

Análisis Del Desempeño En La Producción De Etilbenceno En Una Configuración De Reactores
CSTR

William David Roman Camargo y Jeferson Gamba González

Trabajo de Grado para Optar el Título de Ingeniero Químico

Director

Giovanni Morales Medina

Dr. ingeniería química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de ingeniería Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería química

Bucaramanga

2021

Tabla De Contenido

Introducción	11
1. Estado Del Arte.....	13
2 Objetivos	22
2.1 Objetivo General.....	22
2.2 Objetivos Específicos.....	22
3. Descripción Metodológica	23
3.1 Fase I. Desarrollo De Una Simulación En El Software Aspen Plus.....	23
3.1.1 Actividad 1. Revisión De Literatura.	23
3.1.2 Actividad 2. Codificación Del Diagrama De Proceso En Aspen Plus.....	23
3.1.3 Actividad 3. Comparación De Los Modelos Termodinámicos Y Cinéticos	23
3.1.4 Actividad 4. Análisis De La Influencia Del Número De Reactores En El Proceso.....	24
3.2 Fase II. Desarrollo De Un Diseño Computacional Factorial	24
3.2.1 Actividad 5. Definición De Los Factores.	24
3.2.2 Actividad 6. Ejecución Del Diseño Computacional Factorial.	24
3.2.3 Actividad 7. Análisis De La Influencia De Los Factores.	25

ANÁLISIS EN LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO CON CSTR.	3
3.3 Fase III. Validación De Las Tendencias De La Simulación.....	25
3.3.1 Actividad 8. Comparación Y Validación De Los Resultados De Simulación.....	25
4. Análisis De Resultados	26
4.1 Determinación Del Modelo Termodinámico	26
4.1.1 Configuración De Luyben.....	26
4.1.2 Configuración De Ganji Et Al	29
4.2. Pruebas Con Las Cinéticas.....	30
4.2.1 Configuración De Luyben Con Catalizador De AlCl ₃	31
4.2.2 Configuración De Ganji Et Al. Con Catalizador De Zeolita.	32
4.3. Simulación Con Un Solo Reactor	34
4.4. Aplicación De Un Diseño Computacional Factorial	36
4.4.1 Dependencia Con La Temperatura	36
4.4.2 Dependencia Con La Presión.....	39
4.4.3 Dependencia Con Los Reflujos.	40
4.4.4 Dependencia Con El Exceso Molar De Benceno/Etileno En El Primer Reactor	41
4.4.5 Análisis De Varianza	44

ANÁLISIS EN LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO CON CSTR.	4
4.5. Comparación Con La Literatura	45
5.Conclusiones	47
6.Recomendaciones	48
Referencias Bibliográficas	49
Apéndices.....	52

Lista de Tablas

Tabla 1 Datos cinéticos de las reacciones de alquilación y transalquilación propuesto por William Luyben	14
Tabla 2 Datos cinéticos de las reacciones de alquilación y transalquilación propuesto por Ganji et al.....	15
Tabla 3 Comparación entre dos modos de operación para la reacción de alquilación	15
Tabla 4 Limites de las variables operacionales en los reactores y las columnas de destilación....	21
Tabla 5 Errores relativos de la simulación en Aspen Plus de William Luyben variando los paquetes termodinamicos.....	27
Tabla 6 Errores relativos de la simulación en Ganji et al variando los paquetes termodinámicos	30
Tabla 7 Errores relativos de William Luyben con cinética de Ganji et al	31
Tabla 8 Errores relativos de Ganji et al con cinética de William Luyben	33
Tabla 9 Pureza molar en las corrientes de reciclo.....	35
Tabla 10 Flujos molares de los reciclos y la salida del reactor y el proceso	35

Lista de Figuras

Figura 1 Esquema de la metodología desarrollada en el presente trabajo	25
Figura 2 Flujo molar de etilbenceno producto a la salida del proceso vs las temperaturas de los reactores	37
Figura 3 Regresión de los puntos de temperatura mínimos donde se alcanza la máxima conversión	38
Figura 4 Flujo molar de etilbenceno producto la salida del proceso contra las presiones de los reactores	40
Figura 5 Flujo molar de Etilbenceno a la salida del proceso contra la relación de reflujos	41
Figura 6 Flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación	42
Figura 7 Flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación y la temperatura del primer reactor (TR1)	43
Figura 8 Análisis de varianza del flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor	45

Lista de Apéndices

Apéndice A. Recopilación bibliográfica de los catalizadores empleados en la producción de etilbenceno	52
Apéndice B Recopilación bibliográfica de los diagramas de flujo de proceso (PFD).....	54
Apéndice C. Recopilación bibliográfica de las variables operacionales a la entrada y salida de los reactores	64
Apéndice D. Recopilación bibliográfica de las variables operacionales de las columnas de destilación	66
Apéndice E Codificación del paquete termodinámico y el sistema reactante en Aspen Plus	68
Apéndice F Diagramas de flujo de proceso (PFD) y tablas de corrientes en Aspen Plus	72
Apéndice G. Errores Absolutos de la comparación de paquetes termodinámicos	74
Apéndice H. Gráficas de Aspen Sensitivity variando las temperaturas de los reactores.....	81
Apéndice I. Gráficas de Aspen Sensitivity variando las presiones de los reactores.....	91
Apéndice J. Gráficas de Aspen Sensitivity variando las relaciones de reflujo de las columnas de destilación	92
Apéndice K. Gráficas de Aspen Sensitivity variando el exceso de benceno en el reactor de alquilación.....	96

Apéndice L. Análisis de varianza, graficas de pareto y ecuaciones de regresión halladas en el software Minitab V19 101

Apéndice M Especificaciones de los equipos y del Aspen Sensitivity en los artículos de William Luyben y Ganji et al..... 116

Resumen

Título: Análisis del desempeño en la producción de etilbenceno en una configuración de reactores CSTR*

Autores: William David Roman Camargo, Jeferson Gamba González**

Palabras Clave: Etilbenceno, CSTR, Aspen Plus, Análisis estadístico, Minitab.

Descripción : El etilbenceno es un intermediario del estireno que polimerizado se convierte en poliestireno, material para fabricar tapabocas industriales, desechables para el transporte de comida, entre otros objetos con uso diario en restaurantes , hospitales y laboratorios, la pandemia del Covid 19 del año 2020 ha incrementado su uso exponencialmente, por lo tanto se ve necesario el mejoramiento de la producción en reactores CSTR, más seguros, por medio del estudio de las variables operacionales de los equipos.

Se realizó una consulta bibliográfica de la producción de etilbenceno, con el objetivo de determinar sus variables termodinámicas y configuración de equipos, con ello se obtuvieron intervalos para las variables operacionales. En la presente investigación se simuló y comparó en el Software Aspen Plus, los trabajos de los autores William Luyben y Ganji *et al*, determinando el mejor paquete termodinámico, cinético y la influencia del número de reactores, siendo al final William Luyben la configuración de reactores más adecuada. Por último, se realizó un análisis estadístico por medio de la herramienta Sensitivity de Aspen Plus y el Software Minitab.

Del análisis estadístico se obtuvo que la presión en los reactores y relación de reflujos en las torres no son variables significativas, además los factores más relevantes fueron la temperatura de los reactores y el exceso molar de benceno en el primer reactor, por último, se determinó un intervalo óptimo de trabajo.

*Trabajo de Grado

**Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director Giovanni Morales Medina. Dr. en Ingeniería Química.

ABSTRACT

Title: Analysis of ethylbenzene production performance in a CSTR reactor configuration*

Autor: William David Roman Camargo, Jeferson Gamba González**

Key words: Ethylbenzene, CSTR, Aspen Plus, statistical analysis, Minitab.

Descripcion: Ethylbenzene is an intermediate of styrene that polymerized becomes polystyrene, a material to manufacture industrial mouth caps, disposable for food transport, among other objects with daily use in restaurants, hospitals and laboratories, the Covid 19 pandemic of 2020 has increased its use exponentially, therefore it is necessary to improve the production in CSTR reactors, safer, by studying the operational variables of the equipment.

A bibliographic consultation of the ethylbenzene production was carried out, with the objective of determining its thermodynamic variables and equipment configuration, with this, intervals for the operational variables were obtained. In the present investigation, the works of the authors William Luyben and Ganji *et al* were simulated and compared in the Aspen Plus Software, determining the best thermodynamic and kinetic package and the influence of the number of reactors, being at the end William Luyben the most appropriate configuration of reactors. Finally, a statistical analysis was performed using the Aspen Plus Sensitivity tool and the Minitab Software.

From the statistical analysis, it was obtained that the pressure in the reactors and the ratio of refluxes in the towers are not significant variables, besides that main factor was the temperatures of the reactors and the excess of benzene in the first reactor, finally, determining an optimal working interval.

*Bachelor Thesis

**Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Advisor Giovanni Morales Medina. Chemical Engineer. PhD.

Introducción

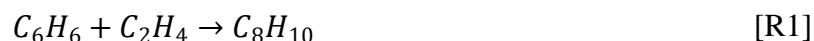
El etilbenceno es ampliamente utilizado para la fabricación de estireno, el cual es en turno polimerizado para la formación de poliestireno. Entre otras aplicaciones, el poliestireno es utilizado en la producción de tapabocas industriales, además de diversos recipientes para la industria de los alimentos. Por la presente pandemia del COVID-19, la demanda tanto de tapabocas como de recipientes ha ido aumentando desde el día 24 de marzo del 2020 por la implementación de los respectivos protocolos de bioseguridad. Según (Tolosa, Rios, Leon, & Perez, 2012) la producción global de etilbenceno en el año 2011 estuvo concentrada principalmente en Estados Unidos produciendo 14130 millones de libras por año. Según Tolosa et al, Colombia no es considerado un país productor; además, según los autores se consume el 51% de la producción anual de benceno y el 7% de la producción anual de etileno es empleado en la producción de etilbenceno. Los anteriores valores dan cuenta de la importancia económica del proceso productivo del etilbenceno.

La producción de etilbenceno puede ser efectuada en diferentes configuraciones de reactores y a diferentes condiciones operativas. La literatura reporta diversos autores que han estudiado el proceso productivo de etilbenceno. Al respecto los trabajos de (Luyben, 2011) y (Hamid *et al.*, 2004). presentan diferentes cinéticas y configuraciones que, según los autores, conducen a representar el proceso de etilbenceno. Debido a las diferentes condiciones operativas y configuraciones, el presente documento fue dedicado al análisis del proceso productivo de etilbenceno utilizando los resultados obtenidos por simulación con el programa Aspen Plus.

Para el desarrollo del trabajo, diversas referencias bibliográficas fueron consultadas para la definición de los rangos operativos del proceso. Por medio de simulaciones en el software Aspen Plus, los paquetes termodinámicos, la cinética de reacción y el número de reactores fueron analizados según su influencia en los resultados, conforme lo reportado en la literatura. Asimismo, un diseño computacional factorial fue aplicado a la simulación desarrollada, con lo cual se obtuvieron las tendencias de producción de etilbenceno. Según los resultados, la presión de operación de los reactores y la relación de reflujo en las torres de destilación no son factores influyentes en la producción de etilbenceno.

1. Estado Del Arte

La producción de etilbenceno consta de reacciones de alquilación y de transalquilación siendo los reactivos benceno y etileno los más empleados, donde se obtiene el producto principal y como producto secundario los polietilbencenos (dietilbenceno, en la mayoría de los casos). Las siguientes ecuaciones químicas representan la producción de etilbenceno.



Estas reacciones pueden ser desarrolladas tanto en fase homogénea como en fase heterogénea, y los reactivos pueden estar tanto en fase líquida como en fase vapor (Gerhartz, 1985). La cinética de las reacciones va sujeta al tipo de catalizador que se emplea, según la fase en la que se realiza la reacción. Los catalizadores más usados (Elgabry, Mansi, Nabil, Ali, & Karim, 2019) son las zeolitas como la H-mordenita, la BXE ALKCAST y en especial la ZSM-5, Además de algunos ácidos de Lewis como BF_3 , $FeCl_3$ y el más usado $AlCl_3$; el Anexo A presenta una tabla resumen de los catalizadores utilizados en el proceso. Es importante mencionar que las zeolitas presentan ventajas sobre los catalizadores basados en ácidos de Lewis, ya que estos últimos son proclives a la corrosión en los equipos y solo funcionan en fase líquida (Elgabry et al., 2019).

Las cinéticas de reacción encontradas en la literatura para las reacciones de producción de etilbenceno son presentadas en las Tablas 1 y 2. La Tabla 1 presenta las constantes para la cinética

de 2do orden propuesta por Luyben para el catalizador de Zeolita ZSM-5 (Luyben, 2011). La Tabla 2 muestra las ecuaciones cinéticas propuestas por Ganji *et al.* para el catalizador cloruro de aluminio (AlCl_3) (Hamid, Jafar S. Ahari, Amir, & Majid, 2004).

