



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Escuela Politécnica Superior (Jaén)

Trabajo Fin de Máster

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE CUMENO CON ASPEN PLUS

Alumno/a: Moreno Lorca, Cristóbal

Tutores: Francisco Espínola Lozano
María Victoria Moreno Romero

Dpto.: Ingeniería Química, Ambiental y de los
Materiales

ÍNDICE

Resumen	4
1. Introducción.....	4
2. Metodología	6
2.1 Método de obtención de cumeno	6
2.2 Catalizador: Zeolita	8
2.3 Reacciones cinéticas.....	11
2.4 Características de reactivos y productos	12
2.4.1 Reactivo: benceno.....	12
2.4.2 Reactivo: propileno	13
2.4.3 Impureza: propano.....	14
2.4.4 Producto: cumeno (isopropilbenceno)	15
2.4.5 Subproducto: DIPB (diisopropilbenceno)	16
2.5 Diagramas de equilibrio de mezclas binarias	17
2.6 Modelado y simulación del proceso con Aspen plus	18
2.6.1 Tratamiento de las corrientes de entrada	20
2.6.2 Reactor cinético	20
2.6.3 Columnas de destilación	21
2.6.4 Columna de destilación de propano	22
2.6.5 Columna de destilación de benceno.....	23
2.6.6 Columna de destilación de cumeno.....	24
2.6.7 Esquema general del proceso	25
3. Resultados y Discusión.....	26
3.1 Análisis de sensibilidad en el reactor	26
3.1.1 Relación molar benceno/propileno	26
3.1.2 Temperatura de entrada al reactor	27
3.1.3 Tamaño del reactor	30
3.2 Análisis de sensibilidad en las columnas de destilación	32
3.3 Análisis de sensibilidad en la columna de destilación propano	33
3.3.1 Relación de Reflujo	33
3.3.2 Ubicación de la bandeja de alimentación	33
3.3.3 Número de etapas en la columna	35
3.3.4 Resultado final optimizado	36
3.4 Análisis de sensibilidad en la columna de destilación benceno.....	36
3.4.1 Relación de Reflujo	36
3.4.2 Ubicación de la bandeja de alimentación	37
3.4.3 Número de etapas en la columna	38
3.4.4 Resultado final optimizado	39
3.5 Análisis de sensibilidad en la columna de destilación cumeno	39
3.5.1 Relación de Reflujo	39
3.5.2 Ubicación de la bandeja de alimentación	40
3.5.3 Número de etapas en la columna	41

3.5.4 Resultado final optimizado	42
3.6 Descripción detallada del diagrama de flujo final resultante	43
3.7 Producto final obtenido	46
4. Conclusiones	47
5. Referencias	48

RESUMEN

En este trabajo se desarrolla un modelo estacionario de simulación con Aspen Plus para la fabricación de cumeno a partir de benceno y propileno, optimizando el proceso químico-industrial idóneo. Se realiza un diseño del proceso de obtención de cumeno detallado y justificando las especificaciones de cada una de las unidades que consta. En el diagrama de flujo se identifican los materiales, las operaciones de cada unidad y los procesos involucrados para un estudio de análisis sensibilidad sobre el modelo desarrollado, que permitió identificar las variables críticas y optimizar el rendimiento de cada uno de los equipos empleados. Estas unidades se optimizan secuencialmente en el orden en que aparecen en el diagrama de flujo.

1. Introducción

El isopropilbenceno (IPB) comúnmente llamado cumeno es un hidrocarburo aromático, líquido incoloro, insoluble en agua e inflamable. Tiene una gran demanda en la industria química debido a la gran cantidad de aplicaciones en el que es utilizado este producto. Los principales demandantes de cumeno son el fenol con el 95% de la demanda mundial de cumeno en el año 2011 y seguido de la acetona. Debido a que en la producción de fenol y acetona necesitan el cumeno como materia a través del proceso Hock.

A continuación podremos observar la cantidad de productos que utiliza el cumeno, así confirma la existencia de una gran demanda de cumeno. Por ejemplo el bisfenol A es el principal derivado del fenol empleado para la fabricación de resina epoxi. Esta resina es utilizada en neumáticos, aislamientos, dispositivos médicos o dentales. Por otro lado destacar que últimamente la demanda de fenol está creciendo para la fabricación de caprolactama a partir del cual se obtiene el Nylon debido al uso de este material como fibra textil. La acetona sin embargo se utiliza en la producción de polimetilmetacrilato, cuya resina sintética con aspecto de vidrio es empleada en el sector de la construcción. Otras aplicaciones en las que el cumeno se utiliza son en la industria farmacéutica, clínica o agrícola en los que se emplea como antiséptico, fungicida y desinfectante. Por último otras aplicaciones en las que el cumeno se encuentra presente son el disolvente de barnices y pinturas, esmaltes, lacas y combustible de los aviones que mejora su octanaje.

Sin embargo a nivel global, la producción y la demanda del cumeno ha sido dominada en gran medida por los países más desarrollados. En el 2013, el Noreste de Asia (China, Japón, Taiwán y la República de Corea) representó el 39% de la demanda total de cumeno, seguida de América del Norte con el 24% y Europa Occidental con el 23%. El consumo de China será el que sufra un crecimiento más rápido, con una tasa anual promedio de previsiones de crecimiento de alrededor del 12,5%. Por ello, se calcula que alrededor de 12.400.000 toneladas de cumeno se consumieron globalmente en 2012 y con la creciente demanda en diversas

industrias como plásticos, compuestos, laminados y otras industrias se espera que esta demanda llegue a 17.000.000 toneladas de cumeno para 2018. [1,16]

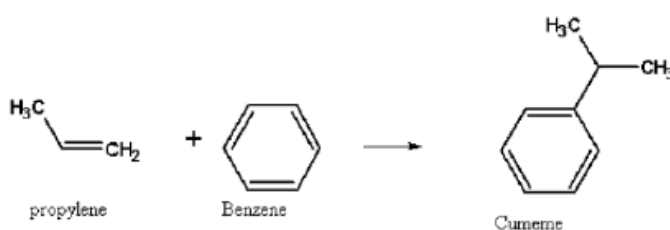
En España, concretamente en la provincia de Huelva se ubica la Planta Química Cepsa de Palos de la Frontera cuyo complejo industrial además dispone de una Planta de Refinería llamada "La Rábida", que la abastece de benceno y propileno para la fabricación de fenol con una capacidad de 600.000 t/a, 800.000 t/a de cumeno, 370.000 t/a de acetona, 24.000 t/a de alifametileno, 15.000 t/a de metalinas y 7.000 t/a de derivados. Para la recepción de materias primas y expedición de productos terminados dispone de la Terminal Portuaria "Reina Sofía" y de cargaderos de camiones cisternas [8,17].

Debido a este gran volumen de mercado el proceso de producción de cumeno necesita ser estudiado y sugerir mejores ideas que reduzcan el coste de producción con el menor impacto posible sobre el medio ambiente y siendo un proceso seguro. Para ello se emplea el software de simulación ASPEN PLUS capaz de realizar un diseño óptimo, obteniendo la máxima conversión de los reactivos en el producto deseado, reduciendo las emisiones y residuos, minimizando la energía y el flujo de corrientes de entrada de reactivos empleados en el proceso.

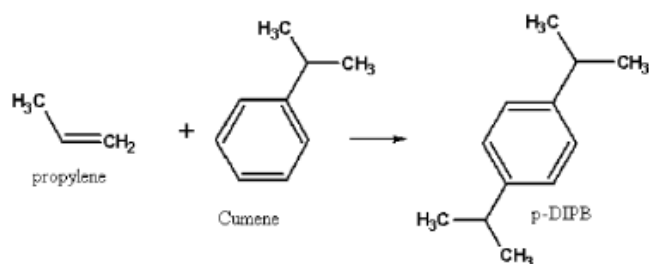
Para conseguir estos objetivos se realizará la simulación del comportamiento real del proceso de producción de cumeno. Identificando los materiales, las operaciones de la unidad y los procesos involucrados. Todo esto siempre obteniendo la optimización del proceso en cada unidad las cuales se toma en consideración las variables mediante un análisis de sensibilidad.

En este proceso de producción de cumeno la síntesis puede realizarse en fase gaseosa o líquida. Antes de 1990 predominaban los procesos de alquilación en fase gaseosa pero hoy en día los procesos se realiza a partir de la alquilación de benceno con propileno en fase líquida empleando zeolitas como catalizadores [2]. El diseño del proceso consta de dos partes bien diferenciadas.

1. Zona de Reacción: producida en el reactor adiabático. En esta zona no ocurre únicamente la reacción de síntesis de cumeno, si no que existe una reacción paralela de formación DIPB (para-diisopropilbenceno).



Reacción principal de alquilación



Reacción secundaria de síntesis de DIPB

2. *Zona de Destilación*: en la que se procederá a la separación del producto deseado del resto. Para ello se utilizan tres columnas de destilación en el que se tiene en cuenta los puntos de ebullición de los compuestos a separar. La primera columna de destilación se utiliza para separar el propano del resto, las propiedades del propano hace que pueda ser utilizado como combustible en el proceso. La Segunda columna de destilación se emplea para separar el benceno que posteriormente se recicla del resto de productos como son DIPB y cumeno. Y la tercera columna de destilación se obtiene por la cabeza el cumeno con una pureza del 99,8 % y por la parte inferior DIPB.

2. Metodología

2.1 Método de obtención de cumeno

Este estudio sigue el proceso diseñado Dimian y Bildea [2] que produce un cumeno de alta calidad por alquilación de benceno con propileno usando zeolitas como catalizador. Este proceso se caracteriza por tener un alto rendimiento, una mejor calidad del producto, reducción de las inversiones y los costos de operación y un ambiente libre de corrosión. Además, permite disminuir la proporción benceno/propileno en la alimentación del reactor.

A continuación se describe este tipo de proceso de producción de cumeno en el que benceno y propileno reaccionan sobre un catalizador de zeolita en un reactor de lecho fijo, en fase líquida. Para ello se han de conseguir las condiciones de temperatura y presión idóneas mediante bombas e intercambiadores de calor antes de entrar en el reactor y en las diferentes unidades que intervienen en el proceso. Este método tiene la siguiente estructura:

1. El benceno fresco se combina con el benceno recuperado de la columna de destilación con ayuda de un mezclador. Señalar que este reactivo entra en el reactor en exceso. A este producto se le aplica un pretratamiento de compresión hasta alcanzar los 35 bares.

2. Propileno con un 5% de propano como impureza entra en un nuevo mezclador con la mezcla de benceno pretratados para posteriormente entrar a un intercambiador.
3. Un intercambiador eleva la temperatura de la mezcla de benceno y propileno hasta alcanzar los 170 °C. posteriormente entran al reactor.
4. Los reactivos entra en el reactor multitubular de lecho fijo con un 66% de volumen de los tubos ocupados por zeolita. Dentro del reactor ocurren las dos reacciones de alquilación descritas anteriormente. Estas dos reacciones son exotérmicas por lo que la temperatura del producto a la salida del reactor es más elevada, en este caso alcanza los 258 °C.
5. El producto de salida del reactor pasa por un intercambiador para reducir su temperatura hasta alcanzar los 150 °C.
6. Observando los puntos de ebullición de los componentes, Tabla 1, se obtiene la secuenciación de las separaciones de los diferentes productos.

Componente	T_b (°C)
Propileno	-47,7
Propano	-42,17
Benceno	80,1
Cumeno (IPB)	152,5
Diisopropilbenceno (DIPB)	210,3

Tabla 1: Punto de ebullición de los compuestos salida del reactor.

Al existir una gran diferencia entre los puntos de ebullición de estos compuestos, se plantea la destilación como proceso indicado para su separación. La columna de destilación de propano es la primera columna de separación ya que posee el menor punto de ebullición. El propano será el compuesto clave ligero, para el cual se requiere una recuperación prácticamente total. Y por el fondo de la columna saldrá el resto de productos de la reacción los cuales son cumeno, DIPB y benceno.

7. Columna de destilación de benceno, en esta columna tiene lugar la separación del reactivo benceno del efluente líquido formado por cumeno y DIPB (diisopropilbenceno). Este benceno es recirculado al inicio del proceso ya que puede ser utilizado.
8. Columna de destilación de cumeno en ella se realiza la destilación al vacío, es decir, la operación se realiza a una presión menor a la atmosférica, con el objetivo de que los componentes de la mezcla destilen a una temperatura menor a su punto de ebullición los cuales son Cumeno T_b= 152,5 °C y DIPB

$T_b = 210,3 \text{ }^\circ\text{C}$. en esta columna se obtiene cumeno en la cabeza final con una pureza del 99,9 % mientras que en el fondo obtenemos DIPB [2].

Todo el proceso de producción y purificación de cumeno anteriormente descrito aparece de forma gráfica en la Figura 1.

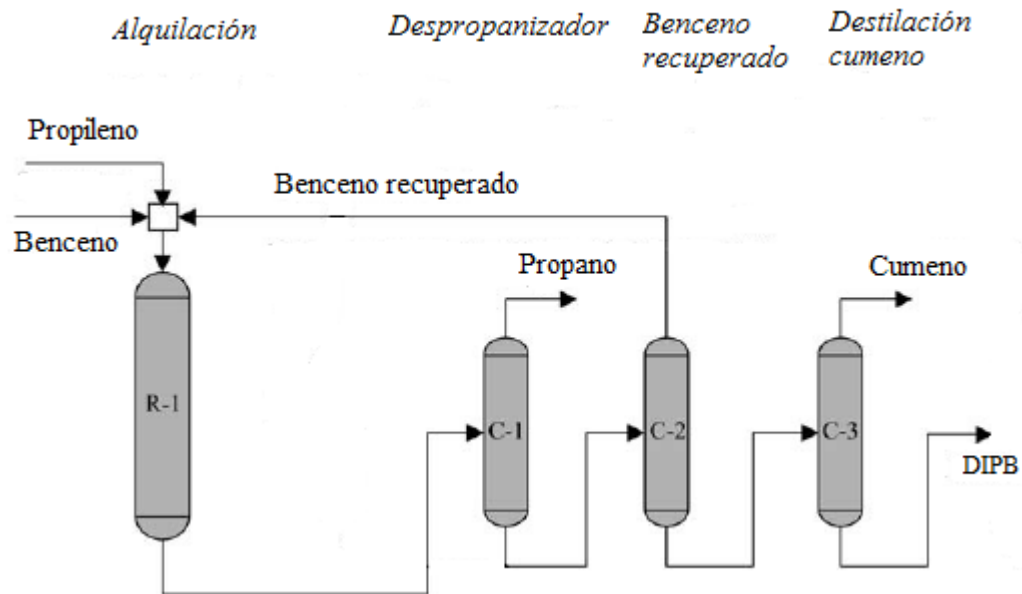


Figura 1: Diagrama de flujo conceptual para el proceso de producción de cumeno: (R-1) Reactor, (C-1) columna de propano, (C-2) columna de recuperación de benceno, (C-3) columna de cumeno

2.2 Catalizador: zeolita

La elección del catalizador es uno de los aspectos claves en la optimización del proceso de producción de cumeno. La función principal del catalizador es acelerar la reacción química sin intervenir en ella con la mayor selectividad y rendimiento a la menor temperatura posible. En cuanto a la elección de un catalizador algunos de los aspectos más importantes a tener en cuenta son: la vida útil, precio y posibilidad de regeneración.

Para la reacción de alquilación de benceno con propileno a lo largo de la historia se han utilizado catalizadores ácidos como el ácido fosfórico soportado sobre sílice (SPA) utilizado en procesos en fase gas y el cloruro de aluminio (AlCl_3) empleado en fase líquida. Estos productos siempre han presentado algunas desventajas en su uso que son mostradas a continuación.

