de la presión).

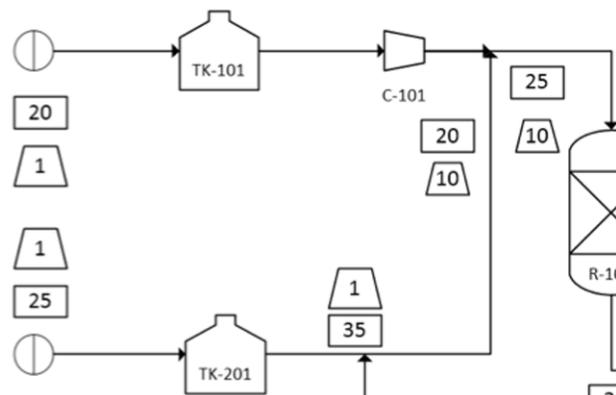


Figura 6. Primera etapa de la planta de hidratación de etileno (2 tanques y 1er compresor).

Posteriormente para una segunda etapa se encuentra el reactor CSTR (R-101), el tanque del reactor tiene una longitud de 9.6 m y un diámetro de 2.6 m, que mantiene una agitación de 500 a 1000 rpm, una cubierta interna de cobre, con un costo promedio de \$ 275000.00 (USD). También en esta etapa se tiene otro compresor (C-102), el cual cuenta operara a un flujo molar de 0.00294 Kmol/s, se tomó en cuenta una eficiencia del 75% y una entrega de potencia de 44.56 kW, por último con un costo alrededor de los \$ 77300.00 (USD). En la Figura 7 siguiente se observa el diagrama de la etapa descrita.

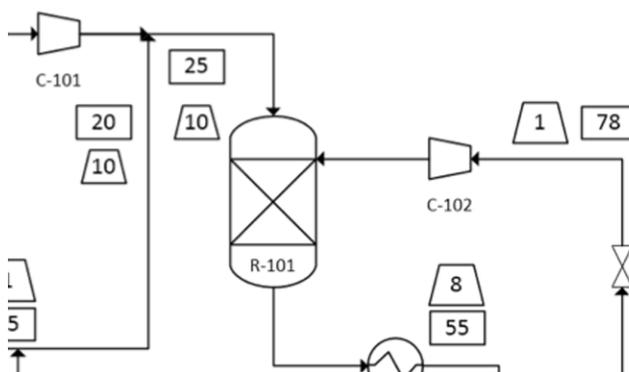


Figura 7. Segunda etapa de la planta de hidratación de etileno (reactor CSTR y 2do compresor).

Después en una tercera etapa se tiene un tanque vertical (V-101), el cual tiene una longitud de 3.2 m y un diámetro de 0.8 m y un costo de \$ 8200.00 (USD). También esta etapa se tienen dos intercambiadores de calor (HE-101, HE-102) con un área interna de 13.9 m², una potencia de 194.5 kW, con una construcción interna de doble tubo con un costo promedio de \$ 27500.00 (USD) por cada

uno. En la Figura 8 siguiente se observa el diagrama de esta etapa.

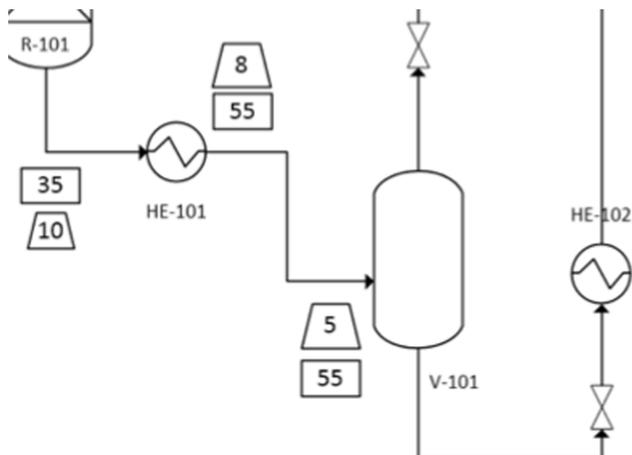


Figura 8. Tercera etapa de la planta de hidratación de etileno (tanque vertical y 2 intercambiadores de calor).