Tabla 1

Datos cinéticos de las reacciones de alquilación y transalquilación propuesto por William Luyben

	R1	R2	R3
k	$1.528 \cdot 10^6$ (6)	$2.778 \cdot 10^7$ (7)	1000
E [cal/mol]	17000	20000	15000
Concentraciones [kmol/m³]	$[\text{C}_E] \cdot [\text{C}_B]$	$[\text{C}_E] \cdot [\text{C}_{EB}]$	$[\text{C}_B] \cdot [\text{C}_{DEB}]$

Nota. Adaptado de William Luyben (2011)

Tabla 2*Datos cinéticos de las reacciones de alquilación y transalquilación propuesto por Ganji et al*

R1 [kmol/(m³ *s)]	$\frac{1.771 * 10^5 * \exp\left(\frac{-6.334 * 10^4}{RT}\right) C_E}{1 - 1.52 * 10^{-2} * \exp\left(\frac{-3.993 * 10^3}{RT}\right) C_{EB}}$
R2 [kmol/(m³ *s)]	$69.45 * \exp\left(\frac{-4.703 * 10^4}{RT}\right) C_{EB} C_E$
R3 [kmol/(m³ *s)]	$\frac{40.47 * \exp\left(\frac{-6.128 * 10^4}{RT}\right) C_{DEB} C_B^{1.0218}}{1 + 3 * 10^{-6} * C_B}$

Nota. Adaptado de (Hamid et al., 2004)

Por su parte, la Tabla 3 presenta una comparación entre la producción de etilbenceno en fase líquida y la producción en fase vapor. Según esta tabla, la fase líquida presenta la ventaja en la producción de etilbenceno, dado que permite ahorrar costos de operación al trabajar a temperaturas y presiones más bajas, con una menor cantidad de exceso de benceno, además de extender la vida de utilidad del catalizador.

Tabla 3*Comparación entre dos modos de operación para la reacción de alquilación*

Producción empleando catalizador de Zeolita en fase líquida	Producción empleando catalizador de Zeolita en fase gas
Temperaturas y presiones de operación moderadas, en un rango de 420-470 K y 4.76-10.21 atm	Condiciones de operación extremas entre 675-725 K y 13.61-27.22 atm resultando en un alto riesgo

Alimentación al reactor de alquilación de relación benceno/etileno de 1.5-2 en base molar	Relación benceno/etileno es aproximadamente 8-16 en fracción mol
Requiere ambos reactores de alquilación y transalquilación en serie.	Usan dos reactores en paralelo, alquilación y transalquilación toman lugar en el mismo reactor, mientras el otro es para regeneración.
La vida del catalizador es de aproximadamente entre 2 a 5 años para los reactores de alquilación y transalquilación	El catalizador requiere regeneración entre dos a 4 semanas.

Nota. Adaptado de (Elgabry et al., 2019)

En lo referente a la simulación del proceso de producción de etilbenceno, a continuación, se revisan diferentes trabajos encontrados en la literatura abierta.

Hamid *et al.*, 2004, del Instituto de investigación de la industria petrolera, en Tehran, Irán, codificaron un software de simulación para una planta de producción de etilbenceno, con base en datos históricos industriales. Los autores aplicaron las ecuaciones de masa, energía y momento empleando técnicas de optimización. Según los autores, el sistema de reacciones propuesto y el software codificado reprodujeron la información de la planta de procesos; sin embargo, no especificaron el paquete termodinámico empleado.

(Alpuche Manrique, 2009) analizó la configuración propuesta por Luyben (2002) para minimizar el efecto *snowball*, utilizando el simulador Aspen Plus; este efecto se refiere a que un cambio en los flujos de entrada causa un cambio significativo en los flujos recirculados. La autora definió en las simulaciones el paquete termodinámico Lee Kesler Plocker. Alpuche-Manrique también desarrolló una simulación dinámica, teniendo en cuenta las estructuras de control de

Luyben (2002) y Larson y colaboradores (2003). Basada en sus resultados, la autora afirmó que se pudo encontrar una respuesta aceptable con la configuración propuesta en Luyben (2002), pero que no consiguió una minimización del consumo energético de las columnas.

Luyben, 2011, diseñó un proceso de dos reactores CSTR y dos columnas de destilación para la producción de etilbenceno. El autor planteó un sistema de control y optimización del costo total de producción, en función del tamaño de los reactores y el funcionamiento de las torres; Luyben aplicó el software Aspen Plus y el paquete termodinámico Chao Seader. Según sus resultados, el autor afirmó que existe una relación directamente proporcional entre el tamaño de los reactores y los flujos molares de recirculación, además planteó que los controladores simples son efectivos para la configuración planteada.

Tolosa *et al.*, 2012, se enfocaron en simular y diseñar un proceso óptimo de producción de etilbenceno. Los autores compararon diferentes materias primas para la producción de etilbenceno dependiendo de la disponibilidad, los costos y la accesibilidad de la materia prima; además, emplearon los software Aspen Plus y Aspen Icarus en la optimización del proceso, en términos de la demanda de producto, los costos y las dimensiones de los equipos. Los autores concluyeron que las mejores materias primas son benceno y el etileno en Colombia, además de encontrar una optimización del poder económico (PE) en función de la conversión del etileno y el grado de recirculación.

Jagtap *et al.*, 2013, basándose en el trabajo realizado por (Luyben, 2011), modificaron los sistemas de control del proceso, considerando los sistemas de control económico de la planta: “top-down” (CS1) creado por el autor y “Bottom-up” (CS2); este último sistema corresponde al

convencional, basado en optimización económica y regulaciones operativas. Los autores emplearon el programa de simulación Aspen Plus y el paquete termodinámico Chao Seader. Según los autores, el sistema CS1 presentó una respuesta dinámica, conduciendo a un desempeño económicamente superior al CS2, en un rango del 1 al 12%.

Ng *et al.*, 2017, realizaron un diseño y un análisis de la producción de etilbenceno, utilizando una columna de destilación convencional; asimismo, los autores desarrollaron un análisis considerando una columna de pared divisoria. Los cálculos fueron desarrollados en Aspen Hysys, con los paquetes termodinámicos Peng Robinson y Soave-Redlich-Kwong (SRK). Ng *et al.* compararon las constantes cinéticas de Luyben (2002 y 2010) y Ganji *et al.* (2004), en su estructura de 6 reactores PFR. Según los autores, la mejor cinética para la representación del proceso correspondió a la propuesta por Luyben 2010. También, los autores manifestaron que una torre de pared dividida disminuyó la inversión de capital inicial en un 2.8%, además de aumentar el valor presente neto de la planta en un 137.6%.

Del Pino-Gutiérrez, 2019, propuso un diseño preliminar de una planta de producción de 120.000 ton/año de etilbenceno. Este autor planteó un diagrama de proceso con la ayuda del simulador Pro II con integración energética, considerando el paquete termodinámico Soave-Redlich-Kwong (SRK). Basado en sus resultados, Del Pino-Gutiérrez afirmó que su proceso es rentable con tiempo de retorno de la inversión en 1.3 años, pero la estimación económica tiene un error de aproximadamente un 30% por fallos en la obtención de precios de las materias primas.

Monsalve-Sánchez, 2019, analizó los costos del proceso de etilbenceno, empleando la herramienta informática Aspen Hysys V.9, con el paquete termodinámico de Peng Robinson; la

autora consideró una red de intercambiadores de calor con integración energética en el diagrama de flujo codificado en Aspen Hysys. Según sus resultados, la autora afirmó que el uso de la integración energética con la red de intercambiadores de calor redujo los costos de la planta un 67.1%.

Valdivia, 2019, simuló el efecto de la presión en la síntesis y purificación de etilbenceno de alta pureza, usando el software libre como COCO V.3.3, con su herramienta Chemsep. El autor definió dos reactores de conversión fija, dos torres de destilación y dos corrientes de reciclaje en sus simulaciones; asimismo, el autor utilizó el paquete termodinámico Chao-Seader. Según el autor, la configuración empleada permitió la obtención de una conversión global del 99.9%. Además, Valdivia concluyó que la posición del plato de alimentación en las torres influyó en la relación de reflujo adecuada para el proceso.

También, el Anexo B del presente documento muestra una recopilación de los diagramas de flujo de proceso (PFD) de los autores. Según la información de este anexo, los autores han utilizado diferente número de reactores y torres de destilación. El Anexo C presenta la recopilación bibliográfica de las variables operacionales de los reactores empleados en la literatura. Según este anexo, el exceso de benceno con respecto al etileno se ha definido en el rango entre 2 y 3, con excepción de reactores PFR cuyo exceso ha sido definido entre 5 y 16. Asimismo, las presiones de operación en los reactores se han analizado en el rango entre 2 y 20 atm (con excepción del artículo de Ganji *et al* cuya presión fue de 37.5 atm). Respecto a los reactores CSTR, los volúmenes habituales han sido definidos como 200 m³ (son necesarios 2 reactores), mientras que en los PFR han sido analizados en un número entre 2 y 7 reactores. La literatura también muestra que los

reactores CSTR utilizados en el proceso requieren una operación a altas presiones, mientras que en los PFR han sido considerados para los reactivos en fase vapor, operando a altas temperaturas.

Por su parte, el Anexo D presenta la recopilación bibliográfica de las variables operacionales de las columnas de destilación empleadas en la literatura. Según este anexo la mayoría de las torres de destilación para el proceso de etilbenceno considera presiones mayores a la atmosférica. En general, las torres que operan a baja presión necesitan de un menor número de etapas y las relaciones de reflujo varían entre 0.6 y 0.8, mientras que las torres de destilación con presiones mayores a la atmosférica requieren de mayores relaciones de reflujo y mayor cantidad de platos.

La información anterior muestra que el proceso de producción de etilbenceno presenta un amplio rango de opciones operativas (temperaturas, presiones, fases, clases de reactores). La Tabla 4 recopila los intervalos para las variables operacionales, tanto en los reactores CSTR en serie como en las columnas de destilación al vacío. Estas torres son las definidas en el trabajo de Luyben y además corresponden con los reportes de menores costos de producción y operación (Gorak & Olujić, 2014) (Orozco de la Pava, Andrés Felipe, 2018). De igual manera, las simulaciones del proceso han sido desarrolladas considerando diferentes paquetes termodinámicos, como Peng Robinson, Soave-Redlich-Kwong (SRK), Chao Seader y Lee Kesler Plocker. Por lo anterior, el presente documento exhibe los principales resultados obtenidos de un análisis, por simulación, del desempeño del proceso de producción de etilbenceno, considerando las opciones presentadas en la Tabla 4 y los diferentes paquetes termodinámicos.

Tabla 4*Límites de las variables operacionales en los reactores y las columnas de destilación*

Reactores CSTR		Reactores	
		R-alquilación	R-transalquilación
Temperatura (K)	Bajo	310,970	431,410
	Alto	434,000	449,820
Presión (atm)	Bajo	2,300	2,100
	Alto	20,000	20,000
Exceso de benceno	Bajo	2,421	2,918
	Alto	2,537	137,805
Torres de vacío		Torres de destilación	
		1	2
Reflujo en el condensador	Bajo	0,774	0,432
	Alto	0,811	0,661

2 Objetivos

2.1 Objetivo General

Analizar por simulación computacional el desempeño en la producción de etilbenceno en una configuración de reactores CSTR, definiendo las tendencias en el proceso según las variaciones en las temperaturas, presiones, el exceso de benceno en los reactores y la relación de reflujo en las torres de destilación.

2.2 Objetivos Específicos

Desarrollar una simulación en el software Aspen Plus, definiendo el paquete termodinámico y la ecuación cinética con mayor exactitud en la reproducción de datos reportados, según la configuración de reactores CSTR para la producción de etilbenceno.

Aplicar un diseño experimental, basado en la simulación desarrollada, que permita la obtención de las tendencias de variación de los rendimientos con las diferentes variables operacionales.

Validar las tendencias obtenidas de la aplicación del diseño experimental con aquellas reportadas en la literatura, validando los resultados obtenidos con la simulación desarrollada.

3. Descripción Metodológica

Las fases y actividades planteadas para el cumplimiento de los objetivos propuestos son descritas a continuación. Asimismo, la Figura 1 resume estas fases y actividades.

3.1 Fase I. Desarrollo de una Simulación en el Software Aspen Plus

3.1.1 Actividad 1. Revisión de literatura.

Diversas referencias sobre la producción de etilbenceno fueron consultadas, donde se recopiló información sobre los tipos y número de reactores, variables de operación (temperatura, presión, flujo molar), exceso de benceno en la reacción, fracciones molares y volúmenes de los reactores de alquilación y transalquilación.