Desventajas del uso del ácido fosfórico soportado sobre sílice (SPA):

- No puede regenerarse.
- Permite la formación de más DIPB del deseado.
- Rendimiento respecto al cumeno está limitado al 95%

Desventajas del uso de Cloruro de Aluminio (AlCl_3):

- Posee alto poder corrosivo y riesgo ambiental
- Produce un coste añadido al tener que realizar un paso de limpieza para eliminar los restos de catalizador.
- Baja actividad.

Hoy en día, el proceso de producción de cumeno se realiza utilizando zeolitas puesto que elimina gran parte de desventajas obtenidas por el uso de catalizadores ácidos. Por ejemplo las zeolitas pueden regenerarse, por tanto no generan más residuos, producen mayores rendimientos, no son corrosivas y son inocuas para el medio ambiente.

Las zeolitas son sólidos cristalinos y formadas por estructuras hechas de silicio, aluminio y oxígeno que forman un marco con cavidades y canales en el interior donde cationes, agua y/o pequeñas moléculas pueden residir. Estas cualidades permiten conseguir una alta selectividad y obtener mejores rendimientos.

Las zeolitas a menudo también se denominan como tamices moleculares, muchas de ellos aparecen naturalmente como minerales y minan ampliamente en muchas partes del mundo la búsqueda de aplicaciones en la industria y la medicina. Sin embargo, la mayoría de las zeolitas se han hecho sintéticamente. Existen 191 tipos de zeolitas identificadas y más de 40 tipos de zeolitas naturales conocidas.

En la actualidad, en el proceso de producción de cumeno cinco tipos de zeolitas son las más utilizadas: Beta, Y, ZSM-12, MCM-22 y Modernita. En la Tabla 2 puede observarse la selectividad obtenida con diferentes zeolitas en el proceso de síntesis del cumeno [3].

	Zeolite-beta	Mordenite	MCM-22	Zeolite-Y
Selectividad global propileno (%)	99.87	98.61	98.74	98.30

Tabla 2: selectividad obtenida con diferentes zeolitas

Los procesos comerciales de producción de cumeno se basan en dos zeolitas las cuales tienen mejor selectividad en la tabla anterior que son: Zeolita Beta y Zeolita MCM-22. La zeolita Beta es una zeolita tridimensional con poros de aproximadamente 0,65 x 0,67 x 0,56 nm, mientras que la segunda está formada por un sistema de canales de poro medio y otro sistema independiente formado por grandes cavidades de 12 tetraedros conectadas entre sí a través de ventanas de 10 tetraedros, Figura 2.

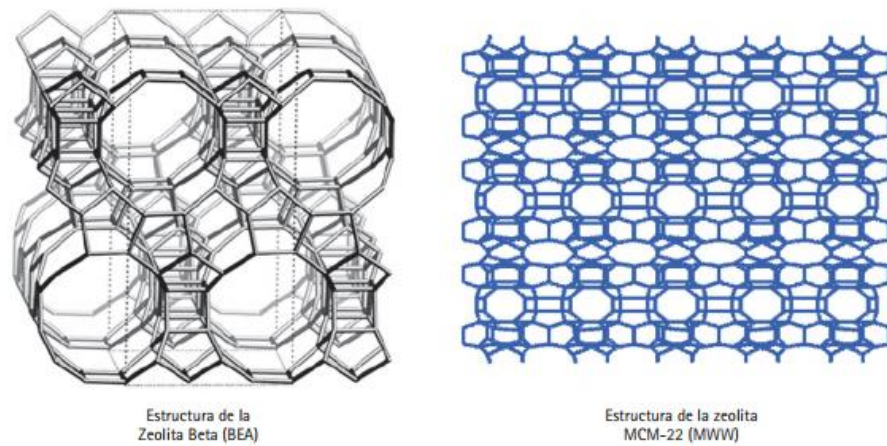


Figura 2: Estructura Zeolita Beta y Zeolita MCM-22

En los estudios recientes se ha visto que la reacción de alquilación de benceno con propileno tiene lugar, en el caso de Zeolita MCM-22, sobre la superficie externa de los cristales que, en este caso, está perfectamente estructurada y formada por cavidades abiertas al exterior en forma de “copas” de aproximadamente 0,7 x 0,7 nm. También se ha desarrollado un nuevo material, denominado ITQ-2, por delaminación de un precursor laminar de la zeolita MCM-22, Figura 3. El material ITQ-2 con acidez fuerte expone un gran número de “copas” al exterior, por lo que su actividad y resistencia a la desactivación para el proceso de alquilación de benceno con propileno son superiores a la Zeolita MCM-22, por esta razón, el catalizador ITQ-2 para este proceso sería idóneo [6].

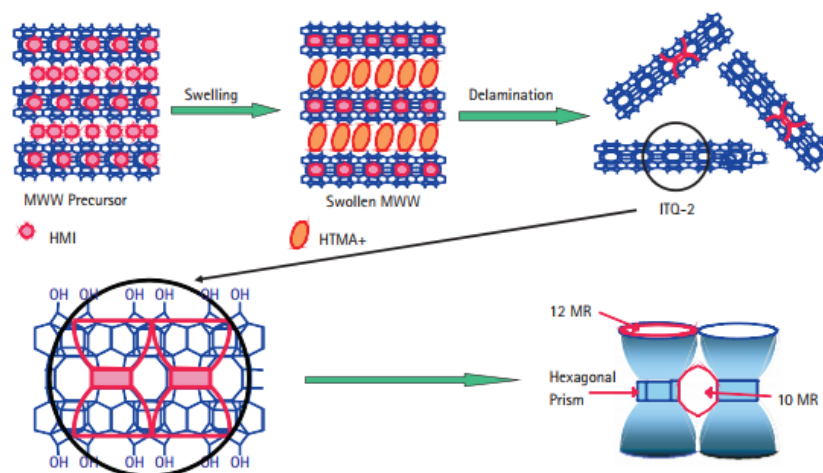


Figura 3: Formación de Zeolita ITQ-2 por delaminación de la Zeolita MCM-22.

2.3 Reacciones cinéticas

Como se ha indicado anteriormente, en el proceso de producción de cumeno a partir de la alquilación de benceno y propileno, no se forma únicamente cumeno, sino que existe una reacción paralela de formación de DIPB (diisopropilbenceno) en la Figura 4 pueden verse las reacciones que ocurren en el reactor cinético del proceso.

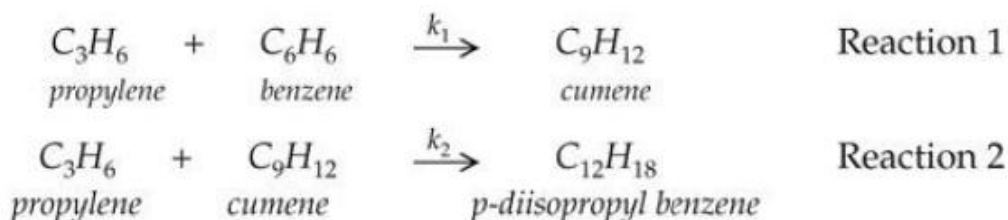


Figura 4: Reacción 1 de síntesis de cumeno, Reacción 2 síntesis de DIPB

Ambas reacciones son irreversibles y sus datos cinéticos se presentan en la Tabla 3, [4].

	Reacción 1	Reacción 2
K	$2,8 \cdot 10^7$	$2,32 \cdot 10^9$
E (kJ/Kmol)	104174	146742
Términos de concentración	$C_{C_3H_6} \cdot C_{C_6H_6}$	$C_{C_3H_6} \cdot C_{C_9H_{12}}$

Tabla 3: Datos cinéticos de las reacciones

En nuestro proceso de alquilación debemos de tener en cuenta la actuación de la zeolita. Por tanto, los datos cinéticos no son los mismos que los recogidos en la Tabla 3. Como ya mencionamos anteriormente, la zeolita ITQ-2 es idónea para este proceso, pero al ser una zeolita realmente nueva no existe bibliografía de ensayos que recojan los datos cinéticos que ocurren en estas reacciones. Por ello, los datos cinéticos empleados corresponden a ensayos elaborados y publicados por Corma et al. [3] en los que se recogen los resultados de la reacción en presencia de la Zeolita MCM-22. Estos resultados se obtuvieron al realizarse la alquilación en un reactor de flujo en fase líquida cargado con dicho catalizador con una presión de 35 bares y temperatura de 180 °C, Tabla 4.

	Reacción 1	Reacción 2
K	6510	450
E(kj/Kmol)	52564	55000

Tabla 4: Datos cinéticos de las reacciones en presencia del catalizador

Puede observarse que la constante de velocidad en la primera reacción es mayor que en la segunda reacción, esto hace que favorezca la selectividad y este decantada por la formación del cumeno.

2.4 Características de reactivos y productos

2.4.1 Reactivo: benceno

El benceno, cuya estructura química se muestra en la Figura 5, es un hidrocarburo poliinsaturado de seis átomos de carbono, representante de la familia de hidrocarburos aromáticos, cuya fórmula empírica es C_6H_6 , que posee una forma de anillo, (de ahí que reciba el nombre de anillo bencénico). Los átomos de carbono comparten sus electrones libres de forma similar a los enlaces covalentes corrientes, de modo que su estructura molecular adquiere una gran estabilidad.

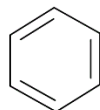


Figura 5: Benceno

Químicamente es un líquido incoloro de aroma dulce, que se evapora rápidamente en la atmósfera y con una solubilidad en agua bastante escasa. Sus principales propiedades físicas se muestran en la Tabla 5.

Propiedad Benceno	Valor
Peso molecular (kg/Kmol)	78,8
Punto de fusión a presión atmosférica (°C)	5,56
Punto de ebullición a presión atmosférica (°C)	80,08
Densidad a 20 °C (kg/m ³)	875,6
Solubilidad en agua a 25 °C (kg/kg de H ₂ O)	0,179
Densidad relativa de vapor (aire=1)	2,8
Presión de vapor a 20 °C (Pa)	12,6
Viscosidad a 25 °C (mPa·s)	0,604
Calor de combustión (kJ/mol)	-3,367 · 10 ³
Calor de vaporización a 25 °C (kJ/mol)	33,83
Temperatura de Autoignición (°C)	500

Tabla 5: propiedades físicas del benceno

Efectos sobre la salud humana.

El Departamento de Salud y Servicios Humanos (DHHS, siglas en inglés) ha determinado, mediante estudios epidemiológicos, que el benceno es un reconocido carcinógeno en seres humanos, por lo que una exposición continua a elevados niveles de benceno en el aire, puede provocar leucemia.

La inhalación de esta sustancia en pequeñas dosis, puede causar somnolencia, mareo, aceleración del latido del corazón, dolores de cabeza, temblores, confusión y pérdida del conocimiento. Por ingestión, provoca vómitos e irritación estomacal, mareos y convulsiones con rápidos latidos cardíacos [10].

2.4.2 Reactivo: propileno

El propileno, cuya estructura química se muestra en la Figura 5, es también conocido como propeno es un gas que tiene mal olor, incoloro y se suministra como gas licuado. Se produce a partir de combustibles fósiles: petróleo, gas natural y carbón. El propeno se puede separar por destilación fraccionada de la mezcla de hidrocarburos obtenida del craqueo y otros procesos de refinado. Generalmente se encuentra con una impureza del 5% de propano.

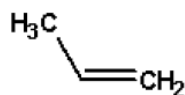


Figura 5: Propileno

El propeno es un alqueno formado por 3 átomos de carbono y 6 átomos de hidrógeno, su fórmula global es C_3H_6 . Es un homólogo del etileno que presenta el doble enlace como grupo funcional. En la Tabla 6 se muestran sus principales propiedades físicas.

Propiedad Propileno (propeno)	Valor
Peso molecular (kg/Kmol)	42,08
Punto de fusión a presión atmosférica (°C)	-185,2
Punto de ebullición a presión atmosférica (°C)	-47,7
Densidad a 20 °C (kg/m ³)	1,748
Solubilidad en agua a 20 °C (L gas/L de disolvente) Agua	44,6
Densidad relativa de vapor (aire=1)	0,5
Presión de vapor a 25 °C (KPa)	1158
Viscosidad a 25 °C (mPa·s)	$8,34 \cdot 10^3$
Calor de combustión (kJ/mol)	1927,48
Calor de vaporización a 25 °C (kJ/mol)	18,14
Temperatura de Autoignición (°C)	460

Tabla 6: propiedades físicas del propileno

Efectos sobre la salud humana.

La Inhalación de esta sustancia puede tener efectos perjudiciales al sistema nervioso central, los cuales pueden incluir excitación, euforia, dolor de cabeza, mareos, adormecimiento, visión nublada, fatiga, convulsiones, pérdida de conciencia, coma, paro respiratorio e incluso puede provocar la muerte.

Además de causar anemia y arritmia cardiaca. En cuanto al contacto con la piel con sustancias licuadas puede causar quemaduras [11].

2.4.3 Impureza: propano

Propano es un alcano formado por 3 átomos de carbono y 8 átomos de hidrógeno, como se muestra en la Figura 6, su fórmula es C_3H_8 . Se transporta como gas licuado y se obtiene principalmente como subproducto a partir de gas natural y del refino de petróleo.



Figura 6: Propano

Este producto se presenta en estado gaseoso, es incoloro y fácilmente inflamable. Tiene un olor fuerte parecido al de los disolventes y mezclado con el aire puede ser explosivo. En cuanto al uso destaca como combustible empleado como uso doméstico como industrial en hornos. También se emplea en motores de combustión interna o turbinas de gas para generar electricidad. En la Tabla 7 se muestran sus principales propiedades físicas.

Propiedad Propano	Valor
Peso molecular (kg/Kmol)	44,1
Punto de fusión a presión atmosférica (°C)	-187,6
Punto de ebullición a presión atmosférica (°C)	-42,1
Densidad a 20 °C (kg/m ³)	1,98
Solubilidad en agua a 25 °C (kg/kg de H ₂ O)	62,4 · 10 ⁻⁶
Densidad relativa de vapor (aire=1)	1,6
Presión de vapor a 25 °C (KPa)	12,6
Viscosidad a 25 °C (mPa·s)	0,09
Calor de combustión (kJ/mol)	2,202 · 10 ³
Calor de vaporización a 25 °C (kJ/mol)	14,79
Temperatura de Autoignición (°C)	450

Tabla 7: propiedades físicas del propano

Efectos sobre la salud humana.

En cuanto a la inhalación: Al producirse pérdidas en zonas confinadas este líquido se evapora muy rápidamente originando una saturación total del aire con grave riesgo de asfixia. La inhalación de los vapores provoca irritación de nariz y garganta. En lugares cerrados puede producir mareos y asfixia. En contacto con la piel produce quemaduras por enfriamiento, irritación y

enrojecimiento de la zona del contacto. El contacto repetitivo puede causar resequeidad de la piel o dermatitis [12].

2.4.4 Producto: cumeno (isopropilbenceno)

El cumeno también denominado isopropilbenceno, es un compuesto químico clasificado como hidrocarburo aromático. En la Figura 7 se puede observar su estructura química.

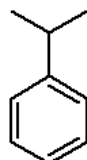


Figura 7: Cumeno

El cumeno es un líquido, aromático penetrante, incoloro e inflamable. Se emplea principalmente para la síntesis de fenol y acetona mediante el proceso Hock. El cumeno se utiliza como disolvente de pinturas y barnices, precursor de resinas y de estireno muy empleado en la Industria Química. La planta con mayor producción de cumeno pertenece a la compañía Cepsa, la cual es el primer productor mundial de cumeno produciendo alrededor de 1.000.000 toneladas/año. En la Tabla 8 se muestran las principales propiedades físicas.