A continuación, en la cuarta etapa del proceso se tiene un tanque de destilado (T-101), con una longitud de 23.5 m y un diámetro de 2.2 m, con un número de platos $N = 21$ y un costo de \$ 12500.00 (USD). También esta etapa se tiene un intercambiador de calor (HE-104) con un área interna de 13.9 m^2 , una potencia de 194.5 kW, con una construcción interna de doble tubo con un costo promedio de \$ 27500.00 (USD). En la figura 9 siguiente se observa el diagrama de esta etapa.

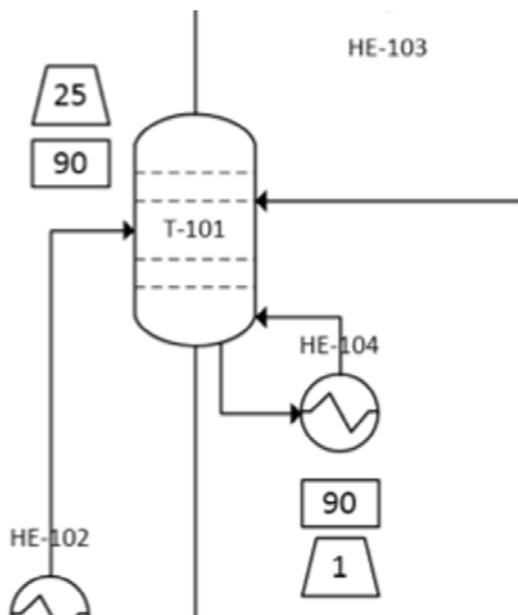


Figura 9. Cuarta etapa de la planta de hidratación de etileno (intercambiador y tanque de destilación).

Posteriormente en la quinta etapa del proceso se tiene un tanque horizontal (V-102), el cual tiene una longitud

de 2.3 m y un diámetro de 0.9 m y un costo de \$ 3400.00 (USD). También esta etapa se tiene un intercambiador de calor (HE-103) con un área interna de 13.9 m^2 , una potencia de 194.5 kW, con una construcción interna de doble tubo con un costo promedio de \$ 27500.00 (USD). Por último esta etapa se tiene una bomba (P-101) con una potencia de 0.018 kW, una eficiencia del 75% con un costo de \$ 3800.00 (USD) En la Figura 10 siguiente se observa el diagrama de la etapa descrita.

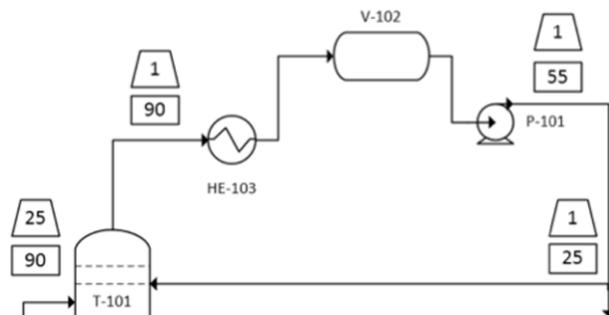


Figura 10. Quinta etapa de la planta de hidratación de etileno (intercambiador, recipiente horizontal y bomba).

Por último, en la sexta etapa del proceso se tiene un intercambiador de calor (HE-105) con un área interna de 13.9 m^2 , una potencia de 194.5 kW, con una construcción interna de doble tubo con un costo promedio de \$ 27500.00 (USD); En la Figura 11 siguiente se observa el diagrama de esta etapa.