3.1.2 Actividad 2. Codificación del diagrama de proceso en Aspen Plus.

Posteriormente se configuró en el simulador Aspen Plus los compuestos (Benceno, Tolueno, Etilbenceno y Dietilbenceno), el modelo termodinámico Chao Seader con los paquetes de reacciones de William Luyben y Ganji *et al* (con modificaciones de Qi Han Ng), finalmente, se simularon los diagramas de procesos basándose en los artículos antes mencionados, como se observa en el Anexo E

3.1.3 Actividad 3. Comparación de los modelos termodinámicos y cinéticos.

En la comparación de los diferentes modelos termodinámicos se simuló cada uno de ellos teniendo en cuenta tanto las salidas de los reactores y columnas, para hallar sus errores relativos y absolutos respecto al artículo original, como también la desviación estándar entre las diferentes

simulaciones, se realizó el mismo procedimiento para comparar los modelos cinéticos de William Luyben y Ganji *et al.*

3.1.4 Actividad 4. Análisis de la influencia del número de reactores en el proceso.

Después la simulación se cambió a un solo reactor con un volumen total a la suma de los reactores de alquilación y transalquilación, evaluando las mismas corrientes y comparándolas con la simulación anterior

3.2 Fase II. Desarrollo de un Diseño Computacional Factorial

3.2.1 Actividad 5. Definición de los factores.

Las variables evaluadas fueron recopiladas en la Tabla M 4, el exceso de benceno en el primer reactor no se pudo modificar directamente por los reciclos, por lo tanto, esta se modificó por medio del flujo molar de entrada de benceno fresco al proceso, las variables evaluadas fueron expuestas en la Tabla M 5.

3.2.2 Actividad 6. Ejecución del diseño computacional factorial.

En el diseño computacional de Aspen Sensitivity se tuvo en consideración en los reactores, las temperaturas, presiones y el exceso de benceno en el reactor de alquilación, en el caso de las columnas se evaluó las relaciones de reflujo, como variables independientes para determinar su influencia en las variables evaluadas en la Tabla M 5, para considerarse una variable significativa, el criterio de selección fue el aumento de mínimo 10 kmol/h en la producción de etilbenceno a la salida del proceso.

3.2.3 Actividad 7. Análisis de la influencia de los factores.

Una vez determinado por método gráfico los factores significativos individuales del proceso, eliminando aquellos que no cumplan con el criterio de evaluación, se procedió a verificar su relevancia por medio del Software de análisis estadístico en su versión libre de prueba Minitab versión 19, que emplea las ecuaciones encontradas en el capítulo 5 y 6 del libro “Diseño y análisis de experimentos” de Douglas C. Montgomery (Montgomery, 2004)

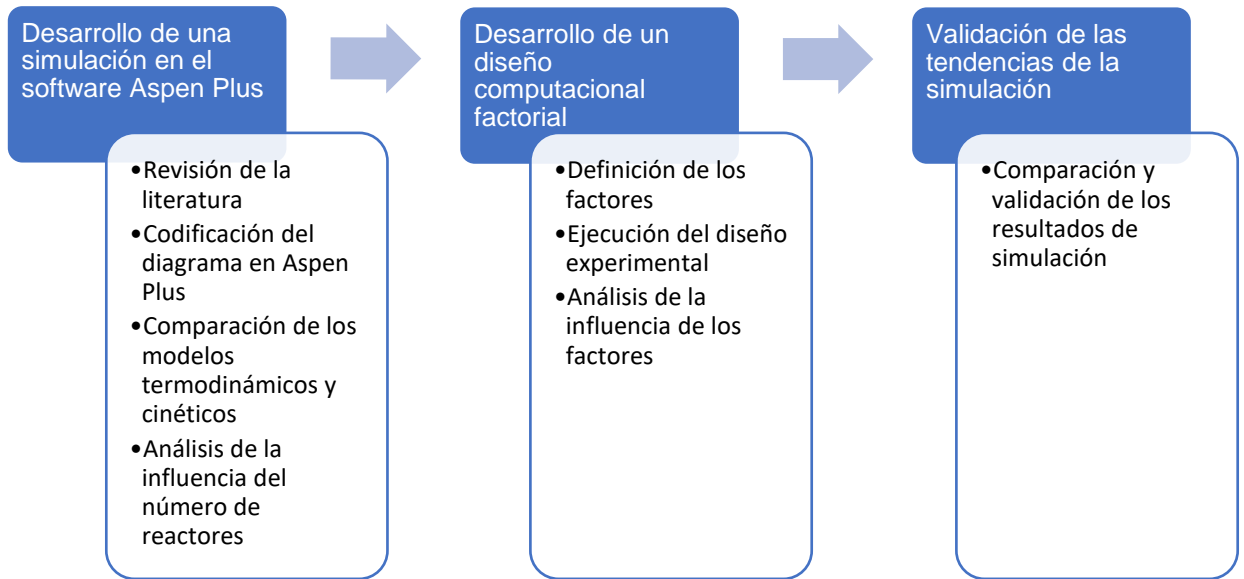
3.3 Fase III. Validación de las Tendencias De La Simulación

3.3.1 Actividad 8. Comparación y validación de los resultados de simulación.

Con base a los resultados en Minitab y Aspen Sensitivity se determinó la factibilidad de los resultados, por medio de la comparación con la literatura. Posteriormente, se determinó el intervalo operacional de las variables en los equipos que conduce a mayores valores en la producción de etilbenceno.

Figura 1

Esquema de la metodología desarrollada



4. Análisis De Resultados

4.1 Determinación del Modelo Termodinámico

4.1.1 Configuración de Luyben

Esta configuración presenta 2 reactores CSTR de 200 m³ cada uno y dos columnas de destilación al vacío con dos corrientes de reciclo a los reactores. La configuración propuesta por Luyben para la producción de etilbenceno fue codificada en Aspen Plus. La Figura F 1 en el Anexo F presenta el diagrama de flujo para esta configuración. La simulación del proceso de producción fue ejecutada considerando diferentes paquetes termodinámicos y las condiciones de flujo de entrada de las dos corrientes de alimentación al proceso de benceno y etileno puro fueron de 630.6 kmol/h cada una, a una temperatura de 320 K y una presión de 1 atm. Los resultados son

presentados en la Tabla 5, en términos de los errores relativos respecto a los resultados expuestos en Luyben; este autor utilizó el paquete termodinámico Chao Seader en sus simulaciones con el programa Aspen Plus. En la Tabla 5, R1OUT, R2OUT, RBEN, RDIETIL y ETILBEN hacen referencia a los flujos molares de las corrientes que salen del primer reactor, el segundo reactor, el destilado de la primera columna, el fondo y el destilado de la segunda columna respectivamente. Los resultados completos de las simulaciones pueden ser consultados en el Anexo G.

Tabla 5

Errores relativos de la simulación en Aspen Plus de William Luyben variando los paquetes termodinámicos

Componente	R1OUT	R2OUT	RBEN	RDIETIL	ETILBEN
Chao Seader					
C6H6	5,27%	0,12%	0,03%	0,00%	221,99%
C8H10	5,34%	0,32%	41,01%	88,33%	0,22%
C10H14	5,33%	5,96%	0,00%	0,09%	221,93%
C2H4	5,34%	43,30%	10,07%	0,00%	0,00%
Peng Robinson					
C6H6	5,25%	0,14%	0,05%	0,00%	202,31%
C8H10	5,38%	0,35%	69,40%	93,74%	0,20%
C10H14	5,38%	5,97%	0,00%	0,09%	202,57%
C2H4	5,36%	43,33%	10,03%	0,00%	0,00%
Soave Redlich Kwong					
C6H6	5,22%	0,16%	0,07%	0,00%	241,37%

C8H10	5,49%	0,41%	82,17%	95,66%	0,24%
C10H14	5,17%	5,93%	0,00%	0,10%	242,25%
C2H4	4,36%	42,74%	11,17%	0,00%	0,00%
Lee Kesler Plocker					
C6H6	5,28%	0,11%	0,02%	0,00%	225,61%
C8H10	5,33%	0,32%	33,43%	94,87%	0,23%
C10H14	5,31%	5,95%	0,00%	0,10%	224,38%
C2H4	5,34%	43,30%	10,08%	0,00%	0,00%

Según los resultados de la Tabla 5, varios errores relativos superan el 10 %, esto debido a la magnitud de los flujos para los respectivos compuestos; en este sentido, la predicción del flujo de los reactivos a la salida del proceso presenta un error absoluto bajo (Tabla G 2, Anexo G), pero un error relativo elevado, esto se debe que en la salida de la primera torre se presenta un flujo molar de benceno y subproducto muy pequeño como se presenta en la Tabla G 1 y cualquier cambio poco significativo en el proceso genera errores relativos elevados. Asimismo, según la Tabla 5, los errores relativos obtenidos con la aplicación de los diferentes paquetes termodinámicos presentan tendencias similares. Las sumatorias de los errores absolutos de predicción de los paquetes presentes en la Tabla G 2 corresponden a: Chao Seader 114.959 kmol/h, Peng Robinson 115.728 kmol/h, SRK 116.914 kmol/h, LKP 114.766 kmol/h. Según los errores, los paquetes termodinámicos presentan un desempeño comparable en sus predicciones para el proceso de producción de etilbenceno.

4.1.2 Configuración de Ganji *et al*

Esta configuración comprende 2 reactores de alquilación 10.273 m^3 y 1 reactor de transalquilación de 32.0914 m^3 , con reciclos de benceno y polietilbencenos, sin la inclusión de las torres de destilación. La configuración propuesta por Ganji *et al.* para la producción de etilbenceno fue codificada en Aspen Plus. La Figura F 2 Anexo F presenta el diagrama de flujo codificado. Las simulaciones con esta configuración fueron ejecutadas considerando diferentes paquetes termodinámicos y las condiciones operacionales: flujo másico de entrada de benceno puro 38239.212 Kg/h , dos corrientes de alimentación de etileno de 1890 kg/h cada uno, las corrientes y los equipos operan a 38 bar y con temperaturas entre 485.69 y 490.25 K . La Tabla 6 presenta los resultados de las simulaciones en términos de los errores relativos en la predicción del flujo de cada componente, respecto a lo obtenido por Ganji *et al.*; estos autores codificaron su propio algoritmo de simulación, sin embargo, no mencionaron el paquete termodinámico utilizado. El Anexo G presenta los resultados de las simulaciones, así como los errores absolutos obtenidos con cada paquete termodinámico. Según la Tabla 6, la predicción realizada por la simulación codificada en Aspen Plus presenta errores relativos elevados para los flujos de salida de los productos. Estos errores pueden ser debidos a los parámetros cinéticos especificados por Ganji *et al.* (errores tipográficos). En la Tabla 6, R1IN, R1OUT, R2IN, R2OUT, R3IN y R3OUT hacen referencia a los flujos masicos de las corrientes que entran y salen del primer reactor, el segundo reactor y el tercer reactor respectivamente. La tendencia en los errores reportados por cada paquete termodinámico es similar, con lo cual se puede afirmar que los paquetes utilizados pueden ser empleados en la simulación de la configuración (desde luego, con previo ajuste de la cinética).

Tabla 6*Errores relativos de la simulación en Ganji et al variando los paquetes termodinámicos*

Componente	R1IN	R1OUT	R2IN	R2 OUT	R3IN(BENCENO2)	R3 OUT
Chao Seader						
C6H6	0,00%	3,58%	0,00%	2,86%	0,88%	1,71%
C8H10	0,00%	6,01%	0,00%	5,91%	0,88%	61,64%
C10H14	0,00%	66,91%	0,00%	68,62%	0,88%	68,23%
Peng Robinson						
C6H6	0,00%	3,58%	0,00%	2,86%	0,88%	1,71%
C8H10	0,00%	6,01%	0,00%	5,91%	0,88%	61,64%
C10H14	0,00%	66,91%	0,00%	68,62%	0,88%	68,23%
Soave Redlich Kwong						
C6H6	0,00%	3,58%	0,00%	2,86%	0,88%	1,73%
C8H10	0,00%	6,01%	0,00%	5,91%	0,88%	63,37%
C10H14	0,00%	66,91%	0,00%	68,62%	0,88%	70,08%
Lee Kesler Plocker						
C6H6	0,00%	3,60%	0,00%	2,88%	0,88%	1,71%
C8H10	0,00%	6,25%	0,00%	5,85%	0,88%	61,64%
C10H14	0,00%	68,13%	0,00%	69,65%	0,88%	68,23%

4.2. Pruebas con las Cinéticas.

Los errores obtenidos con la configuración de Ganji *et al.* conllevaron a un análisis respecto a las cinéticas de reacción, para determinar el paquete cinético que conlleve a menores errores de predicción comparándolo con los artículos. La cinética especificada por Luyben considera las reacciones de alquilación catalizadas con zeolitas, mientras que la cinética especificada por Ganji *et al.* considera las reacciones de alquilación asistidas con cloruro de aluminio (AlCl_3). Por lo anterior, dos simulaciones adicionales fueron ejecutadas considerando las configuraciones de Luyben y Ganji *et al.* con diferentes catalizadores (cinéticas).