Propiedad Cumeno	Valor
Peso molecular (kg/Kmol)	120,2
Punto de fusión a presión atmosférica (°C)	-96,0
Punto de ebullición a presión atmosférica (°C)	152
Densidad a 20 °C (kg/m ³)	0,862
Solubilidad en agua a 25 °C (kg/kg de H ₂ O)	6,13·10 ⁻⁵
Densidad relativa de vapor (aire=1)	4,2
Presión de vapor a 20 °C (Pa)	427
Viscosidad a 25 °C (mPa·s)	0,737
Calor de combustión (kJ/mol)	43,37
Calor de vaporización a 25 °C (kJ/mol)	45,13
Temperatura de Autoignición (°C)	420

Tabla 8: propiedades cumeno

Efectos sobre la salud humana.

Su inhalación puede provocar irritación en las vías respiratorias. En cuanto al contacto con la piel no se conocen efectos significativos o riesgos críticos pero puede ser mortal en caso de ingestión y de penetración en la vía respiratoria e irritante para la boca, garganta y estómago [13].

2.4.5 Subproducto: DIPB (diisopropilbenceno)

El diisopropilbenceno es un hidrocarburo líquido inflamable de color ámbar y olor penetrante. Existen tres isómeros: orto, meta y para, Figura 8.

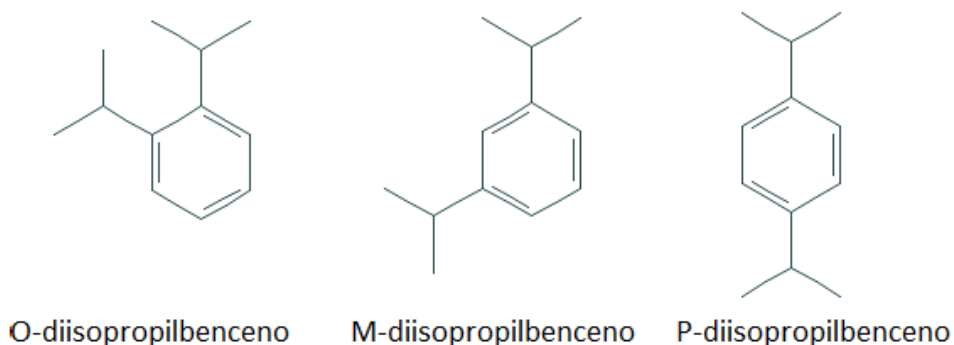


Figura 8: Isómeros del Diisopropilbenceno

En el proceso de alquilación de cumeno mediante propileno y benceno aparece este producto en la segunda reacción que ocurre de forma paralela a la síntesis de cumeno en el reactor. De esta forma aparece p-diisopropilbenceno. En la Tabla 9 se muestran las principales propiedades físicas.

Propiedades del DIPB	Valor
Peso molecular (kg/Kmol)	162,276
Punto de fusión a presión atmosférica (°C)	-61,0
Punto de ebullición a presión atmosférica (°C)	210,3
Densidad a 20 °C (kg/m ³)	0,856
Solubilidad en agua a 25 °C (kg/kg de H ₂ O)	-
Densidad relativa de vapor (aire=1)	5,6
Presión de vapor a 20 °C (Pa)	52,4
Viscosidad a 25 °C (mPa·s)	1,19
Temperatura de Autoignición (°C)	449

Tabla 9: propiedades físicas de la mezcla de DIPB

Efectos sobre la salud humana.

La inhalación de este producto puede producir dolor de cabeza, somnolencia y vértigo [14].

2.5 Diagramas de equilibrio de mezclas binarias

La base de la destilación es el equilibrio de fase que puede ser VLE (equilibrio líquido-vapor) y LLE (equilibrio líquido-líquido). Antes de diseñar cualquier equipo de destilación las características de VLE necesitan ser estudiadas ya que dan una idea acerca del comportamiento en la destilación. Se representan gráficamente el diagrama T-xy o la temperatura frente a la composición de líquido (x) y de vapor (y). A continuación se presentan en las Figuras 9, 10 y 11 los diagramas líquido-vapor correspondientes a las parejas de compuestos con puntos de ebullición más próximos entre sí: propano/benceno, benceno/cumeno y cumeno/DIPB, respectivamente.

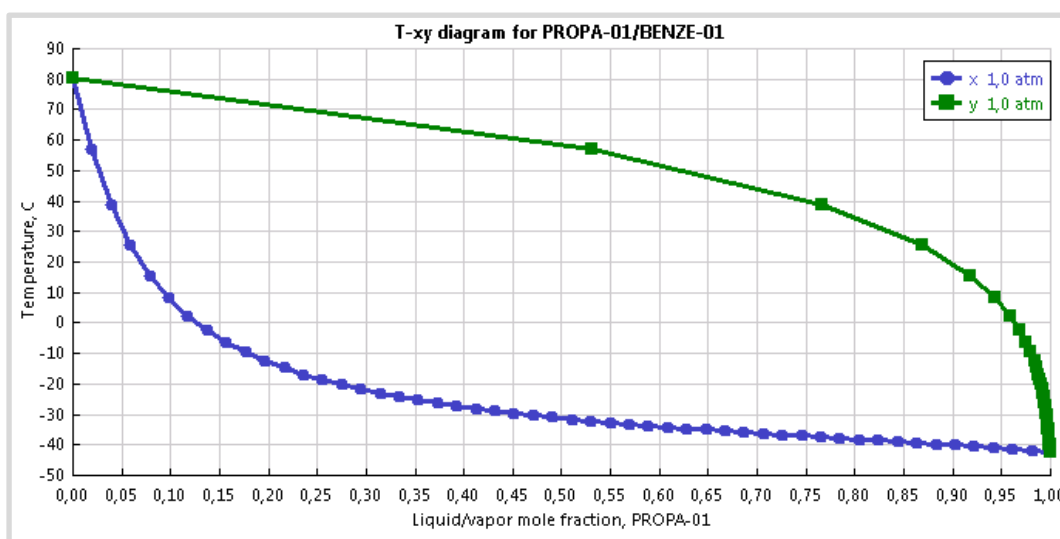


Figura 9: Diagrama temperatura-composición para la mezcla de propano/benceno

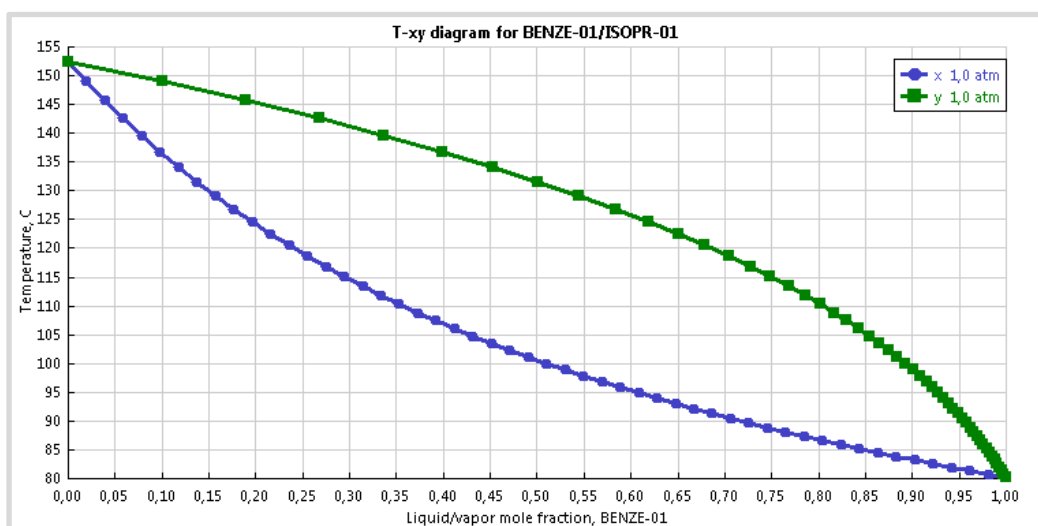


Figura 10: Diagrama temperatura-composición para la mezcla de benceno/cumeno

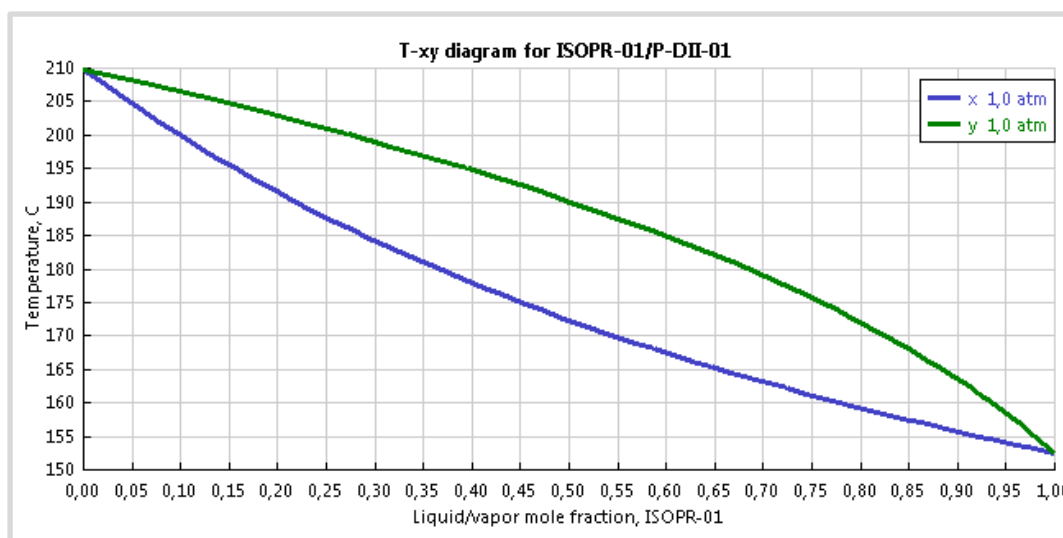


Figura 11: Diagrama temperatura-composición para la mezcla de cumeno/DIPB

En los gráficos de las Figuras 9, 10 y 11 se puede ver que no existe la formación de azeótropos, es decir, no existe ningún punto a cierta temperatura y presión en la mezcla que tenga la misma composición de las fases líquido y vapor. Por tanto, la separación sería fácil, utilizando una columna de destilación con menos bandejas y una menor relación de reflujo [7].

2.6 Modelado y simulación del proceso con Aspen plus

La elaboración del presente estudio se ha desarrollado con el software de simulación Aspen Plus propiedad de la empresa Aspen Technology, se utiliza la versión V 8.4, no es la última, actualmente existen en el mercado otras versiones mejoradas, no obstante, para nuestros propósitos es suficiente ya que ofrece una solución en el diseño de industrias de procesos químicos.

Las etapas de tratamiento se visualizan en el simulador mediante el diagrama de flujo, así como los componentes o compuestos químicos que se transportan desde una unidad a otra, a través de las corrientes de proceso. El modelado de simulación del proceso con Aspen Plus comprende los siguientes pasos:

1. Especificación de los compuestos químicos en el proceso. Para ello el simulador posee un banco de datos de propiedades de compuestos puros. La mayoría de los componentes puros son compuestos orgánicos, pero también se incluyen compuestos inorgánicos y electrolitos. Todos estos componentes pueden elegirse al igual que las condiciones en las que se van a llevar a cabo el proceso.
2. Especificación de los modelos termodinámicos. Una vez seleccionado los componentes clave en este proceso: benceno, propileno, propano, cumeno y p-diisopropilbenceno, se debe seleccionar el modelo termodinámico ya que se utiliza para calcular las propiedades termodinámicas y de transporte

de los componentes y sus mezclas en la simulación, como entalpía, entropía, densidad, calor específico, equilibrio L-V, etc. Para el proceso diseñado se utiliza la ecuación de estado de Peng-Robinson. Esta ecuación de estado es una modificación de estado de Redlich-Kwong que representa mejor los cálculos del equilibrio líquido-vapor.

3. Definir el diagrama de flujo de proceso. En él se selecciona cada una de las unidades de operación necesarias disponibles en la librería de modelos de Aspen Plus y son colocadas en el diagrama de flujo de proceso conectadas entre sí mediante las corrientes de proceso.

En este proceso de alquilación de cumeno mediante benceno y propileno se caracteriza por poseer dos zonas diferenciadas: *Zona de Reacción* y *Zona de Separación*. Existe una relación entre ambas zonas para mejorar la pureza del producto ya que si aumentamos el coste de trabajo del reactor, el coste de separación disminuye y viceversa. Por tanto la secuencia de simulación es la mostrada en la Figura 12.

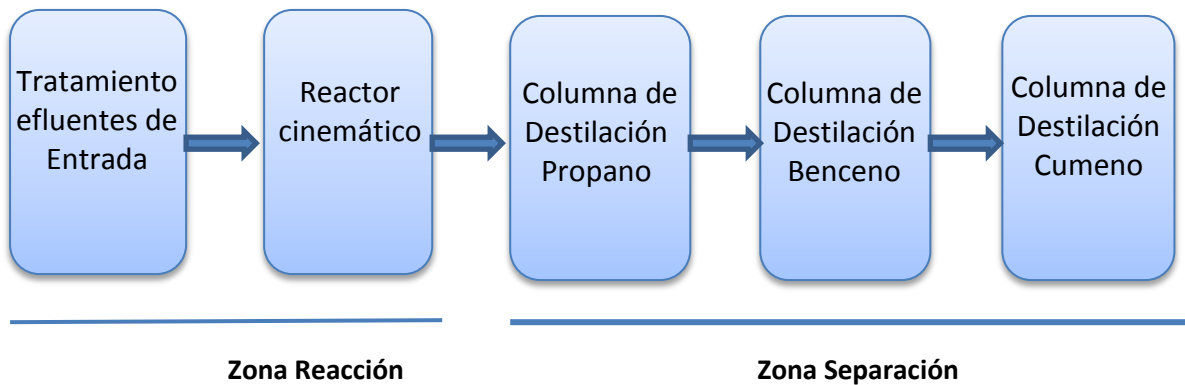


Figura 12: Secuencia de Simulación.

4. Especificación de los caudales de los componentes y las condiciones termodinámicas (temperatura, presión y composición) de todas las corrientes de alimentación.
5. Especificación de las condiciones de funcionamiento de los modelos de funcionamiento de la unidad [9].

A continuación detallaremos las condiciones establecidas en cada una de las unidades utilizadas en el diagrama de flujo para el proceso de obtención de cumeno.

2.6.1 Tratamiento de las corrientes de entrada

Nuestra planta de producción de cumeno simulada procesa 1000 kmol/h de propileno que durante 300 días al año, 24 horas al día equivale a más de 360.000 toneladas anuales. Por lo tanto la capacidad de producción de nuestra planta simulada será de 800.000 toneladas de cumeno al año con un 99,9 % de pureza.

Partimos de dos corrientes de entrada, una de benceno y otra de propileno con un 5% de impureza de propano. El benceno se presenta en estado líquido en condiciones normales, mientras que el propileno y propano se encuentra en estado gaseoso. Por lo tanto debemos adecuar los efluentes de entrada a las condiciones que garanticen una única fase líquida.

Mediante un compresor alcanzamos las condiciones que garantizan que propileno y propano se encuentren en estado líquido con 25 °C de temperatura y 35,5 bares de presión. Sin embargo, el benceno se presenta ya a 25 °C de temperatura y 35,5 bares de presión. Una vez alcanzadas estas condiciones las dos corrientes pasan al mezclador y posteriormente por un intercambiador de calor para aumentar su temperatura hasta 170 °C que es la necesaria a la entrada de reactor y así favorecer la reacción. El gráfico que identifica mezclador y bomba en la pantalla de simulación de Aspen plus aparecen en la Figura 13.