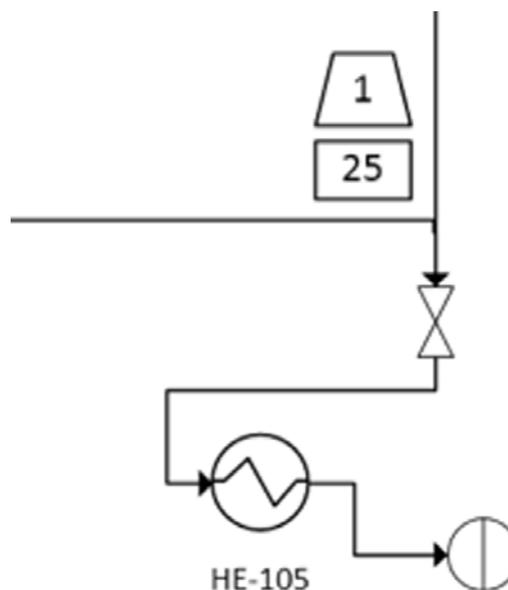


Figura 11. Sexta etapa de la planta de hidratación de etileno (intercambiador de calor).

Tomando en consideración los costos descritos anteriormente, el precio promedio en materia prima,

considerando gastos por diversas contingencias (cambio de divisas, conflictos con subcontratistas, diferencias laborales, entre otros); se determinó un costo aproximado de diseño de ingeniería para la planta descrita previamente \$ 1,205,000.00 (USD), el cual considerando un promedio de cambio de (\$ 18.50 MNX 2017) nos dice que el costo de la planta es cercano a los \$ 22,300,000.00 (MNX), tomando en cuenta información a mediados del año 2017.

Los resultados mencionados anteriormente son una estimación en el costo de implementación, construcción y operación de la planta de hidratación de etileno; la cual consta de las operaciones unitarias descritas anteriormente y también que esté operando a las condiciones iniciales especificadas anteriormente al comienzo de este escrito.

Conclusiones

El contar con herramientas computacionales nos da una gran gama de posibilidades en el desarrollo y construcción de nuevos proyectos, además de que nos permite incrementar la eficiencia de los procesos industriales ya existentes.

Utilizando el simulador ProMax 3.2 se logró construcción un diagrama de flujo del proceso de hidratación de etileno, el cual arroja datos muy cercanos a la realidad tanto en el comportamiento de cada etapa, así como las consideraciones en las dimensiones óptimas de cada etapa y una aproximación al costo de implementación del mismo.

Esta herramienta computacional es de gran utilidad en la implementación de ingeniería de procesos, esto gracias a que cuenta con una amplia gama de herramientas matemáticas y bases de datos que permiten una mejor manipulación de cada requerimiento, por lo que es posible trabajar con diferentes modelos termodinámicos (según sea el caso).

Considerando la demanda de etanol que se desea cubrir el simulador fue de gran utilidad para la determinación de diferentes caudales en las corrientes participantes, así como la determinación de los balances correspondientes involucrados dentro del proceso; adicionalmente recurriendo a las herramientas presentes en el software es posible el estimar el costo por implementación del proceso.

Referencias

Aspen Tech Press Release (2002). Obtenido de http://www.aspentech.com/publication_files/pr1-30-02.htm

Becerra Pérez L. A., (2014). "La Industria del Etanol en México". ECONOMIAUNAM, Enero - Abril 2009, Vol. 6 No. 16. México pp. 82 - 98.

BR&E, Bryan Research & Engineering, Inc., 2017

<https://www.bre.com/>

Felder Richard M., Rousseac Ronald W., (2004). "Principios Elementales de los Procesos Químicos" Editorial Limusa Wiley 3ª Edición México D. F., 611 - 623.

González Brambila M. M., (2016). "Introducción a la Ingeniería de Procesos". Editorial Limusa S. A. de C.V. México D. F., 63 - 118.

Jiménez Gutiérrez A., (2003). "Diseño de procesos en Ingeniería Química". Editorial Reverte España.

Logsdon John E., (2000). "Ethanol", Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. U. S. A. DOI: 10.1002/0471238961.0520080112150719.a01

Nelson, C. R. and Courter, M. L., (1954). "Ethanol by hydration of ethylene". Chem Eng Prog 50, 526 - 532.

Robinson R. L., (1956). To Imperial Chemical Industries, Ltd. U.S. Patent 2: 769,847

Statman M. and Martin D. S., (1971). to Eastman Kodak Co. U.S. Patent 3,554,926

Turton R., Bailie R. C., Whiting W. B., Shaewitz J. A., (2009). "Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes". 3rd Edition, Prentice Hall, U. S.