4.2.1 Configuración de Luyben con catalizador de AlCl_3 .

La configuración propuesta por Luyben fue simulada considerando el catalizador de AlCl_3 y la cinética especificada por Ganji *et al.* La simulación fue ejecutada considerando el paquete termodinámico Chao Seader y las condiciones de operación de flujo molar de entrada de benceno y etileno puro de 630.6 kmol/h, cada uno, con temperaturas de 320 K y presión de 1 atm. La Tabla 7 presenta los resultados de la simulación en términos de los errores relativos, respecto a lo reportado por Luyben. Según esta tabla, la cinética especificada por Ganji *et al.* condujo a errores elevados en la predicción de los flujos de salida del proceso (14504,1%). Este error puede deberse a las diferentes condiciones de operación entre las configuraciones donde Ganji *et al.* emplearon reactores de flujo axial 19 veces más pequeños en volumen en el caso de los reactores de alquilación y 6 veces más pequeños en el caso de los de transalquilación, además usa mayores temperaturas y presiones con una diferencia de 58 K y 17,5 atm respectivamente a comparación de las condiciones empleados por William Luyben. Asimismo, los errores pueden deberse a valores equivocados en la cinética de Ganji *et al.*

Tabla 7*Errores relativos de William Luyben con cinética de Ganji et al*

COMPUESTO	R1OUT	R2OUT	RBEN	RDIETIL	ETILBEN
Artículo Luyben					
C6H6	1113,933	968,477	968,334	0,000	0,315
C8H10	490,314	631,223	0,969	0,282	629,969
C10H14	84,970	301,120	0,000	281,918	0,315
C2H4	6,614	0,188	0,097	0,000	0,000
Simulación con la cinética de Ganji et al.					
C6H6	1050,511	1012,304	966,258	0,000	46,047
C8H10	496,736	538,518	0,008	0,002	538,508
C10H14	49,619	328,247	0,000	282,201	46,047
C2H4	37,633	3,000	3,000	0,000	0,000
Errores relativos					
C6H6	5,69%	4,53%	0,21%	0,00%	14504,09%
C8H10	1,31%	14,69%	99,20%	99,44%	14,52%
C10H14	41,60%	9,01%	0,00%	0,10%	14504,15%
C2H4	468,96%	1494,05%	2994,71%	0,00%	0,00%

4.2.2 Configuración de Ganji et al. con catalizador de zeolita.

La configuración de reactores propuesta por Ganji *et al.* fue simulada utilizando la cinética definida por Luyben para el catalizador de zeolita. La Tabla 8 presenta los resultados obtenidos

con la simulación. Según esta tabla, el uso de la cinética especificada por Luyben conduce a errores en la predicción de la reacción de transalquilación del reactor 3, particularmente en la producción de etilbenceno dado a que en la cinética de Luyben se observa una mayor conversión de etileno formando una mayor cantidad de producto y subproducto. No obstante, las predicciones obtenidas con esta cinética presentan resultados más acordes, comparados con el caso estudiado en la sección anterior. Con esto, la cinética reportada por Luyben conduce a mejores resultados en las predicciones del proceso de producción de etilbenceno para las configuraciones analizadas. Por lo anterior, la configuración del proceso y la cinética propuestas por Luyben serán consideradas en las siguientes secciones del documento.

Tabla 8

Errores relativos de Ganji et al con cinética de William Luyben

Componente	R1OUT	R2OUT	R3OUT
Artículo Ganji et al			
C6H6	0,869	0,777	0,935
C8H10	0,101	0,182	0,036
C10H14	0,005	0,015	0,021
Simulación con la cinética de William Luyben			
C6H6	0,896	0,799	0,904
C8H10	0,098	0,185	0,084
C10H14	0,006	0,015	0,012
Errores Relativos			
C6H6	3,06%	2,795%	3,23%

C8H10	3,12%	1,759%	133,9%
C10H14	17,97%	0,437%	44,77%

4.3. Simulación con un solo Reactor

La configuración del proceso de producción de etilbenceno propuesta por Luyben fue analizada considerando un solo reactor por medio de una simulación computacional, y una revisión bibliográfica, de la factibilidad en términos de control y producción de llevar a cabo una reducción en el número de reactores; teniendo en cuenta que en el Figura F 1 se muestra un reciclo de dietilbenceno al reactor de transalquilación; se medirá la afectación al recircularlo directamente a un reactor cuyo volumen fue establecido como la suma de los dos reactores de la configuración de Luyben. El diagrama de flujo codificado en Aspen Plus para un solo reactor es mostrado en la Figura F 3 del Anexo F. La simulación fue ejecutada con el paquete termodinámico Chao Seader y con las condiciones de operación de flujo molar de entrada de benceno y etileno puro de 630.6 kmol/h con temperaturas de 320 K y presión de 1 atm. Los resultados de los flujos de salida predichos por la simulación para cada condición son presentados en la Tabla 10. Los valores entre paréntesis en esta tabla corresponden a la comparación respecto a los resultados de Luyben. Según esta tabla, la conversión es casi completa (99.98%) utilizando un solo reactor a las dos condiciones operación; aunque, la mayor conversión se presenta a la condición de mayor temperatura. Comparando los resultados de la simulación de un solo reactor, con los resultados de Luyben (dos reactores), es posible deducir una mejoría leve en la conversión, utilizando un solo reactor. Asimismo, con un solo reactor se presenta una leve mejoría en la pureza de los reciclos de benceno y de dietilbenceno (Tabla 9).

Tabla 9*Pureza molar en las corrientes de reciclo*

Pureza molar en las corrientes		
Tipo de reactor	Benceno (RBEN)	Dietilbenceno (RDIETIL)
Artículo (Luyben,2011)	99,89%	99,90%
1 reactor (20 atm y 434 K)	98,68%	99,96%
1 reactor (19 atm y 432 K)	99,42%	99,99%
2 reactores	99,96%	99,99%

Tabla 10*Flujos molares de los reciclos y la salida del reactor y el proceso*

UNIDADES		R1OUT	RBEN	RDIETIL	ETILBEN
20 atm y 434 K					
C6H6	kmol/h	956,5(1%)	956,5(1%)	0,0(0%)	0,0(84%)
C8H10	kmol/h	638,4(1%)	7,8(701%)	0,1(60%)	630,5(0%)
C10H14	kmol/h	282,1(6%)	0,0(0%)	282,1(0%)	0,0(84%)
C2H4	kmol/h	5,0(2575%)	5,0(5094%)	0,0(0%)	0,0(0%)
19 atm y 432 K					
C6H6	kmol/h	966,5(0%)	963,7(0%)	0,0(0%)	2,8(793%)
C8H10	kmol/h	625,1(1%)	0,1(90%)	0,0(97%)	625,0(1%)
C10H14	kmol/h	285,0(5%)	0,0(0%)	282,2(0%)	2,8(793%)
C2H4	kmol/h	5,5(2814%)	5,5(5556%)	0,0(0%)	0,0(0%)
Dos reactores					

	UNIDADES	R2OUT	RBEN	RDIETIL	ETILBEN
C6H6	kmol/h	969,8(0%)	968,9(0%)	0,0(0%)	1,0(202%)
C8H10	kmol/h	629,0(0%)	0,3(69%)	0,0(94%)	628,7(0%)
C10H14	kmol/h	283,1(6%)	0,0(0%)	282,2(0%)	1,0(203%)
C2H4	kmol/h	0,1(43%)	0,1(10%)	0,0(0%)	0,0(0%)

A nivel operativo, la literatura recomienda la configuración con dos reactores, lo cual disminuye las posibilidades de ensuciamiento del catalizador (ensuciamiento con polialquilbencenos) (Del Pino Gutiérrez, 2019). Además, el sistema de control presenta una mejor respuesta en la configuración de los dos reactores, debido al menor volumen de cada uno (Cunill García, Iborra Urios, & Tejero Salvador, 2010). Por lo anterior, la configuración de Luyben con dos reactores será considerada en la siguiente sección.

4.4. Aplicación de un Diseño Computacional Factorial

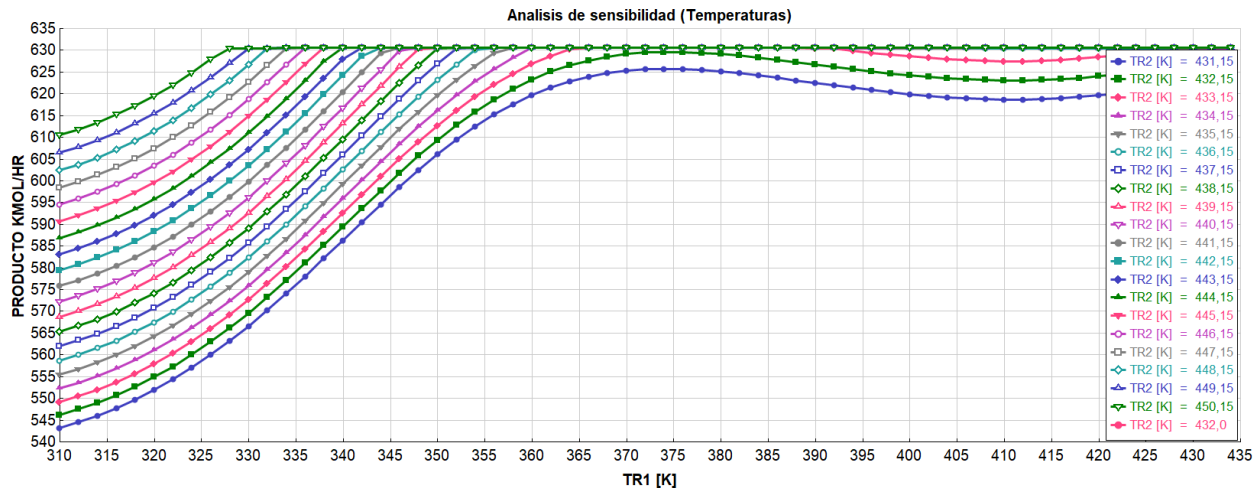
El diseño computacional factorial definido en la metodología fue aplicado a la simulación de la configuración de Luyben, con el paquete termodinámico Chao Seader y el catalizador de zeolita. Los factores considerados fueron temperatura y presión de los reactores, el exceso de benceno a la entrada del reactor de alquilación y la relación de reflujo en las torres. Los límites de los anteriores factores fueron definidos en la sección de Estado del Arte (Tabla 4). Las simulaciones fueron ejecutadas con la herramienta *Sensitivity* de Aspen Plus; los resultados de flujos molares de los productos fueron las variables de respuesta en cada simulación. Los resultados de las simulaciones son presentados en los Anexos H, I, J, K.

4.4.1 Dependencia con la temperatura.

La Figura 2 presenta la variación del flujo molar del producto etilbenceno (eje vertical) con las temperaturas de los reactores. El eje horizontal de la figura representa la temperatura del primer reactor, mientras que las líneas con diferente marcador y color representan diferentes temperaturas de operación para el segundo reactor. Según la Figura 2, el aumento de la temperatura en el primer reactor conduce a un aumento en la producción de etilbenceno; este aumento exhibe un punto máximo, después del cual, la producción de etilbenceno disminuye ligeramente. El punto de máxima producción de etilbenceno se presenta en *ca.* 375 K. Asimismo, manteniendo la temperatura del primer reactor constante, un aumento en la temperatura del segundo reactor conduce, como se esperaba, a una elevación en la producción de etilbenceno. En la Figura 2 se evidencia que la línea de máxima producción es de 630.6 kmol/h (conversión completa). Según las tendencias, esta producción se alcanza con temperaturas superiores a 330 K para el primer reactor y con temperaturas inferiores a 450 K para el segundo reactor. A medida que aumenta la temperatura del primer reactor, disminuye la temperatura mínima requerida en el segundo reactor para alcanzar la máxima producción de etilbenceno.

Figura 2

Flujo molar de etilbenceno producto a la salida del proceso vs las temperaturas de los reactores empleando Aspen Plus



La Figura 3 presenta la variación de la temperatura mínima del segundo reactor (TR_{2min}) respecto a la temperatura definida para el primer reactor (TR_1); la temperatura mínima hace referencia a aquella requerida para conversión completa. En esta figura es posible apreciar dos tendencias lineales con diferente pendiente; la primera tendencia se presenta para TR_1 entre 337.95 y 357.95 K con pendiente negativa, lo cual reporta una conversión de etileno entre 37.3 y 59.3% en el reactor de alquilación. La segunda tendencia para TR_1 entre 357.95 y 365.95 K describe una pendiente negativa mayor a la observada en la tendencia 1, reportando una conversión de etileno entre 59.3 y 66.65%. Según la Figura 3, existe una relación inversamente proporcional entre la temperatura del reactor 1 (TR_1) y la temperatura mínima del reactor 2 (TR_{2min}), con valor mínimo global de TR_{2min} igual a 433.15 K.