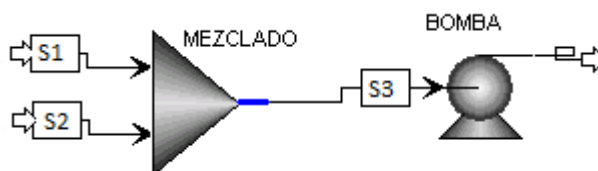


Figura 13: Equipos de Tratamiento efluentes: Mezclador y bomba

2.6.2 Reactor cinético

El diseño del reactor se realiza con el objetivo de obtener el mayor rendimiento y selectividad estableciendo las condiciones idóneas que favorezcan la conversión de propileno con cumeno y minimicen la cantidad de DIPB generada. La reacción tendrá lugar en un reactor tubular (RPLUG) adiabático en presencia del catalizador. Este tipo de reactor se caracteriza porque el flujo de fluido a través del reactor es ordenado y no existe mezcla en la dirección de flujo (dirección axial) se mezcla en dirección radial. Como consecuencia, todos los elementos de fluido tienen el mismo tiempo de residencia dentro del reactor y la composición del fluido varía a lo largo del reactor [15].

El estudio de este tipo de reactor se realiza en estado estacionario, o sea que el término de acumulación desaparece del balance. Los reactivos se introduce en el reactor en estado líquido y en el interior ocurre la reacción principal de alquilación y secundaria de síntesis de DIPB cuyos datos cinéticos mostrados anteriormente han de ser introducidos en las características del reactor. Estas reacciones son exotérmicas y desprenden calor aumentando la temperatura del producto a la salida puesto que el reactor es adiabático, es decir no tiene pérdidas de calor, ni dispone de ningún tipo de refrigeración. Por tanto la temperatura a la salida del reactor del producto es importante ya que si alcanza valores muy elevados puede perjudicar el catalizador.

Las dimensiones elegidas inicialmente para el reactor son las aconsejadas por Dimian y Bildea, 7 m de longitud y 1,3 m de diámetro, aunque más adelante se procederá al análisis de sensibilidad y optimizar sus dimensiones. En la Figura 14 aparece el grafico que representa el reactor tubular RPLUG en el programa Aspen plus.

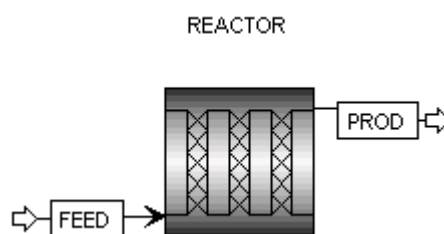


Figura 14: Reactor Tubular RPLUG

2.6.3 Columnas de destilación

Para el diseño de las columnas de destilación se emplea el modelo DSTWU, que utiliza el método simplificado de Winn-Underwood-Gilliland. DSTWU calcula la relación de reflujo mínimo y el número mínimo de platos teóricos de la recuperación especificada. También calcula la relación de reflujo real para un número especificado de etapas o el número real de las etapas para una relación de reflujo especificada, según sea el caso. Además determina la ubicación óptima de la alimentación y el calor de la caldera y el condensador.

Este módulo DSTWU es muy útil para realizar el diseño mediante un método simplificado de forma previa a cálculos más rigurosos, ya que estos cálculos previos nos permiten conocer resultados razonables para el cálculo riguroso de nuestras columnas de destilación. Por tanto de manera posterior a los resultados obtenidos empleamos el modelo RadFrac, el cuál realiza cálculos más rigurosos y no hace suposiciones.

Por consiguiente todas las columnas de destilación empleadas en el proceso de obtención de cumeno son diseñadas primeramente mediante el

método simplificado del módulo DSTWU, para posteriormente utilizar los resultados obtenidos en el módulo Radfrac que realiza cálculos rigurosos.

2.6.4 Columna de destilación del propano

El propileno se introduce al proceso con una impureza del 5% de propano en la corriente molar. Por lo tanto, teniendo un flujo de entrada de 1000 kmol/h de propileno, esta columna de destilación deberá separar unos 50 kmol/h de propano. Para elegir la unidad adecuada de separación debemos de tener en cuenta los puntos de ebullición de los productos que aparecen a la salida del reactor. Observando la tabla 1, de los puntos de ebullición, podemos destacar la gran diferencia existente entre los puntos de ebullición del propano y benceno. Esto hace pensar que la separación pudiera realizarse con un flash, en vez de una columna de destilación pero al realizar una simulación se observa que la cantidad de benceno que sale por la cabeza es mayor que empleando una columna de destilación, por lo que se emplea la columna de destilación para evitar las pérdidas de benceno.

La corriente de salida del reactor es previamente enfriada hasta alcanzar la temperatura de 90 °C. En primer lugar se diseña la columna empleando el módulo DSTWU y es necesario especificar la presión del condensador 7 bares y presión en el hervidor 7,2 bares. El propano será como ya comentamos anteriormente el compuesto clave ligero que saldrá por la cabeza de la columna y será utilizado como combustible para la propia planta. Benceno es el compuesto clave pesado el cual se debe obtener una recuperación prácticamente nula por la cabeza. Además es necesario introducir el número de etapas que tendrá dicha columna destilación que en esta caso se emplearon 15 etapas. El gráfico que identifica la columna de destilación del módulo DSTWU aparece en la Figura 15.

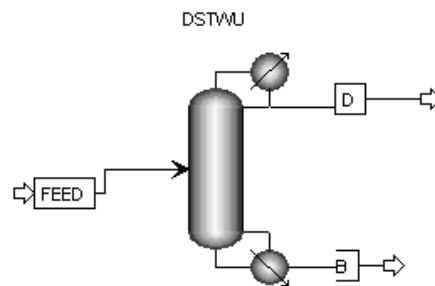


Figura 15: Columna de Destilación módulo DSTWU

Con los resultados obtenidos del modelo DSTWU, Figura 16, se representa el diseño posterior con el bloque *Radfrac* con 15 etapas, relación de reflujo de 1,496 y una presión de 7,2 bares para el hervidor y 7 bares para el condensador.

Una vez diseñado el producto obtenido por el fondo de la columna de destilación será enviado a la segunda columna de destilación para obtener el benceno que será recirculado hasta la entrada del reactor.

Minimum reflux ratio:	1,22234	
Actual reflux ratio:	1,49613	
Minimum number of stages:	7,20627	
Number of actual stages:	15	
Feed stage:	9,70413	
Number of actual stages above feed	8,70413	
Reboiler heating required:	5948,18	kW
Condenser cooling required:	577,086	kW
Distillate temperature:	13,4357	C
Bottom temperature:	171,63	C
Distillate to feed fraction:	0,00995495	

Figura 16: Resultados columna de destilación de propano con el módulo DSTWU

2.6.5 Columna de destilación de benceno

En esta columna tiene lugar la separación del benceno entre la mezcla del efluente líquido formado por los productos de la reacción, cumeno y DIPB, con el objetivo de aprovechar el benceno mediante una corriente de recirculación.

Del mismo modo se utiliza inicialmente el módulo DSTWU para su posterior diseño con el modulo más estricto Radfrac. La corriente de salida de la columna de separación de propano pasa por un intercambiador de calor para reducir su temperatura hasta 90°C. Una vez alcanzadas las condiciones ideales para entrar en la columna de destilación. En el diseño del módulo DSTWU debemos de tener en cuenta que el compuesto clave ligero es el benceno y el compuesto clave pesado cumeno. El número de etapas empleado son 15 etapas. La presión en el hervidor y condensador son 2 y 2,2 bares respectivamente. Así, la corriente saliente por la cabeza de la columna contendrá únicamente benceno que es recirculado al comienzo del proceso de obtención del cumeno para ser aprovechado, mientras que por la corriente de fondo se obtiene cumeno y DIPB, los cuales serán separados en la siguiente columna de destilación.

La figura 17 muestra los resultados obtenidos del módulo DSTWU, los cuales son necesarios para realizar posteriormente la simulación utilizando el *módulo Radfrac*, con 15 etapas de alimentación, alimentándose en la etapa 7, relación de reflujo de 0,86 y una presión de 2,2 bares para el hervidor y 2 bares para el condensador.

Minimum reflux ratio:	0,270809	
Actual reflux ratio:	0,863262	
Minimum number of stages:	9,66206	
Number of actual stages:	15	
Feed stage:	6,66748	
Number of actual stages above feed	5,66748	
Reboiler heating required:	70310,3	kW
Condenser cooling required:	61555,5	kW
Distillate temperature:	104,285	C
Bottom temperature:	185,384	C
Distillate to feed fraction:	0,799907	

Figura 17: Resultados columna de destilación de benceno con el módulo DSTWU

2.6.6 Columna de destilación del cumeno

En esta columna de separación de cumeno y DIPB se realiza con destilación a vacío, técnica en la que la operación se lleva a cabo a una presión menor a la atmosférica. El objetivo de estas presiones es para realizar la destilación a una temperatura menor a su punto de ebullición.

El efluente que proviene del producto de fondo de la columna de destilación de benceno es la corriente de entrada en esta columna. El objetivo es obtener el cumeno con la máxima pureza. Por ello utilizando el módulo DSTWU primeramente, el compuesto clave ligero necesario es el cumeno y clave pesado es el subproducto DIPB con una presión en el hervidor de 0,4 bares y una presión en el condensador de 0,2 bares. El número de etapas es 28 etapas, Figura 18.

Minimum reflux ratio:	0,24141	
Actual reflux ratio:	0,281103	
Minimum number of stages:	6,84105	
Number of actual stages:	28	
Feed stage:	13,0739	
Number of actual stages above feed	12,0739	
Reboiler heating required:	8062,33	kW
Condenser cooling required:	14196,3	kW
Distillate temperature:	98,42	C
Bottom temperature:	154,912	C
Distillate to feed fraction:	0,99482	

Figura 18: Resultados columna de destilación de benceno con el módulo DSTWU

Del mismo modo que las columnas de destilación anteriores de propano y benceno. Se obtienen los resultados del módulo DSTWU disponibles en la Figura 18. Que posteriormente se simula en el bloque *Radfrac* con 28 etapas de alimentación, la etapa de alimentación está en la numero 13, relación de reflujo de 0,28 y una presión de 0,4 bares para el hervidor y 0,2 bares para el condensador.

2.6.7 Esquema general del proceso

Por tanto el esquema general obtenido en la simulación para todo el proceso de obtención de cumeno mediante el programa Aspen Plus se presenta en la Figura 19.

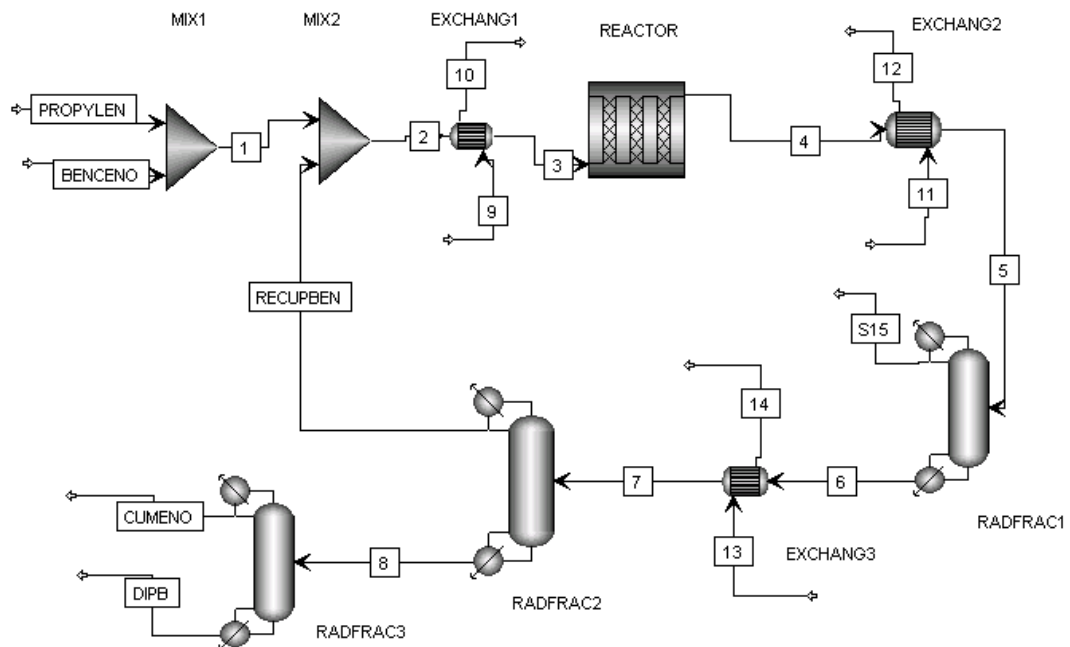


Figura 19: Diseño del proceso de obtención de cumeno

Una vez realizada la simulación del proceso de obtención de cumeno mediante Aspen Plus se puede cambiar libremente cualquier especificación del diagrama de flujo, como las condiciones de operación, composición de la alimentación, etc., y posteriormente volver a ejecutar la simulación para comparar los nuevos resultados con los resultados previos obtenidos. Y así decidir si aceptas o rechazas el nuevo proceso alternativo. En el siguiente apartado se realizará el análisis de sensibilidad para optimizar el proceso.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Una vez obtenida la simulación del proceso de alquilación de cumeno se realizan estudios de sensibilidad en el reactor, principal etapa del proceso, y las columnas de separación del propano, benceno y cumeno. Este estudio permitirá identificar las variables críticas y optimizar rendimientos. La optimización se realiza secuencialmente a las unidades empleadas en el proceso con el orden en que aparecen en el diagrama de flujo.

3.1. Análisis de sensibilidad en el reactor

La primera unidad a optimizar es el Reactor en el que tendremos en cuenta tres variables clave para su diseño:

- Relación molar benceno/propileno
- Temperatura de entrada al reactor
- Tamaño del reactor

3.1.1. Relación molar benceno/propileno

Es conveniente realizar la reacción con exceso de benceno ya que evita la formación de DIPB manteniendo la concentración de cumeno baja. Por ello realizamos un análisis de la selectividad en función de la relación molar entre benceno y propileno.

Por selectividad entendemos la relación existente entre la cantidad de reactivo que pasa al producto deseado y la cantidad total de reactivo que reacciona. La ecuación mediante la cual se obtiene la Selectividad de cumeno es la siguiente [3]:

$$S_{\text{Cumeno}} = \frac{F_{\text{cumeno}}}{(F_{\text{cumeno}} + F_{\text{DIPB}})} \times 100 \%$$

Para ello se realiza un análisis de sensibilidad utilizando Aspen. Las condiciones iniciales establecidas de temperatura y presión a la entrada del reactor son de 170 °C y 35 bares de presión y el reactor se encuentra cargado de un 0,66 tanto por uno de cama vacío y una densidad de 1000 kg/m³.

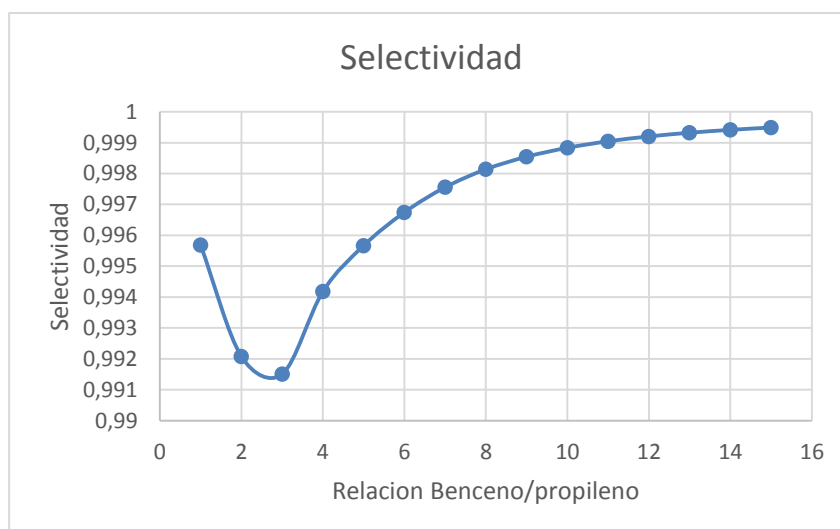


Figura 20: Selectividad en función de la relación benceno/propileno.

En la Figura 20 se observa que conforme la cantidad de benceno respecto del propileno va elevándose la selectividad mejora. Esto ocurre a partir del punto de relación benceno/propileno de valor 3 que es el más desfavorable, desde este punto aumenta hasta aproximarse al valor de la unidad. Además, observamos que la variación de la selectividad de cumeno desde la relación de benceno/propileno de valor 5 cada vez es más insignificante, esto es debido al hecho de que el calor total de las reacciones es exotérmico.

Por lo tanto, de este análisis podemos deducir que la relación de benceno/propileno idónea para el reactor es aquella que alcance una selectividad de valor la unidad pero debemos de tener en cuenta otros factores que influyen encareciendo el proceso de obtención de cumeno. Por ejemplo la cantidad de benceno necesaria a recuperar en la torre de destilación es mayor ya que una gran cantidad de benceno no ha reaccionado en el reactor así que es necesario realizar una separación de productos en una torre de destilación que recoja mayor volumen de producto y elevando así los costes de producción.

3.1.2. Temperatura de entrada al reactor

Continuando con el análisis de sensibilidad en el reactor, otro de los aspectos claves a tener en cuenta en su diseño óptimo es la temperatura elegida para la entrada del reactor en el que se llevará a cabo la reacción. Esta temperatura de entrada al reactor debe favorecer la reacción de formación de cumeno y disminuir la reacción de formación de DIPB.

Basándonos en los datos de los proceso de producción de cumeno existentes podemos deducir que para dicho proceso las condiciones adecuadas de temperatura de entrada al reactor están entre 160 °C y 180 °C [3]. Observando la Figura 20 realizaremos el estudio para una relación B/P entre 4 y 8, ya que para valores menores la cantidad de cumeno producido es

insuficiente, mientras que para valores mayores el flujo de benceno reciclado sería muy elevado sin obtener una gran diferencia en cuanto a la selectividad y rendimiento.

Por tanto se ha realizado un análisis sobre la temperatura de salida del reactor, selectividad y rendimiento en la obtención de cumeno en función de dos de las condiciones de entrada al reactor: temperatura y relación benceno/propileno. Como muestran las Figuras 21, 22 y 23.

El rendimiento se ha obtenido con la siguiente ecuación:

$$R_{toCumeno} = \frac{F_{cumeno} \left(\frac{Kmol}{h} \right)}{F_{propileno\ entrada} \left(\frac{Kmol}{h} \right)}$$

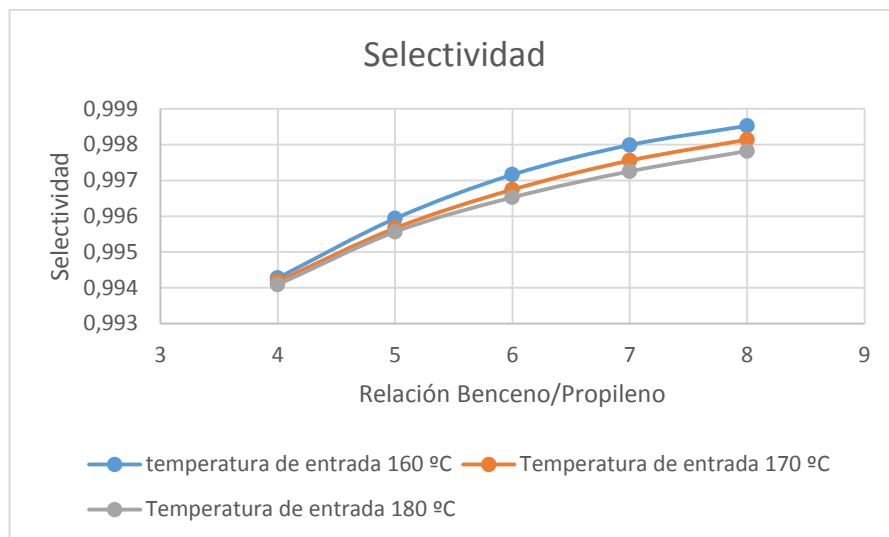


Figura 21: Selectividad en función del Ratio B/P para diferentes temperaturas de entrada al reactor

En la Figura 21 se observa que la selectividad mantiene valores muy elevados, más de 0,99 para las relaciones de benceno/propileno y temperatura de entrada distintos en el reactor. La selectividad aumenta de forma paralela al incremento del ratio benceno/propileno obteniendo siempre mejores resultados para temperaturas de entrada más bajas, aunque las variaciones no son muy amplias.

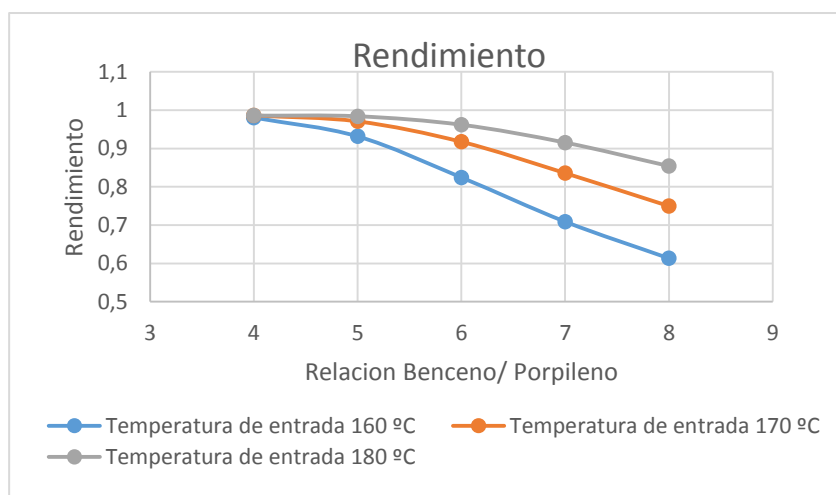


Figura 22: Rendimiento en función del Ratio B/P para diferentes temperaturas de entrada al reactor

Por otro lado, observando la gráfica del rendimiento de la Figura 22, vemos que disminuye a medida que aumenta la relación benceno/propileno y empeora conforme vamos disminuyendo la temperatura de entrada del reactor.

Por ultimo, analizamos la temperatura máxima de salida del reactor, ya que está no debería ser elevada para no afectar a la vida útil del catalizador y mantener la mezcla en estado líquido. En la gráfica de la Figura 23 se observa el aumento de temperatura a medida que disminuye la relación benceno/propileno. La temperatura de salida del reactor además sube para temperaturas de entrada al reactor más elevadas.

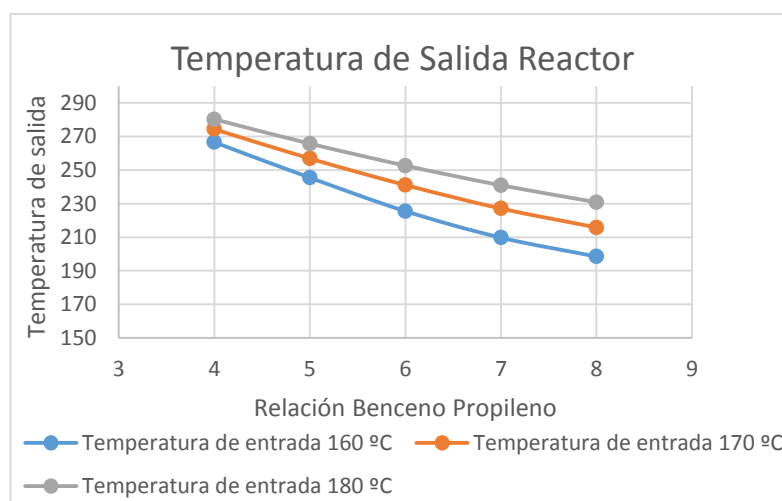


Figura 23: Temperatura de salida Reactor en función del Ratio B/P para diferentes temperaturas de entrada al reactor

Existen posibles alternativas para reducir estas elevadas temperaturas a la salida del reactor, tales como una serie de reactores con refrigeración intermedia, alimentación fría parcial de los reactivos, o intercambiadores de

calor internos, pero no presenta una ventaja sustancial sobre un reactor adiabático de lecho fijo.

Centrándonos en los resultados obtenidos puede observarse que a medida que aumenta la relación benceno/propileno, disminuye la temperatura de salida, aumenta la selectividad y disminuye el rendimiento. Además de tener en cuenta que la temperatura de salida no debe ser muy elevada para no perjudicar la vida del catalizador y mantener la mezcla en fase líquida, la temperatura elegida sería de 170 °C y relación B/P sería de 5.

3.1.3. Tamaño del reactor

Un análisis de sensibilidad de las dimensiones del reactor de flujo de pistón nos permite conocer el tamaño óptimo que favorece la formación de cumeno, disminuyendo la formación de DIPB. Las condiciones iniciales del análisis establecidas son las indicadas en los apartados anteriores: temperatura de entrada reactor 170 °C y relación B/P => 5. Longitud del reactor 7 metros de un solo cilindro y diámetro 1,3 metros.

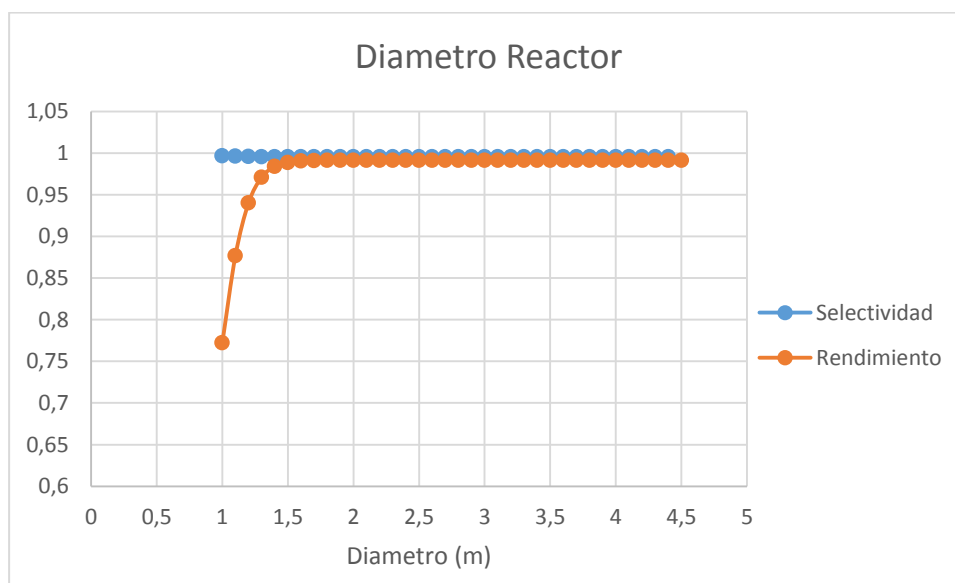


Figura 24: Selectividad y rendimiento en función diámetro reactor.

En esta gráfica de la Figura 24 observamos como la selectividad no varía a lo largo de los diferentes diámetros y sin embargo en cuanto a los valores de rendimientos a partir de un diámetro de dimensiones 1,5 metros presenta una mejora notable alcanzando un 99% de rendimiento, después de 1,5 metros las diferencias no son significativas.

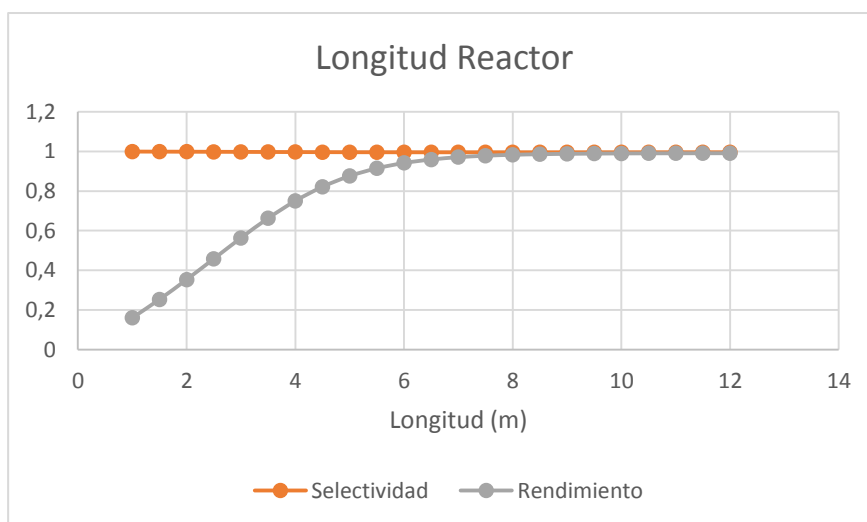


Figura 25: Selectividad y Rendimiento en función de la Longitud del reactor

Según se observa en la Figura 25, con la selectividad ocurre de igual forma que en la Figura 24, es decir no existe prácticamente variaciones de selectividad a lo largo de la longitud del reactor pero de igual modo el rendimiento mejora considerablemente alcanzando una longitud de 8 metros.

Por ultimo, hemos realizado un análisis de sensibilidad del número de tubos necesarios en el reactor, Figura 26, con las dimensiones optimizadas anteriormente Longitud de 8 metros y diámetro de 1,5 metros. El resultado es idéntico para un intervalo de tubos entre 1 y 6 véase en la gráfica de la figura 26.

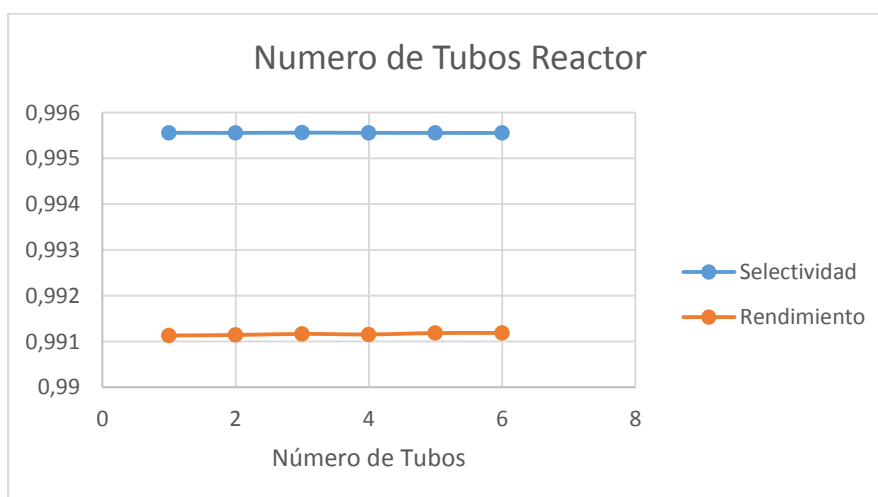


Figura 26: Selectividad y Rendimiento en función del número de tubos del reactor

Por tanto con los análisis de sensibilidad realizados podemos concluir que las dimensiones óptimas para el funcionamiento del reactor son las siguientes:

- ✓ Número de Tubos 1
- ✓ Longitud reactor 8 metros

- ✓ Diámetro reactor 1,5 metros
- ✓ Temperatura de entrada reactor 170 °C
- ✓ Temperatura de salida reactor 256,86 °C

Con estos datos podemos obtener la representación gráfica de los perfiles de concentraciones obtenidos dentro del reactor. En la gráfica de la Figura 27 se observa el aumento progresivo de la formación de cumeno, acompañado de un decrecimiento de propileno y benceno. El benceno se mantiene en exceso para evitar la formación de DIPB.