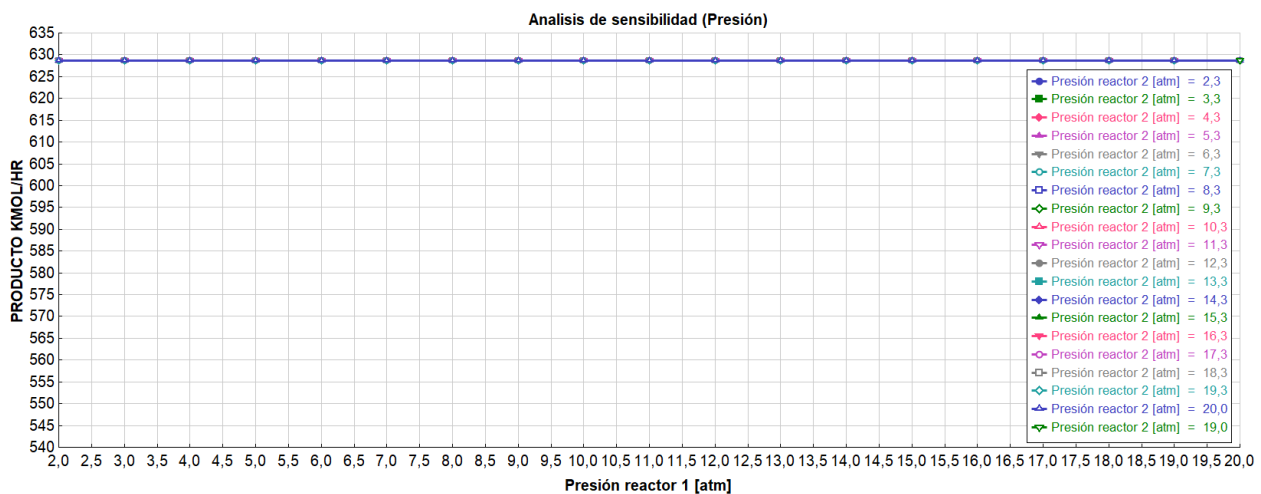
Figura 3

Regresión de los puntos de temperatura mínimos donde se alcanza la máxima conversión

línea recta a lo largo del eje. Lo anterior puede ser explicado, ya que la presión no afecta el estado de la materia del benceno que entra al reactor, siendo este líquido, permitiendo que se produzca la reacción heterogénea. La Figura I 2 en el Anexo I muestra que la fracción de líquido es independientemente de la presión en los reactores.

Figura 4

Flujo molar de etilbenceno producto la salida del proceso contra las presiones de los reactores empleando Aspen Plus



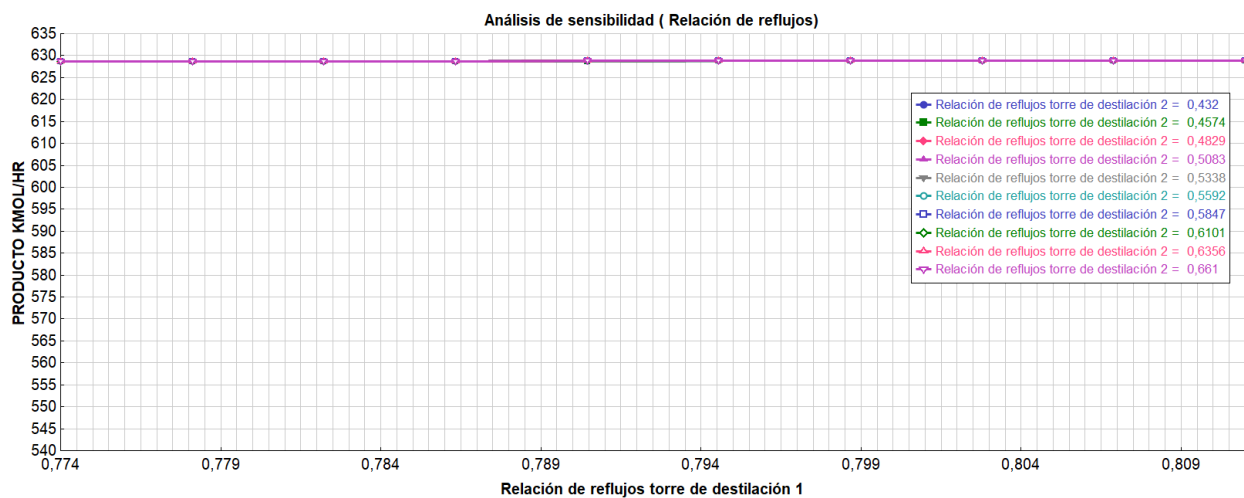
4.4.3 Dependencia con los reflujos.

La Figura 5 presenta la variación del flujo molar del producto etilbenceno (eje vertical) con las relaciones de reflujo en las columnas. El eje horizontal de la figura representa la relación de reflujos de la primera columna de destilación, mientras que las líneas con diferente marcador y color representan diferentes relaciones de reflujo de operación para la segunda columna. Las temperaturas de los reactores fueron fijadas en 434 y 432 K respectivamente. Según la Figura 5, la relación de reflujo en la primera columna tiene un comportamiento lineal con respecto a su variable

respuesta, pero con una pendiente casi nula en el intervalo evaluado. Por su parte, la relación de reflujo en la segunda columna presenta un efecto poco significativo sobre la producción de etilbenceno; las demás graficas obtenidas en el *Sensitivity* son observables en el Anexo J. Con esto, los reflujos presentan una influencia poco significativa en la conversión de los productos.

Figura 5

Flujo molar de Etilbenceno a la salida del proceso contra la relación de reflujos empleando Aspen Plus



4.4.4 Dependencia con el exceso molar de benceno/etileno en el primer reactor.

La Figura 6 presenta la variación del flujo molar del producto etilbenceno (eje vertical) con el exceso de benceno en el reactor de alquilación. El eje horizontal de la figura representa el exceso de benceno en el reactor de alquilación. Las temperaturas de los reactores fueron fijadas en 434 y 432 K respectivamente. La Figura 6 exhibe un comportamiento lineal positivo entre la producción de etilbenceno y el exceso en el primer reactor. La máxima producción de etilbenceno se presenta para un valor de 2.56 en la relación de exceso benceno/etileno. Asimismo, de la Figura 6 se tienen

tres tendencias lineales, la primera con una pendiente más elevada que va desde un valor de exceso de benceno de 2.39 a 2.53, mientras que la segunda tendencia lineal se presenta para valores de exceso de benceno entre 2.53 y 2.56. Después de 2.56, la conversión se mantiene en su punto máximo. El aumento en la producción de etilbenceno se debe a que con el reactivo en exceso (benceno) tiene más probabilidad de interactuar con el reactivo límite (Etileno), se aumenta la probabilidad de ocurrencia de la primera reacción (R1), reduciendo la probabilidad de ocurrencia de la segunda reacción (R2) de consumo de etilbenceno. Asimismo, el aumento en el reactivo en exceso promueve la tercera reacción (R3), que permite la obtención del producto principal a partir del subproducto. La primera tendencia en la Figura 6 se explica por las condiciones cinéticas relacionadas al aumento del exceso de benceno. Un aumento posterior del exceso de benceno en el primer reactor disminuye la recirculación de etilbenceno en el destilado de la primera torre de destilación. Por lo tanto, todo el etilbenceno producido sale por la segunda torre en el destilado (producto), ocasionando el cambio de pendiente observado en la segunda línea de tendencia. Las dos tendencias iniciales pueden ser representadas con las siguientes ecuaciones, obtenidas por medio del método de mínimos cuadrados en el software Microsoft Excel:

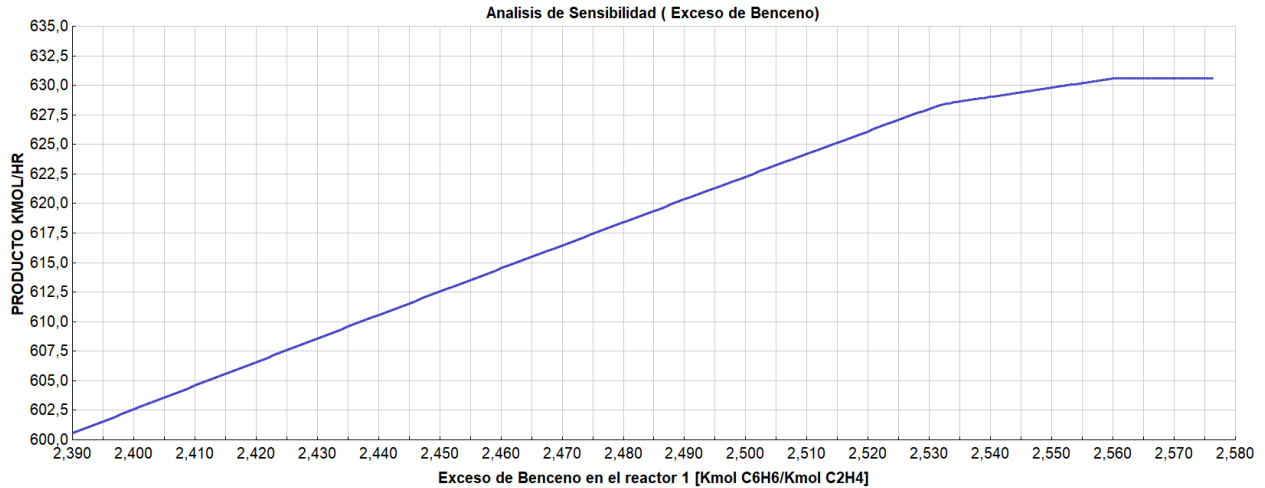
$$2.39 \leq \frac{\text{Benceno}}{\text{Etileno}} < 2.532 \quad \text{Producto} = 195.786 * \text{Exceso} + 132.792 \left[\frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \right] \quad [\text{Ec. 3}]$$

$$2.532 \leq \frac{\text{Benceno}}{\text{Etileno}} < 2.56 \quad \text{Producto} = 77.892 * \text{Exceso} + 431.181 \left[\frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \right] \quad [\text{Ec. 4}]$$

$$2.56 \leq \frac{\text{Benceno}}{\text{Etileno}} < \infty \quad \text{Producto} = 630.6 \left[\frac{\text{Kmol}}{\text{h}} \right] \quad [\text{Ec. 5}]$$

Figura 6

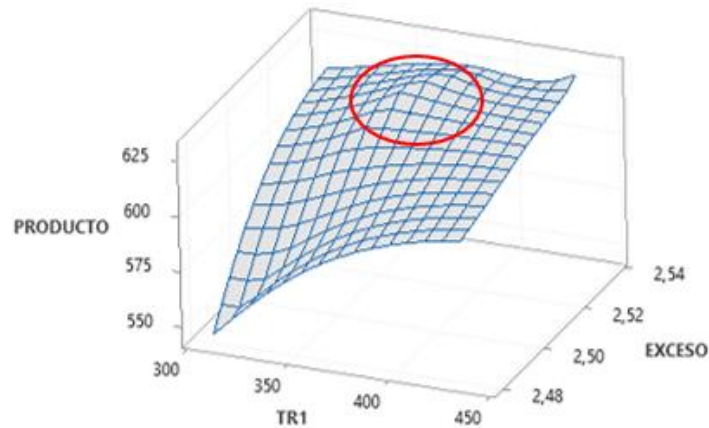
Flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación empleando Aspen Plus



La Figura 7 presenta la variación del flujo molar del producto etilbenceno (eje Z) con el exceso de benceno en el reactor de alquilación (eje X), a diferentes temperaturas del reactor 1 (eje Y). La temperatura del reactor 2 fue fijada en 432 K. La Figura 7 describe una gráfica 3D ascendente con respecto al eje X y Y, donde se observa en el exceso de benceno *ca.* 2.52 el máximo valor de flujo molar de producto (629.05 kmol/h) a una temperatura de 375 K, lo cual coincide con el máximo flujo molar de producto reportado en la Figura 2 a las mismas condiciones y en el mismo punto de temperatura de reactor 1 (TR1) y coincide en el punto *ca.* 2.52 de la Figura 6 donde el etilbenceno se deja de recircular por el destilado de la primera torre.