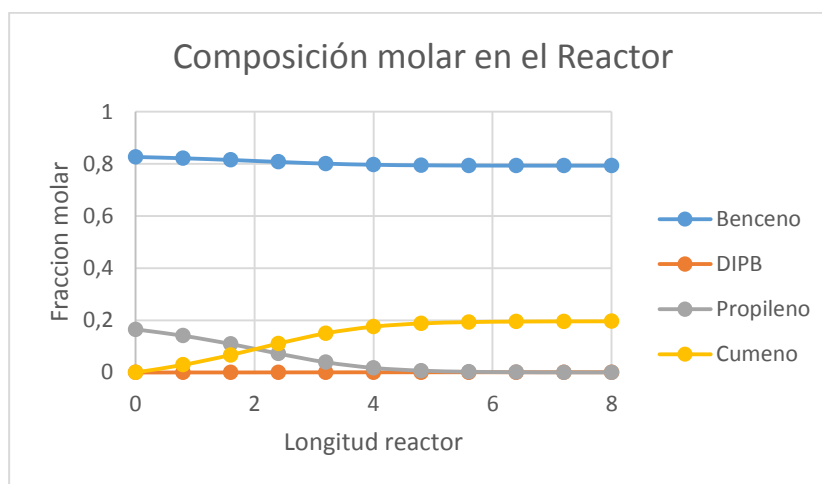


Figura 27: Perfil de concentraciones en el Reactor.

3.2. Análisis de sensibilidad en las Columnas de Destilación

Optimizado el diseño del reactor, el producto obtenido a la salida pasa a la zona de destilación o separación de componentes. En esta zona aparecen diferentes columnas de destilación con el objetivo de obtener la separación de los cuatro compuestos que forma la corriente de salida del reactor. Esta zona consume cantidades de energía importantes que encarecen el coste de producción de cumeno.

Por ello, es importante realizar el análisis de sensibilidad en las columnas de destilación permitiendo identificar las variables críticas y optimizar el rendimiento de cada uno de los equipos disminuyendo así el consumo de energía. Las variables que serán analizadas en las columnas de destilación de propano, benceno y cumeno aparecen a continuación [7,15]:

- Relación de Reflujo.
- Número de etapas en la columna.
- Ubicación de la bandeja de alimentación

3.3. Análisis de sensibilidad de la columna de destilación de propano

3.3.1. Relación de reflujo

El estudio se realiza con el número de etapas fijo (incluida la etapa del condensador y la caldera) de valor 15 obtenido en el modelado y simulación anterior. En este análisis se ha ido variado la posición de la bandeja de alimentación entre las etapas 3 y 13. Para cada posición de la bandeja de alimentación diferente, se considera una serie de relación de reflujo desde 0,5 hasta alcanzar un valor de 8, obteniendo la fracción molar de propano en el producto obtenido de la columna en la parte superior. Los resultados se muestran en la Figura 28.

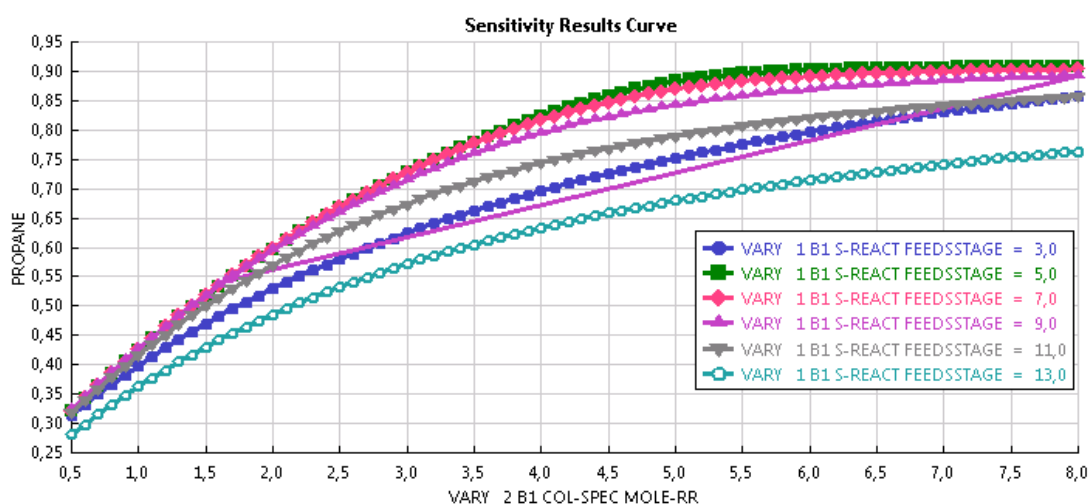


Figura 28: Representación de la fracción molar de propano obtenida en la parte superior de la columna frente a la relación de reflujo.

Como se observa en la Figura 28 la fracción molar de propano obtenida en la parte superior de la columna mejora al aumentar la relación de reflujo. En ella se identifica un valor óptimo de relación de reflujo de aproximadamente 7,5 para valores inferiores a la etapa 9 incluida como bandeja de alimentación. Puesto que si aumentamos la etapa de alimentación por encima de la etapa 9 se reduce la fracción molar obtenida de propano.

3.3.2. Ubicación de la bandeja de alimentación

Modificando la relación de reflujo al valor 7,5; es escogido como valor idóneo para analizar las diferentes ubicaciones de la bandeja de alimentación en la columna de destilación, manteniendo el número de etapas fijo en 15 en el diseño de la columna. La ubicación de la bandeja de alimentación es variada para obtener el efecto sobre la carga de calor en el hervidor y la fracción molar de propano obtenida en la parte superior de la columna. Los resultados obtenidos del estudio aparecen en las Figuras 29 y 30.

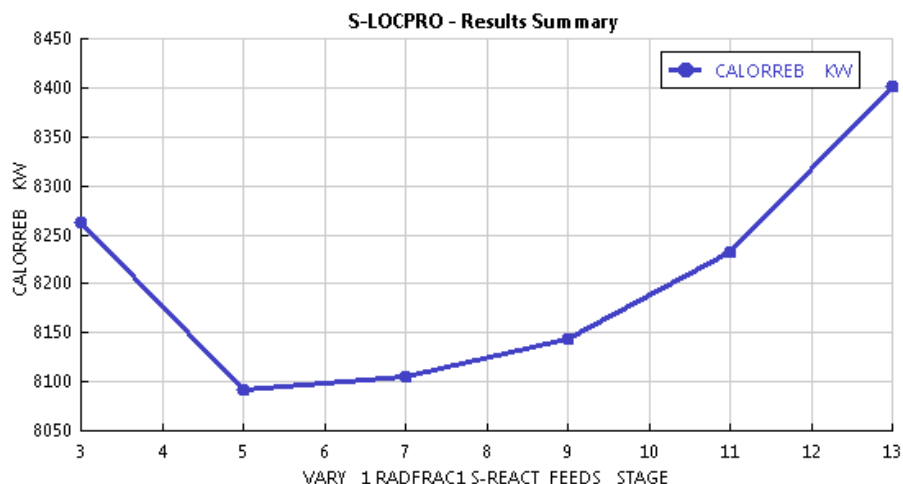


Figura 29: Energía necesaria en el hervidor de la columna de destilación de propano frente a la posición de la etapa de alimentación.

De las Figuras 29 y 30 se puede deducir que después de alcanzar un cierto valor óptimo de la ubicación de la bandeja de alimentación la carga térmica del hervidor y la fracción molar de propano empeora. Por lo tanto, el valor óptimo de la ubicación de la bandeja de alimentación ocurre en la etapa número 5 la cual alcanza una carga térmica en el hervidor de 8091 kW y una fracción molar de propano de 0,907.

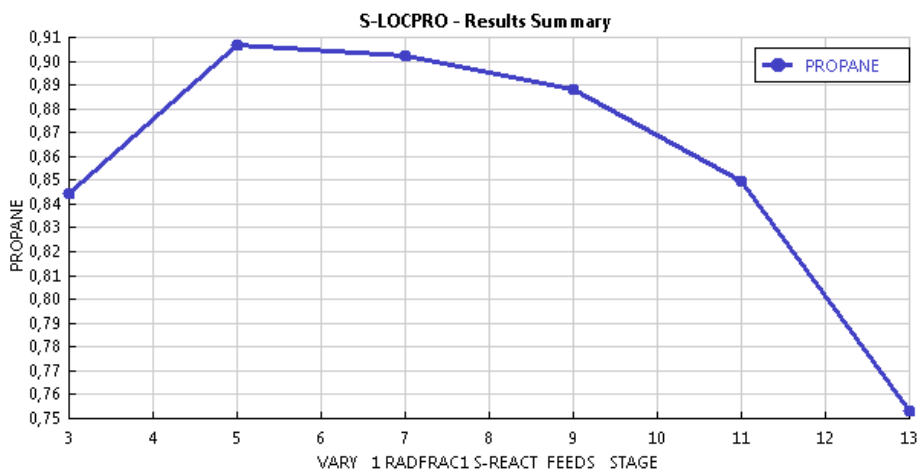


Figura 30: Fracción molar de propano obtenido en la parte superior de la columna frente a la posición de la etapa de alimentación.

3.3.3. Número de etapas en la columna

En este último estudio se mantiene constante la relación de reflujo y la ubicación de la bandeja de alimentación, únicamente varía el número de etapas en la columna de destilación de propano. En las Figuras 31 y 32 se muestran los resultados obtenidos del análisis. El aumento progresivo de número de etapas mejora la fracción molar de propano obtenido y disminuye el calor necesario en el hervidor de la columna de destilación. Por lo tanto el número óptimo de etapas es de 20 etapas, puesto que en las sucesivas etapas la variación de mejora es mínima.

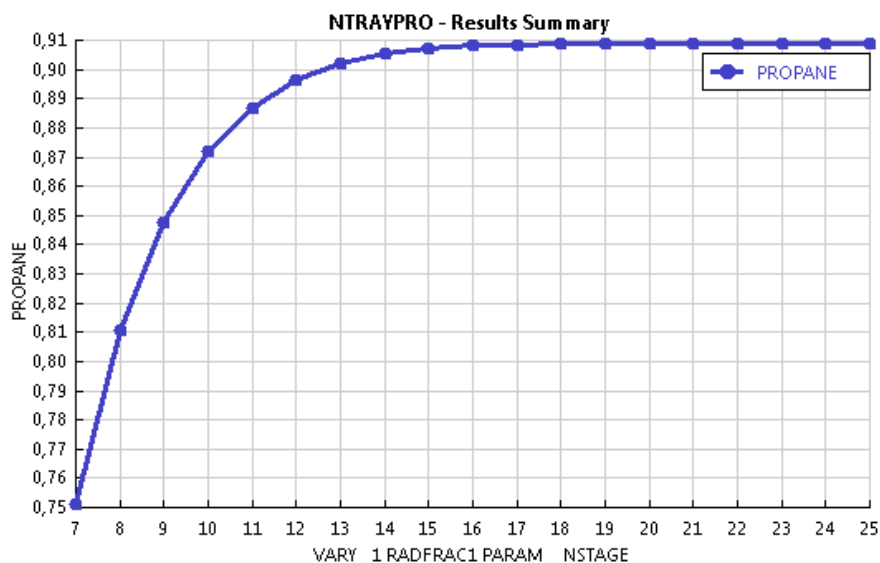


Figura 31. Fracción molar de propano obtenido en la parte superior de la columna frente al número de etapas.

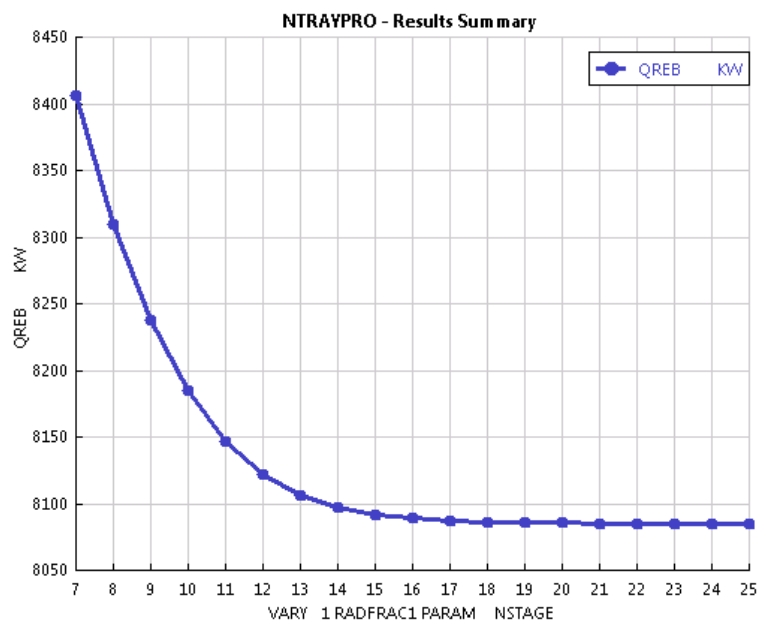


Figura 32: Energía necesaria en el hervidor de la columna de destilación de propano frente al número de etapas.

3.3.4 Resultado final optimizado

Los valores finales optimizados obtenidos mediante el análisis de sensibilidad en la columna de destilación de propano se muestran en la Tabla 11.

Columna de destilación de propano	
Número de etapas	20
Ubicación etapa de alimentación	5
Relación de reflujo	7,5
Temperatura de entrada	150 °C
Presión de entrada	34 bares
Presión hervidor	7,2 bares
Presión condensador	7 bares

Tabla 11: Valores óptimos de la columna de destilación de propano.

3.4. Análisis de sensibilidad columna de destilación de benceno

3.4.1. Relación de reflujo

Para este análisis el número de etapas es fijo (incluida la etapa del condensador y la caldera) de valor 15 obtenido en el modelado y simulación mediante el módulo DSTWU. En el análisis se ha ido variado la posición de la bandeja de alimentación para las etapas 7, 9 y 11. Para cada posición de la bandeja de alimentación diferente, se considera una serie de relación de reflujo desde 0,1 hasta 3, obteniendo la fracción molar de benceno en el producto obtenido de la columna en la parte superior. Los resultados se muestran en la Figura 33.

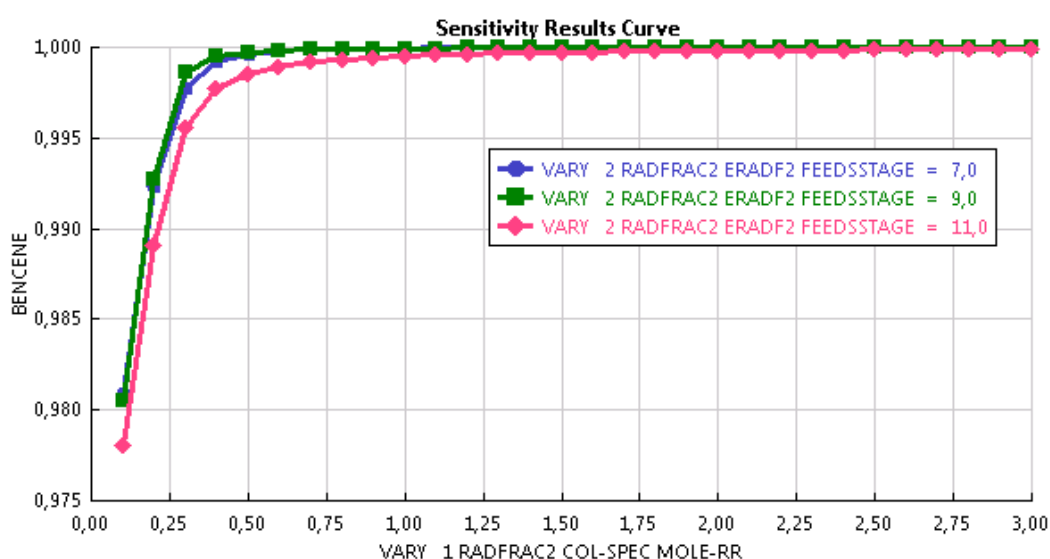


Figura 33: Fracción molar de benceno en la parte superior de la columna frente a la relación de reflujo.

En la gráfica de la Figura 33 se observa que la fracción molar de benceno obtenida en la parte superior de la columna alcanza valores muy próximos a la unidad en una relación de reflujo de 0,75 para la ubicación de la etapa de alimentación en las etapas número 7 y 9 de la columna de destilación. Por tanto el valor óptimo de relación de reflujo de aproximadamente 0,75. Puesto que si ubicamos la etapa de alimentación en una zona superior a la etapa número 9 necesitamos una mayor relación de reflujo para obtener una fracción molar de benceno similar a la ubicación de las etapas de alimentación 7 y 9 con relación de reflujo 0,75.

3.4.2. Ubicación de la bandeja de alimentación

Para una relación de reflujo igual a 0,75 y manteniendo el número de etapas fijo en 15 en el diseño de la columna. La ubicación de la bandeja de alimentación es variada para obtener el efecto sobre la carga de calor en el hervidor y la fracción molar de benceno obtenida en la parte superior de la columna.

Los resultados obtenidos del estudio aparecen en las Figuras 34 y 35. De las cuales se puede deducir que la ubicación de la bandeja de alimentación en las etapas número 7, 8 y 9 de la columna de destilación obtiene una fracción molar de benceno máximo. Además de obtener los valores carga térmica mínimos con respecto a otras posiciones de la bandeja de alimentación en la columna de destilación. Por lo tanto el valor óptimo de la ubicación de la bandeja de alimentación ocurre en la etapa número 9 la cual alcanza una carga térmica en el hervidor de 65328 kW y una fracción molar de benceno de 0,99987.



Figura 34: Fracción molar de benceno obtenida en la parte superior de la columna frente a la ubicación de la bandeja de alimentación.

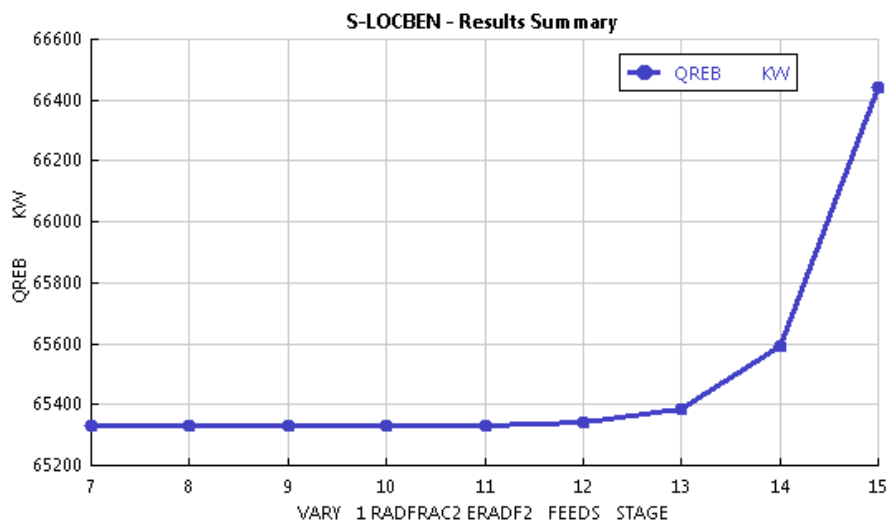


Figura 35: Energía necesaria en el hervidor de la columna de destilación de benceno frente a la ubicación de la bandeja de alimentación..

3.4.3. Numero de bandejas de alimentación

En el análisis se mantienen constantes la relación de reflujo 0,75 y la ubicación de la bandeja de alimentación 9. Únicamente varía el número de etapas en la columna de destilación de benceno. En la Figuras 36 y 37 muestran los resultados obtenidos que muestra un aumento progresivo de número de la fracción molar de benceno obtenido conforme aumenta el número de etapas en la columna de destilación, y disminuye el calor necesario en el hervidor de la columna de destilación. Por lo tanto, analizando los datos obtenidos el número óptimo de etapas es de 20, con un consumo de calor en el hervidor de 65314 kW y fracción molar muy próxima a la unidad, puesto que en las sucesivas etapas la variación de mejora es mínima.

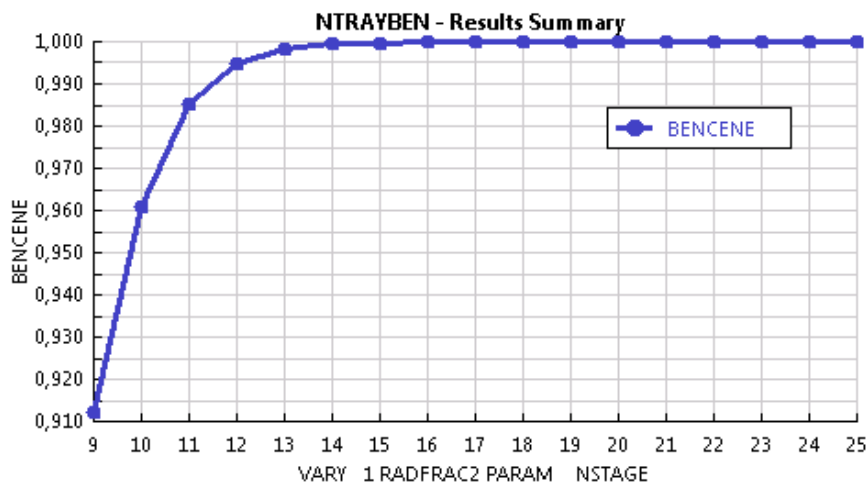


Figura 36: Fracción molar de benceno obtenido en la parte superior de la columna frente al número de etapas de la columna.

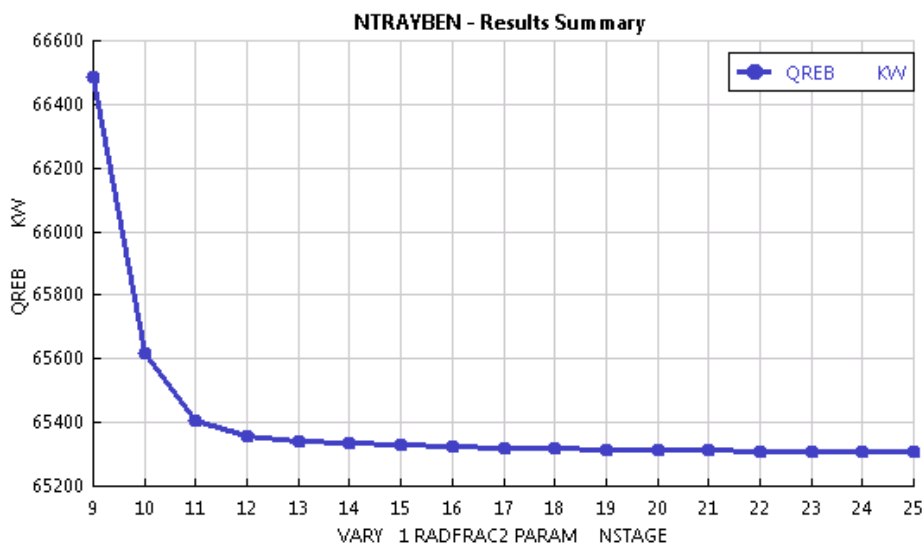


Figura 37: Energía necesaria en el hervidor de la columna frente al número de etapas.

3.3.4 Resultado final optimizado

Los valores finales optimizados obtenidos mediante el análisis de sensibilidad en la columna de destilación de benceno se muestran en la Tabla 12.

Columna de destilación de benceno	
Número de etapas	20
Ubicación etapa de alimentación	9
Relación de reflujo	0,75
Temperatura de entrada	90 °C
Presión de entrada	7,2 bares
Presión hervidor	2,2 bares
Presión condensador	2 bares

Tabla 12: Valores óptimos para la columna de destilación de benceno.

3.5. Análisis de sensibilidad columna de destilación de cumeno

3.5.1. Relación de reflujo

El número de etapas se fija (incluida la etapa del condensador y la caldera) para 28 etapas. En el análisis se ha ido variado la posición de la bandeja de alimentación para las etapas 13, 15 y 17. Para cada posición de la bandeja de alimentación diferente se considera una serie de relación de reflujo desde 0,2 hasta 1,2 obteniendo la fracción molar de cumeno en el producto obtenido de la columna en la parte superior.

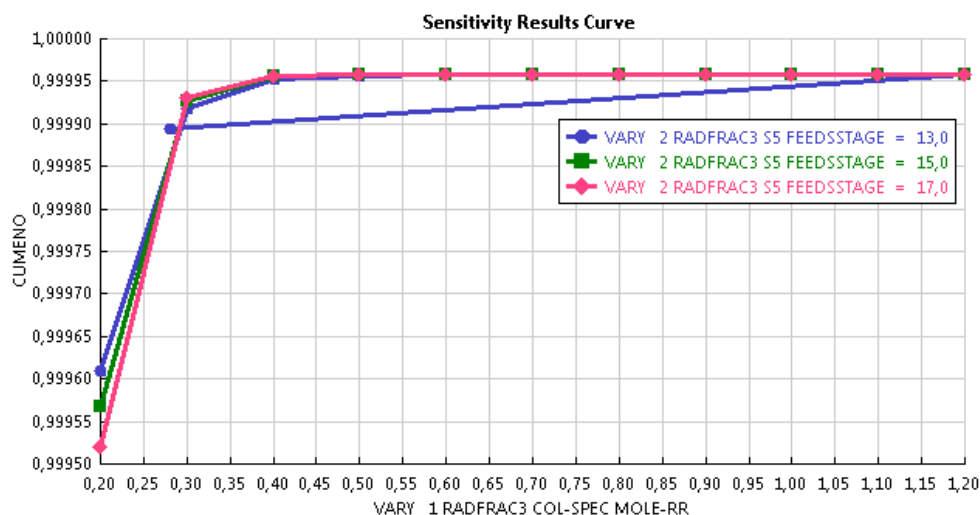


Figura 38: Fracción molar de cumeno obtenido en la parte superior de la columna frente a la relación de reflujo.

En la gráfica de la Figura 38 se observa que la fracción molar de cumeno obtenida en la parte superior de la columna tiene el mismo resultado en la ubicación de las etapas de alimentación considerando las etapas 13, 15 y 17 para una relación de reflujo de 0,5. Por tanto el valor óptimo de la relación de reflujo es 0,5 obteniendo una fracción molar de cumeno de 0,99957.

3.5.2. Ubicación de la bandeja de alimentación

Con una relación de reflujo igual a 0,5 y manteniendo el número de etapas fijo en 28, se modifica la ubicación de la bandeja de alimentación para obtener el efecto sobre la carga de calor en el hervidor y la fracción molar de cumeno obtenida en la parte superior de la columna. Los resultados obtenidos del estudio aparecen en la Figuras 39 y 40.

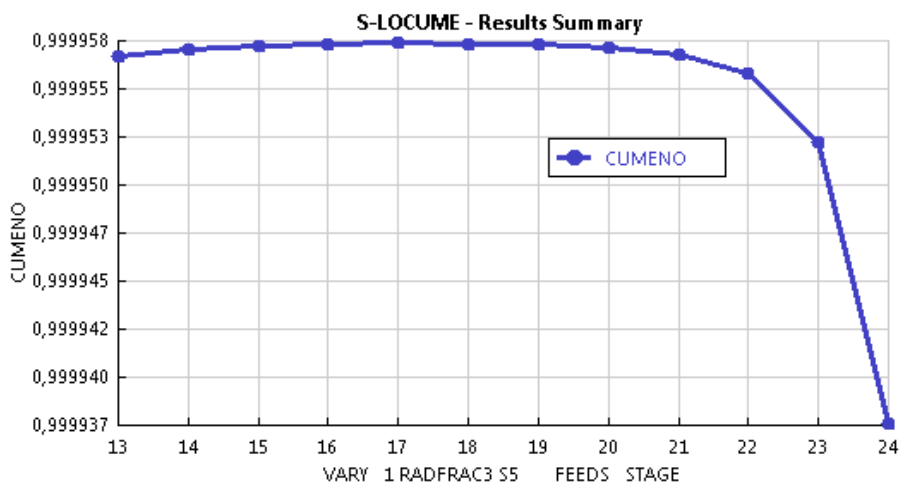


Figura 39: Fracción molar de cumeno obtenido en la parte superior de la columna frente a la ubicación de la bandeja de alimentación.

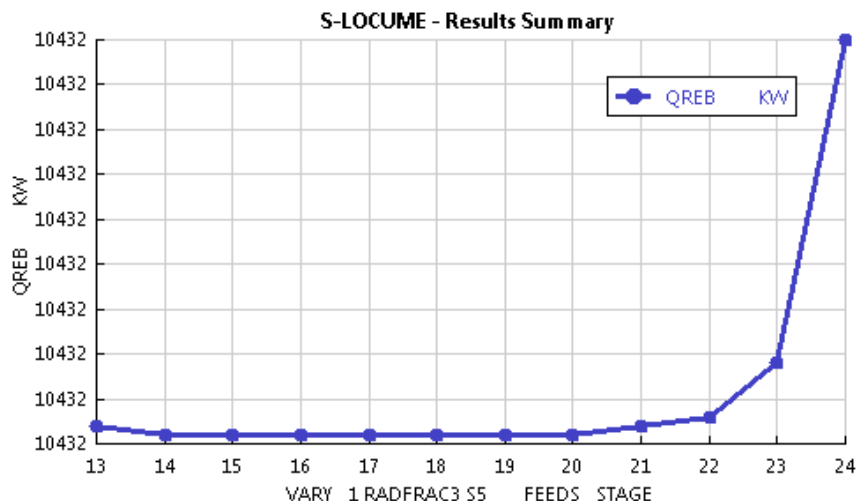


Figura 40: Energía necesaria en el hervidor de la columna de destilación de benceno frente a la ubicación de la bandeja de alimentación.

De los resultados se deducir que la ubicación óptima de la bandeja de alimentación tiene el mismo valor de fracción molar de cumeno y carga térmica en el hervidor entre las etapas 14 y 20. Por lo tanto, el valor óptimo de la ubicación de la bandeja de alimentación escogido es el correspondiente a la etapa 15, la cual alcanza una carga térmica en el hervidor de 10432 kW y una fracción molar de cumeno de 0,99958.

3.5.3. Numero de bandejas de alimentación

En este análisis se mantienen constantes la relación de reflujo 0,5 y la ubicación de la bandeja de alimentación 15. Únicamente varía el número de etapas en la columna de destilación de cumeno.