Figura 7

Flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación y la temperatura del primer reactor (TR1) empleando el software Minitab V19



4.4.5 Análisis de varianza.

La Figura 8 presenta el análisis de varianza del producto principal contra los factores más relevantes que afectan el proceso, los datos fueron evaluados con un nivel de confianza del 95% ($\alpha=0.05$); cualquier valor de probabilidad (valor P) menor que alfa será estadísticamente significativo en un modelo estadístico explicativo. Según la Figura 8, la interacción Exceso*TR1 presenta un valor P muy alto (0.838) por lo cual no representa una variable determinante; La Figura L 1 del Anexo L representa por medio de un diagrama de Pareto lo mencionado anteriormente.

La ecuación de predicción del producto fue obtenida en términos de las temperaturas de los reactores y el exceso de benceno en el reactor de alquilación (Ec. 6) y modificada según los resultados del análisis de varianza (Ec. 7). La Ec. 6 se comprobó en una hoja Excel con los datos dados en el Aspen *Sensitivity*, obteniendo un error relativo promedio de 2.26%. En la Ec. 6, TR1 es la temperatura del primer reactor en kelvin [K], TR2 la temperatura del segundo reactor en kelvin [K] y EXCESO, el exceso molar de benceno en el primer reactor en [kmol C₆H₆/kmol C₂H₄].

Figura 8

Análisis de varianza del flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor empleando el software Minitab

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	305054	43579,2	316,97	0,000
Lineal	3	77189	25729,6	187,14	0,000
TR1	1	45949	45949,5	334,21	0,000
TR2	1	44124	44123,6	320,93	0,000
EXCESO	1	41442	41442,4	301,43	0,000
Interacciones de 2 términos	3	17771	5923,6	43,09	0,000
TR1*TR2	1	11927	11927,1	86,75	0,000
TR1*EXCESO	1	6	5,7	0,04	0,838
TR2*EXCESO	1	4252	4251,9	30,93	0,000
Interacciones de 3 términos	1	1177	1176,6	8,56	0,004
TR1*TR2*EXCESO	1	1177	1176,6	8,56	0,004
Error	993	136523	137,5		
Total	1000	441577			

Flujo molar de producto (Etilbenceno) (Ecuación original)

$$-32838 + 75,1 \text{ TR1} + 75,2 \text{ TR2} + 11759 \text{ EXCESO} - 0,1697 \text{ TR1*TR2} - 26,37*\text{TR1*EXCESO} - 26,51 \text{ TR2*EXCESO} + 0,0599 \text{ TR1*TR2*EXCESO} \text{ [kmol/h]} \quad \text{[EC.6]}$$

Flujo molar de producto (Etilbenceno) (Ecuación modificada)

$$-32838 + 75,1 \text{ TR1} + 75,2 \text{ TR2} + 11759 \text{ EXCESO} - 0,1697 \text{ TR1*TR2} - 26,51 \text{ TR2*EXCESO} + 0,0599 \text{ TR1*TR2*EXCESO} \text{ [kmol/h]} \quad \text{[EC.7]}$$

4.5. Comparación con la Literatura

Según el autor (Valdivia Laiche, 2019) el aumento de la presión en los reactores no tiene efecto en la conversión del sistema. Este resultado coincide con lo obtenido en el presente trabajo (Figura 4). Por su parte, (Alpuche Manrique, 2009) determinó como variables altamente sensibles del proceso, el flujo molar de entrada de benceno y la temperatura del reactor de alquilación. Este

resultado coincide con lo obtenido en la prueba ANOVA del presente documento, realizada a partir de los resultados reportados por la simulación desarrollada.

Asimismo, los resultados del presente documento corresponden con lo mencionado por Luyben (2010). Según Luyben, una conversión del 99% en el reactor 1 requiere una temperatura próxima a 430 K, lo cual coincide con lo presentado en la Figura H 1 del presente documento. Adicionalmente, los resultados del presente documento amplían la panorámica de operación de la producción de etilbenceno, ya que como se mencionó anteriormente, con temperaturas entre 327 y 365 K en el primer reactor se puede obtener una selectividad de 1, con una conversión global del 100%. También, la Figura 7 soporta que a baja temperatura del reactor 1, un aumento en el exceso puede conducir a conversión total a etilbenceno.

Por último, considerando los resultados obtenidos en el presente documento, los rangos operacionales sugeridos para el proceso de producción de etilbenceno, con la configuración de Luyben, corresponden a: temperatura del primer reactor entre 327 y 365 K, temperatura del segundo reactor entre 433.15 y 450 K, presión de operación entre 2 a 20 atm en los reactores, exceso de benceno en el primer reactor entre 2.39 y 2.56, relación de reflujo entre 0.774 y 0.811 para la primera columna y 0.432 y 0.661 para la segunda .

5.Conclusiones

El proceso reporta datos similares independientemente del paquete termodinámico empleado, además de que el paquete cinético que reporto menores errores en base a la literatura es el presentado por el autor William Luyben (2011) con catalizador de Zeolita

Según los resultados de la simulación, la máxima producción de etilbenceno con la configuración de Luyben puede ser generada considerando tanto el aumento en las temperaturas de los reactores, como el aumento en el exceso benceno/etileno del reactor de alquilación.

Los resultados obtenidos con el diseño computacional factorial sugieren que los rangos de temperatura con mayor producción de etilbenceno corresponden entre 327 y 365 K para el primer reactor y entre 433.15 y 450 K para el segundo reactor .

Los resultados obtenidos con la simulación desarrollada sugieren que el aumento en la presión de operación de los reactores, por encima de 2 atm, no influye significativamente en la producción de etilbenceno. La presión debe ser fijada a un valor por encima de 2 atm para la consecución de la máxima producción de benceno.

Las tendencias obtenidas con el presente trabajo para la variación de la producción de etilbenceno con la presión y la temperatura concordaron con diferentes reportes de literatura

6. Recomendaciones

Analizar el efecto de la relación de reflujo en un intervalo operacional más amplio al encontrado en la literatura.

Evaluar el efecto de la variación de la corriente de etileno en el proceso.

Reproducir este trabajo para hallar las tendencias y ecuaciones de regresión en reactor PFR.

Referencias Bibliográficas

Agencia para sustancias tóxicas y el registro de enfermedades. *ToxFAQs™ - Etilbenceno (Ethylbenzene)*. ATSDR. https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es_tfacts110.html

Alpuche Manrique, M. (2009). *Análisis de estructuras de control para minimizar el efecto “snowball” en un sistema con reciclós* http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lpro/alpuche_m_m/resumen.html#

Cunill García, F., Iborra Urios, M. & Tejero Salvador, X. (2010). *Apuntes de reactores químicos*. Retrieved from <http://hdl.handle.net/2445/12703>

Del Pino Gutiérrez, R. (2019). *Diseño preliminar de una planta de producción de 120.000 t/año de etilbenceno*

Elgabry, A., Mansi, A., Nabil, A., Ali, B., & Karim, A. (2019). *Production of ethylbenzene by liquid alkylation of benzene using zeolite catalyst*

Gerhartz, W. (1985). *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (5., completely rev. ed. ed.). VCH-Verl.-Ges.

Gorak, A., & Olujić, Z. (2014). *Distillation*. Elsevier Science & Technology.

Hamid, G., Jafar S. Ahari, Amir, F., & Majid, K. (2004). Modelling and Simulation Of Benzene Alkylation Process Reactors For Production Of Ethylbenzene. *Petroleum & Coal*, 46, 55-63. https://www.researchgate.net/publication/265011411_Modelling_and_Simulation_Of_Benzene_Alkylation_Process_Reactors_For_Production_Of_Ethylbenzene

- Hernández López, A., & Macías Becerra, M. S. (2014). *Diseño de manual de seguridad e higiene industrial para una planta productora de etilbenceno*. Retrieved from <http://tesis.ipn.mx:8080/xmlui/handle/123456789/17109>
- Jagtap, R., Pathak, A. S., & Kaistha, N. (2013). Economic plantwide control of the ethyl benzene process. *AIChE Journal*, 59(6), 1996-2014. 10.1002/aic.13964
- Luyben, W. L. (2011). Design and control of the ethyl benzene process. *AIChE Journal*, 57(3), 655-670. 10.1002/aic.12289
- Monsalve Sánchez, D. C. (2019). *Simulación y estudio económico del proceso del Etilbenceno* https://www.openaire.eu/search/publication?articleId=od_935::33fafab6a9e654015f02417b69b68adc
- Montgomery, D. C. (2004). *Design and analysis of experiments* (second edition ed.). Wiley.
- Ng, Q. H., Sharma, S., & Rangaiah, G. P. (2016). Design and analysis of an ethyl benzene production process using conventional distillation columns and dividing-wall column for multiple objectives. *Chemical Engineering Research and Design*, 118, 142-157. 10.1016/j.cherd.2016.10.046
- Orozco de la Pava, Andrés Felipe. (2018). *Desarrollo De Una Propuesta De Mejora Para La Velocidad De Destilación Al Vacío De Glicerol Formal Utilizando Una Columna Empacada* <https://repository.uamerica.edu.co/bitstream/20.500.11839/6953/1/6122850-2018-2-IQ.pdf>

Tolosa, M. P., Rios, C. F., Leon, J. A., & Perez, A. D. (2012). Producción De

Etilbenceno. *Quimiart*, , 1-32. <https://quimiart.wordpress.com/2012/03/17/produccion-de-etilbenceno/>

Valdivia Laiche, M. J. (2019). *Simulación del efecto de la presión en la síntesis y purificación de etilbenceno de alta pureza usando software libre*

Anexos

Apéndice A. Recopilación bibliográfica de los catalizadores empleados en la producción de etilbenceno

Tabla A 1

Recopilación de catalizadores para la producción de etilbenceno

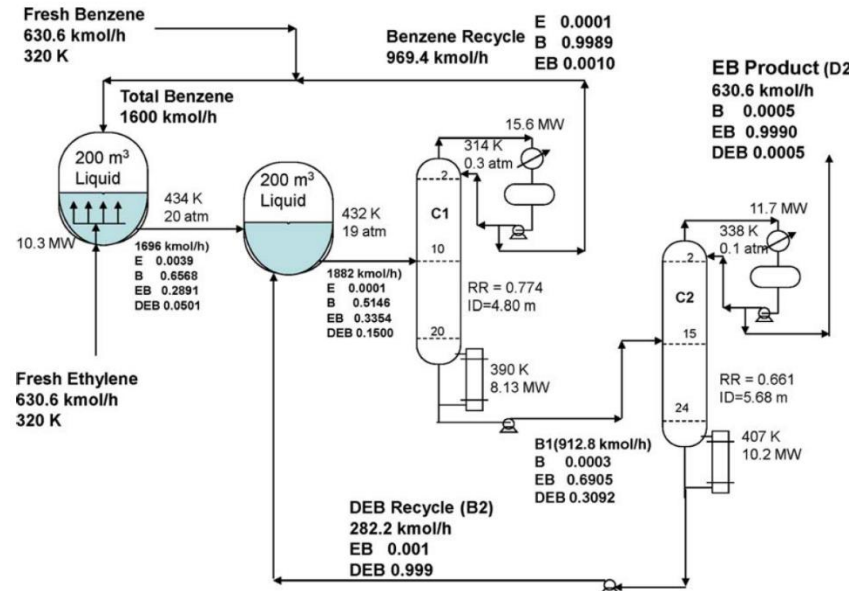
Artículo	Autores	Tipo de catalizador	Fase de catálisis	Tipo de reactor	Fase del catalizador
Mechanism of Some Conversions over ZSM-5 Catalyst	J. R. Anderson, t. Mole, ant) v. Christov	ZSM-5	No especifica	No especifica	No especifica
Benzene Alkylation with Ethylene and Propylene over H-mordenite as Catalyst	K. A. Becker, h. G. Karge, and w.-d. Streubel	H-mordenite	Fase homogénea	Reactor tubular o flujo pistón	No especifica
Selective zeolite catalyst for alkylation of benzene with ethylene to produce ethylbenzene	Mohammed C. Al-Kinany et al	BXE ALKCAT con 30% ZSM-5	No especifica	Reactor de flujo descendente de lecho fijo	No especifica
Kinetics for benzene ethylene reaction in near-critical regions	Yi feng shi et al	No especifica	Se hacen estudios en varias fases	Reactor tubular	No especifica
Modelling and Simulation of Benzene Alkylation Process reactors For Production Of Ethylbenzene	Ganji et al	Cloruro de aluminio	No especifica	Reactor tubular axial	No especifica
The Mechanism and Kinetics for the Alkylation of Benzene with Ethylene	You et al	ZSM-5 Cl/FeCl ₃ ionic liquid catalyst	Vapor- liquido	Reactor tubular	No especifica

Diseño preliminar de una planta de producción de 120.000 t/año de etilbenceno	Rubén Del Pino Gutiérrez, Marcos Javier Valdivia	AICl ₃ (ácidos de Lewis)	Fase líquida	No especificado	Homogénea (dos fases líquidas)
		AICl ₃ (ácidos de Lewis)			Homogénea (una fase líquida)
		Proceso Alkar (BF ₃)			Homogénea