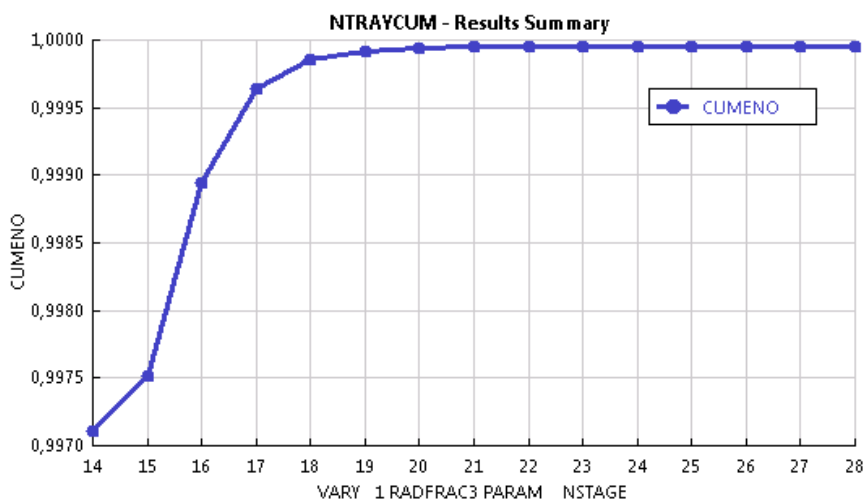


Figura 41: Fracción molar de cumeno obtenido en la parte superior de la columna frente al número de etapas.

En las Figuras 41 y 42 se observa un aumento progresivo de la fracción molar de cumeno obtenido conforme aumenta el número de etapas en la columna de destilación mientras disminuye el calor necesario en el hervidor de la columna de destilación. Por lo tanto analizando los datos obtenidos el número óptimo de etapas es de 20, con un consumo de calor en el hervidor de 10464 kW y fracción molar muy próxima a la unidad, puesto que en las sucesivas etapas solo se reduce una cantidad insignificante de calor consumido en el hervidor de la columna de destilación.

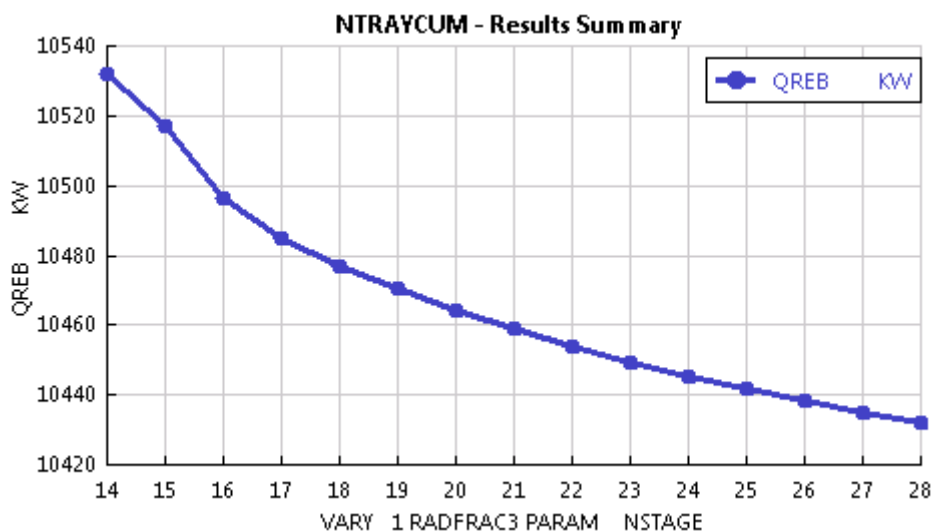


Figura 42: Energía necesaria en el hervidor de la columna de destilación de cumeno frente al número de etapas.

3.5.4 Resultado final optimizado

Los valores finales optimizados obtenidos mediante el análisis de sensibilidad en la columna de destilación de cumeno se muestran en la Tabla 13.

Columna de destilación de cumeno	
Número de etapas	20
Ubicación etapa de alimentación	15
Relación de reflujo	0,5
Temperatura de entrada	185 °C
Presión de entrada	2,2 bares
Presión hervidor	0,4 bares
Presión condensador	0,2 bares

Tabla 13: Valores óptimos para la columna de destilación de cumeno.

3.6 Descripción detallada del diagrama de flujo final resultante

En la Figura 43 se muestra el diagrama de flujo del proceso de obtención de cumeno optimizado. Y en la Tabla 15 la composición y condiciones de temperatura y presión de todas las corrientes que intervienen en el proceso.

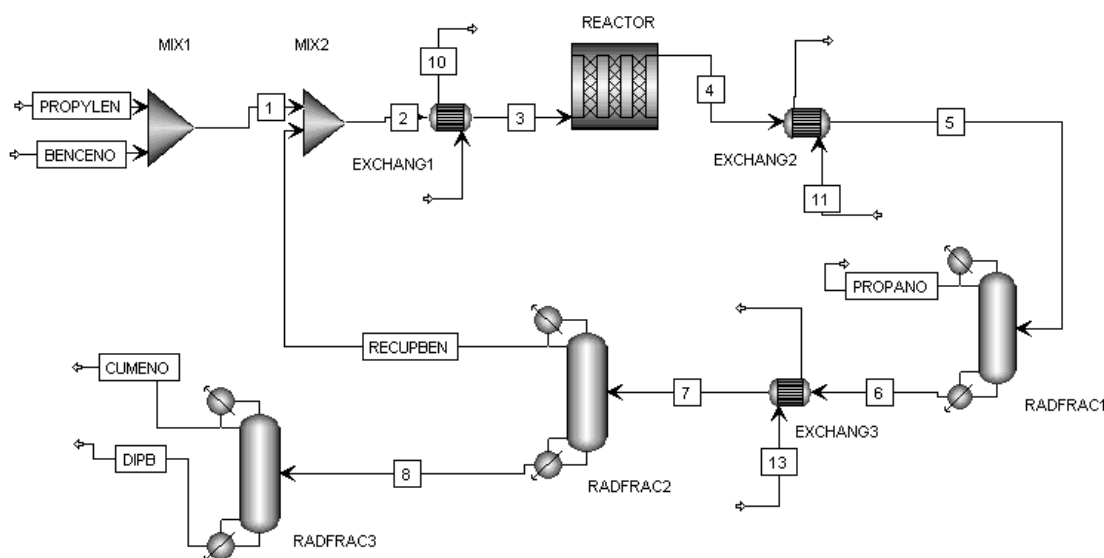


Figura 43: Diagrama de flujo final del proceso de producción de cumeno.

Corriente	BENCENO	PROPILENO	1	RECUPBEN	2	3
Temperatura (°C)	25	35	31,95412	104,2886	82,282	170
Presión (bar)	35	35	35	2	35	35
Fracción Líquido	1	1	1	1	1	1
Flujo molar kmol/h						
Benceno	1000	0	1000	4049,952	5049,952	5049,952
Propano	0	50	50	0,00743875	50,00744	50,00744
Propileno	0	1000	1000	1,90 e-05	1000	1000
Cumeno	0	0	0	0,0402258	0,0402258	0,0402258
P-DIPB	0	0	0	8,79E-10	8,79E-10	8,79E-10
Aceite Térmico	0	0	0	0	0	0
Agua	0	0	0	0	0	0
Corriente Total (kmol/h)	1000	1050	2050	4050	6100	6100

Tabla 15: Datos de las corrientes del proceso.

Corriente	4	5	6	7	8
Temperatura (°C)	257,9034	150	171,4706	90	185,3645
Presión (bar)	35	35	7,2	7,2	2,2
Fracción Líquido	1	1	1	1	1
Flujo molar kmol/h					
Benceno	4054,412	4054,412	4050,5	4050,5	0,547903
Propano	50,00744	50,00744	0,00743909	0,00743909	2,21E-20
Propileno	0,0879755	0,0879755	1,90E-05	1,90E-05	4,86E-23
Cumeno	991,2097	991,2097	991,209	991,209	991,1688
P-DIPB	4,371264	4,371264	4,371264	4,371264	4,371264
Aceite Térmico	0	0	0	0	0
Agua	0	0	0	0	0
Corriente Total (kmol/h)	5100,088	5100,088	5046,088	5046,088	996,088

Tabla 15: Datos de las corrientes del proceso (continuación)

Corriente	CUMENO	DIPB	9	10	11
Temperatura (°C)	119,3958	174,3781	350	255,4881	20
Presión (bar)	0,4	0,6	2	2	3
Fracción Líquido	1	1	1	1	1
Flujo molar kmol/h					
Benceno	0,547903	2,21E-09	0	0	0
Propano	0	0	0	0	0
Propileno	0	0	0	0	0
Cumeno	990,4502	0,7186052	0	0	0
P-DIPB	0,00191226	4,369351	0	0	0
Aceite Térmico	0	0	1500	1500	2800
Agua	0	0	0	0	0
Corriente Total (kmol/h)	991	5,087957	1500	1500	2800

Tabla 15: Datos de las corrientes del proceso (continuación)

Corriente	12	13	14
Temperatura (°C)	130,0411	20	116,6197
Presión (bar)	3	3	3
Fracción Líquido	1	1	1
Flujo molar kmol/h			
Benceno	0,547903	0	0
Propano	0	0	0
Propileno	0	0	0
Cumeno	990,4502	0	0
P-DIPB	0,00191226	0	0
Aceite Térmico	2800	2000	2000
Agua	0	0	0
Corriente Total (kmol/h)	2800	2000	2000

Tabla 15: Datos de las corrientes del proceso (continuación)

En la Tabla 16 se resumen las principales características de las tres columnas de destilación utilizadas para la separación de los distintos componentes de la corriente de salida del reactor cinético

Columna de destilación	RADFRAC 1 (Propano)	RADFRAC 2 (Benceno)	RADFRAC 3 (Cumeno)
Temperatura condensador (°C)	16,2913	104,289	119,396
Calor del condensador (kw)	-2591,58	-57679,1	-16112
Relación de reflujo	7,5	0,75	0,5
Velocidad del destilado (kmol/h)	54	4050	991
Temperatura hervidor (°C)	171,47	185,36	174,378
Calor del hervidor (kw)	7976,3	66482,5	11354,9
Velocidad del hervidor (kmol/h)	1049,08	6835,11	876,994
Velocidad del condensador (kmol/h)	5046	996,088	5,08796
Ratio del hervidor	0,207899	6,86195	172,367

Tabla 16: Datos de las columnas de destilación

3.7 Producto final obtenido

Una vez optimizados el reactor y las tres columnas de destilación, necesarias para separar los diferentes compuestos químicos presentes en la corriente de salida del reactor, se obtiene un producto final por la corriente *CUMENO* del diagrama de flujo que se muestra en la Figura 43 con la composición que aparece en la Tabla 14.

Compuesto	Corriente Producto final (kmol/h)
<i>Benceno</i>	0,547903
<i>Propano</i>	0
<i>Propileno</i>	0
<i>Cumeno</i>	990,4502
<i>P-DIPB</i>	0,00191226
Total	991

Tabla 14: Composición del producto final.

El resultado obtenido nos garantiza la especificación de pureza requerida, ya que el producto final tiene una composición del 99,9% de cumeno con una pequeña cantidad de impureza de benceno y P-DIPB.

4. Conclusiones

Se ha realizado una simulación del proceso de producción de cumeno siguiendo un procedimiento de optimización paso a paso. Cada unidad ha sido optimizada maximizando la calidad del producto deseado así como su caudal. Para ello se ha empleado el análisis de sensibilidad identificando las variables críticas.

El objetivo principal de la simulación ha sido la obtención de la máxima cantidad de cumeno posible obteniendo su mayor grado de pureza, ya que esto implica mayor beneficio. Para ello se ha aprovechado el benceno obtenido en una de las columnas de destilación para su reciclado de este reactivo al principio del proceso, permitiendo así un ahorro de materia prima.

El diseño del reactor se ha realizado orientado al aprovechamiento total de los reactivos. Teniendo en cuenta algunos factores como: la temperatura de salida del producto del reactor para no perjudicar la vida del catalizador, la relación de benceno/propileno para minimizar la cantidad de propileno no reaccionado y reacción secundaria y las dimensiones (longitud, diámetro) del reactor.

En la zona de separación, el diseño del sistema de separación comienza con el trazado de las curvas de equilibrio líquido-vapor, ya que dan una buena idea acerca de la facilidad de la destilación. Estas columnas de destilación se basan en la máxima separación de las corrientes, obteniendo así una corriente de producto de 991 kmol/h de cumeno con una pureza del 99,9%.

Mientras que en el análisis de sensibilidad reveló una gran cantidad de consideraciones de diseño para el reactor y columnas de destilación. Estas consideraciones no fueron principalmente en función del costo sino también otros factores como la seguridad, el impacto ambiental, las necesidades futuras, etc.

5. Referencias

1. IHS Markit, (31 de agosto 2016). Manual de Economía Química. *Cumeno*, Recuperado de: <https://www.ih.com/products/cumene-chemical-economics-handbook.html>
2. Dimian, A.C, & Bildea, C.S. (2008). *Chemical process design: computer-aided case studies*. John Wiley & Sons.
3. Corma, A., Martínez Soria, V., Schonoefeld, E. (2000) *Alkylation of benzene with short-chain olefins over MCM-22 zeolite*, *Journal of Catalysis*, 192, 163-17.
4. Turton. R., Bailie, R. C., Whiting, W.B., Shaelwitz, J.A. (2009) *Analysis Synthesis and Design of Chemical Processes*, 3rd Ed; Prentice Hall: Upper Sadle River, N.J.
5. Luyben, W.L. (2010). *Design and Control of the Cumene Process*, *Industrial Engineering and Chemistry Research* 49, 719-734.
6. Corma, A. (2000). *Catálisis con Zeolitas: desde el laboratorio a su aplicación industrial*. Revista ARBOR, ES. recuperado de: <http://arbor.revistas.csic.es/index.php/arbor/article/viewArticle/1252>
7. Nirlipt Mahapatra (2010). *Design and simulation of cumene Plant using Aspen Plus*. (Tesis doctoral inédita). Departamento de Ingeniería Química National Institute of Technology Rourkela.
8. Cepsa (2017), *Plantas de producción* (s. d.). recuperado del sitio web de la empresa cepsa: https://www.cepsa.com/cepsa/Que_ofrecemos/Productos_quimicos/Plantas_de_produccion/
9. Kamal I.M. Al-malah (2017). *Aspen Plus, Chemical Engineering Applications*. Department of Chemical Engineering Higher Colleges of Technology, Ruwais, United Arab Emirates. Wiley.
10. Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (2017). *Hidrocarburos Aromáticos, benceno*. Enciclopedia de salud y seguridad en el trabajo. Recuperado de: http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/TextosOnline/EnciclopediaOIT/tomo4/104_07.pdf
11. Pemex (2017), *Propileno*. Hoja de datos de seguridad. Recuperado de: <http://www.pemex.com/comercializacion/productos/HDS/refinados/HDSS-004%20Propileno%20Grado%20Quimico.pdf>
12. Pemex (2017), *Propano*. Hoja de datos de seguridad. Recuperado de: <http://www.pemex.com/comercializacion/productos/HDS/gas/PROPANO.pdf>

13. Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (2017). *Ficha de seguridad química internacional Cumeno*. Recuperado de:
<http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/101a200/nspn0170.pdf>
14. Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (2017). *Ficha de seguridad química internacional Diisopropilbenceno*. Recuperado de:
<http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/1701a1719/icsc1714.PDF>
15. Francisco Espínola Lozano (noviembre 2015). *Tutorial de ASPEN plus: Introducción y modelos simples de operaciones unitarias*. Servicio de Publicaciones, Universidad de Jaén.
16. TechNavio, (Julio 2014). *Mercado global de cumeno 2014-2018*, recuperado de: https://www.researchandmarkets.com/research/793ddx/global_cumene
17. MicorMarketMonitor, (s.d.). recuperado del sitio web:
<http://www.micromarketmonitor.com/market-report/cumene-reports-4415539497.html>