Apéndice B Recopilación bibliográfica de los diagramas de flujo de proceso (PFD)

Figura B 1

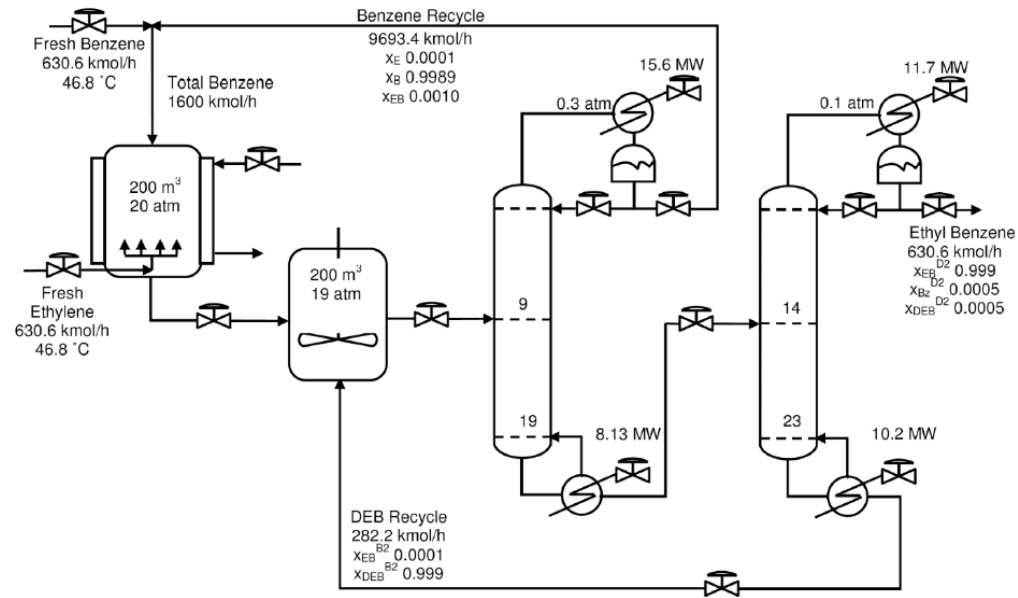
Diagrama de flujo de proceso de William L. Luyben



Nota. Adaptado de (Luyben, 2011)

Figura B 2

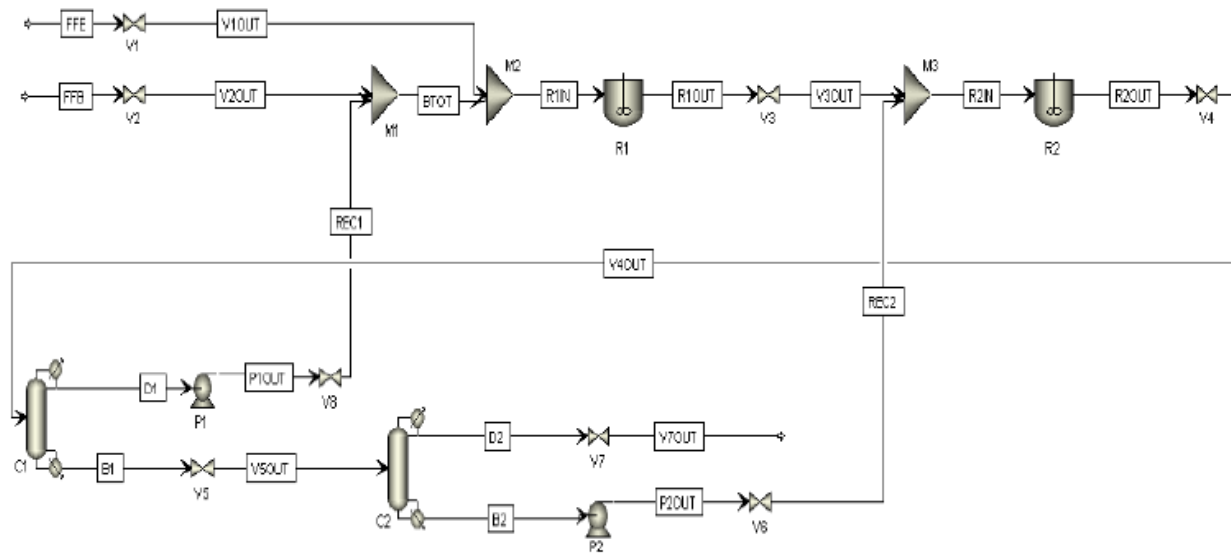
Diagrama de flujo de proceso de Rahul Jagtap



Nota. Adaptado de (Jagtap, Pathak, & Kaistha, 2013)

Figura B 3

Diagrama de flujo de proceso de Mariana Alpuche



Nota. Adaptado de (Alpuche Manrique, 2009)

Figura B 4

Diagrama de flujo de proceso Marcos Javier Valdivia

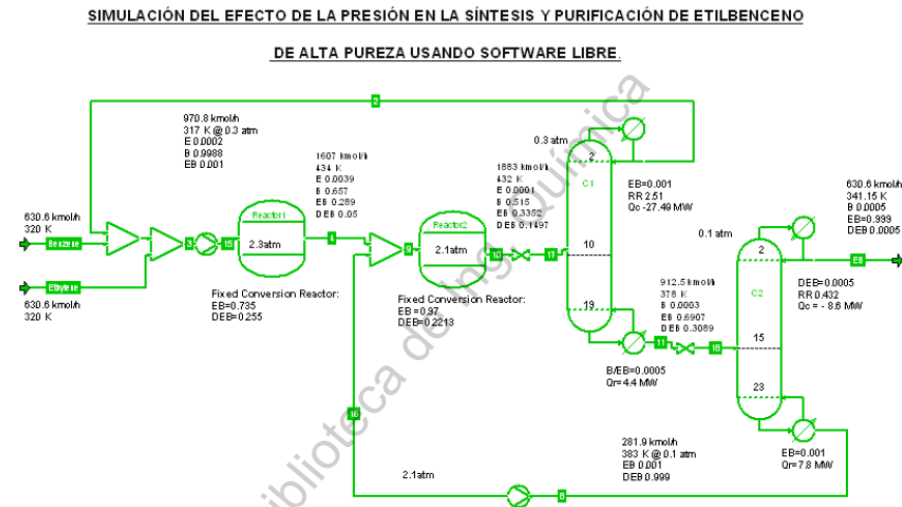
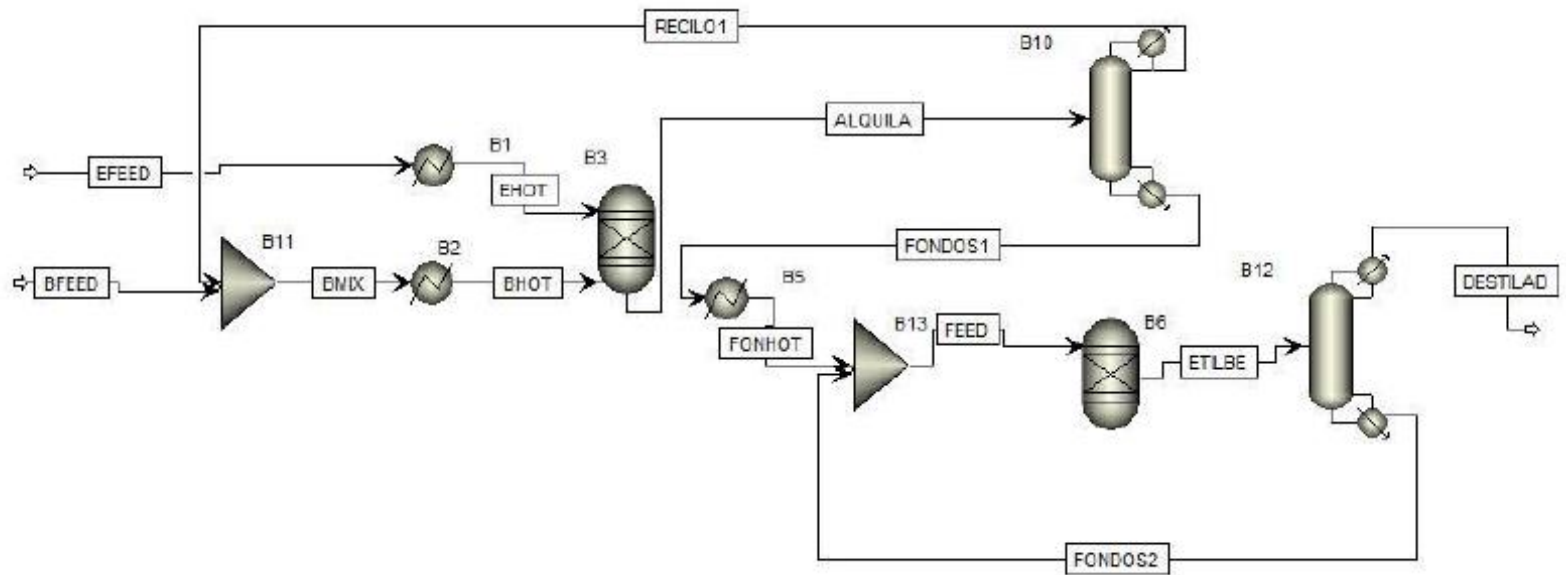


Figura A-1. Flowsheet general de la Simulación

Nota. Adaptado de (Valdivia Laiche, 2019)

Figura B 5

Diagrama de flujo de proceso María Paula et al



Nota. Adaptado de (Tolosa et al., 2012)

Figura B 6

Diagrama de flujo de proceso de Ruben del Pino

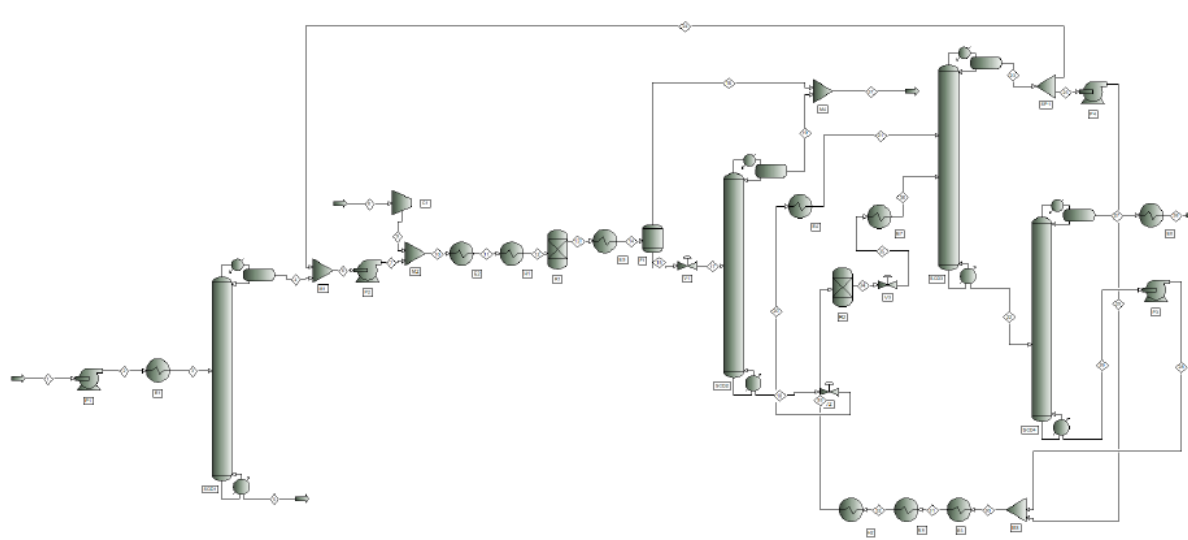
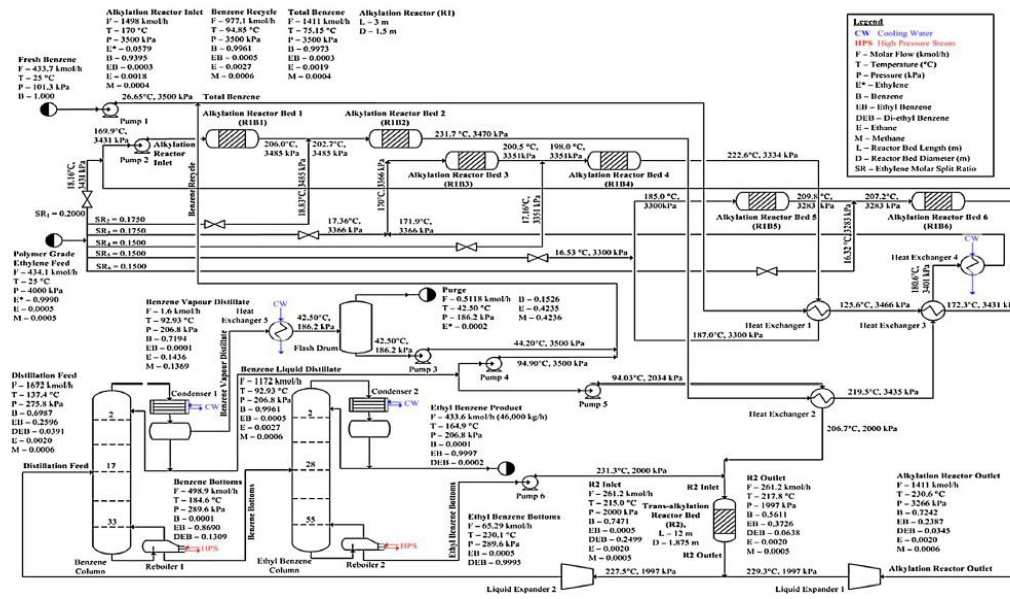


Figura 16: diagrama de simulación.

Nota. Adaptado de (Del Pino Gutiérrez, 2019)

Figura B 8

Diagrama de flujo de proceso de Qi Han Ng con dos columnas de destilación



Nota. Adaptado de (Ng, Sharma, & Rangaiah, 2016)

Figura B 9

Diagrama de flujo de proceso de Qi Han Ng con una torre de destilación de pared dividida

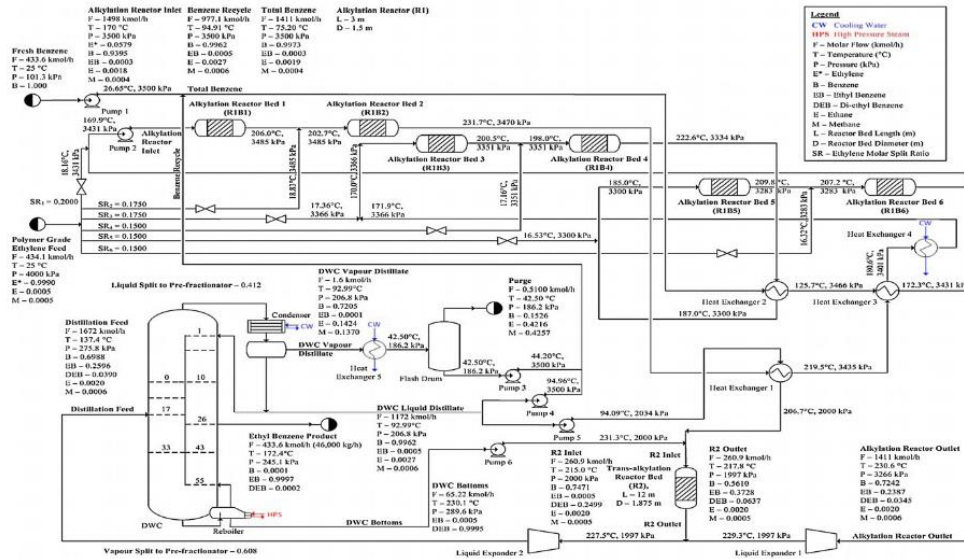
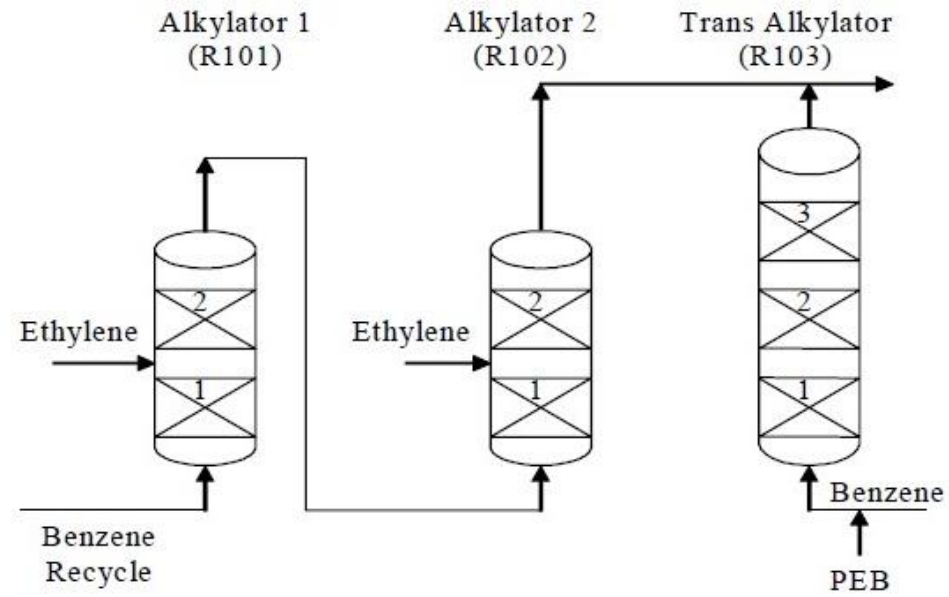


Fig. 3 – Process flow diagram of EB production with liquid-phase zeolite-based reactions and DWC separation; stream data (i.e., flow rate, temperature, pressure and component mole fraction) and equipment specifications correspond to the average solution in Table 5.

Nota. Adaptado de (Ng et al., 2016)

Figura B 10

Diagrama de flujo de proceso de Ganji et al



Nota. Adaptado de (Hamid et al., 2004)

Apéndice C. Recopilación bibliográfica de las variables operacionales a la entrada y salida de los reactores

Tabla C 1

Recopilación variables operacionales en los reactores de alquilación

Nombre	Tipo de reactores	Numero de reactores (alquilación)	Condiciones de operación, entrada reactores de alquilación								Condiciones de operación, salida reactores de alquilación							
			Variables termodinámicas				Fracciones molares				Variables termodinámicas				Fracciones molares			
			Presión [atm]	Temperatura [K]	Exceso	Flujo molar [Kmol/h]	Benceno	Etileno	Etilbenceno	Dietilbenceno	Presión [atm]	Temperatura [K]	Flujo molar [Kmol/h]	Benceno	Etileno	Etilbenceno	Dietilbenceno	
Valdivia	Conversion fija	1	2,3	310,97	2,537	2232,03	0,7170	0,2826	0,0004	0,0000	2,3	434	1607,55	0,6570	0,0039	0,2890	0,0500	
Luyben	CSTR	1	20	320	2,532	2230,6	0,7168	0,2831	0,0004	0,0000	20	434	1696	0,6668	0,0039	0,2891	0,0501	
Jagtap	CSTR	1	Exactamente igual a Luyben, trabajo en el sistema de control sin tomar prioridad al sistema de reactores															
Qi Han Ng	PFR	6	34,542	443,15	16,226	1498	0,9395	0,0579	0,0003	0,0000	32,2329	503,31	1411	0,7242	0	0,2387	0,0345	
Carlyle Wight	No especifica	1	10,20-136,1	422,04-755,37	2-20													
Monsalve Tolosa	PFR	3	19,59	487,63	8,03	259,000	0,869	0,108	0,0002	0,0000	18,949	720,06	239,22	0,5778	0,0056	0,3674	0,0041	
Ruben del Pino Hernandez	No especifica	1	19,74	673,15	5,03	950,21	0,714	0,142	0	0	19,74	769,15	816	0,6945	0,00167	0,1098	0,027	
Alpuche	CSTR	1	9,12	360,05	2,421	2161,1	0,7070	0,2920	0,0010	0,0000	9,12	433,15	1539,048	0,588	0,006	0,406	0	
Ganji	Reactor de flujo axial	2	37,503	485,664	12,188	894,471	0,924	0,0758	0,0000	0,0000	35,76	530,074	866,915	0,785	0,071	0,135	0,009	

Tabla C 2

Volúmenes de los reactores de alquilación

Nombre	Volumen [m ³]					
	1	2	3	4	5	6
Valdivia	No se reporta	--	--	--	--	--
Luyben	200	--	--	--	--	--
Jagtap	200	--	--	--	--	--
Qi Han Ng	5,30144	5,30144	5,30144	5,30144	5,30144	5,30144
Carlyle Wight	No se reporta	--	--	--	--	--
Monsalve	20	25	30			
Tolosa						
Ruben del Pino	1,2					
Hernandez						
Alpuche	200					
Ganji	10,273	10,273				

Tabla C 3*Recopilación variables operacionales en los reactores de transalquilación*

Nombre	Tipo de reactores	Numero de reactores (trans-alkilación)	Condiciones de operación, entrada reactores de Trans-alkilación								Condiciones de operación, salida reactores de Trans-alkilación							
			Variables termodinámicas				Fracciones molares				Variables termodinámicas				Fracciones molares			
			Presión [atm]	Temperatura [K]	Exceso	Flujo molar [Kmol/h]	Benceno	Etileno	Etilbenceno	Dietilbenceno	Presión [atm]	Temperatura [K]	Flujo molar [Kmol/h]	Benceno	Etileno	Etilbenceno	Dietilbenceno	
Valdivia	Conversion fija	1	2,1	431,41	2,918	1889,4	0,5590	0,0033	0,2460	0,1916	1,1	432	1883,29	0,5150	0,0001	0,3352	0,1497	
Luyben	CSTR	1	20	434	3,082	1978,2	0,5717	0,0033	0,2480	0,1855	19	432	1882	0,5146	0,0001	0,3354	0,15	
Jagtap	CSTR	1	Exactamente igual a Luyben, trabajo en el sistema de control sin tomar prioridad al sistema de reactores															
Qi Han Ng	PFR	1	19,7385	488,15	2,990	260,9	0,7471	0	0,0005	0,2499	19,709	490,95	260,9	0,561	0	0,3728	0,0637	
Carlyle Wight	No especifica	1	10,20-136,1	450-755,37	2-20													
Monsalve	PFR	1	19,738	773,15	56,859	57,23	0,9666	0,001	0,002	0,017	19,5904	773,86	57,18	0,9496	0	0,0369	0,0001	
Tolosa	No hay informacion																	
Ruben del Pino	No especifica	1	14,8	773,15	1,000	62,47	0,5	0	0	0,5	14,8	772,15	62,47	0,143	0	0,714	0,143	
Hernandez	No hay informacion																	
Alpuche	CSTR	1	7,09	436,35	137,805	1604,048	0,565	0,005	0,389	0,0041	7,09	440,05	1595,5	0,562	0	0,397	0,041	
Ganji	Reactor de flujo axial	1	37,5031	490,606	39,161	511,670	0,9487	0,0243	0,0028	0,0242	34,263	No especifica	511,34	0,94	0,02	0,03	0,01	

Tabla C 4*Volúmenes de los reactores de transalquilación*

Nombre	Volumen [m ³]
	1
Valdivia	No se reporta
Luyben	200
Jagtap	200
Qi Han Ng	33,134
Carlyle Wight	No se reporta
Monsalve	1,67
Tolosa	
Ruben del Pino	
Hernandez	
Alpuche	200
Ganji	32,0914

Apéndice D. Recopilación bibliográfica de las variables operacionales de las columnas de destilación

Tabla D 1

Variables operacionales para las columnas de Marcos Valdivia, William Luyben y Qi Han Ng

Nombre	Presión (atm)	Componentes	Flujo molar de entrada	Componente ligero	Componente Pesado	Flujo molar Destilado líquido [Kmol/h]	Flujo molar Destilado vapor [Kmol/h]	Flujo molar Fondos [Kmol/h]	Numero de etapas	Etapa de alimentación	Tipo de condensador	Reflujo de condensador	Tipo de rehervidor	Reflujo Rehervidor	Flujo molar salida lateral
Valdivia															
Torre de destilación 1	0,3	Benceno	969,987	x		969,670		0,315	20	10	Total	0,8109	Parcial	0,7917	
		Etileno	0,189	x		0,189		0,000							
		Etilbenceno	631,224		x	0,971		630,254							
		Dietilbenceno	281,887		x	0,000		281,891							
Torre de destilación 2	0,1	Benceno	0,315	x		0,315		0,000	24	15	Total	0,4318	Parcial	2,4262	
		Etilbenceno	630,254	x		629,969		0,282							
		Dietilbenceno	281,891		x	0,315		281,574							
Luyben															
Torre de destilación 1	0,3	Benceno	968,477	x		968,334		0,274	21	10	Total	0,774	Parcial		
		Etileno	0,188	x		0,097		0,000							
		Etilbenceno	631,223		x	0,969		630,288							
		Dietilbenceno	282,300		x	0,000		282,238							
Torre de destilación 2	0,1	Benceno	0,274	x		0,316		0,000	25	15	Total	0,661	Parcial		
		Etilbenceno	630,288	x		629,969		0,282							
		Dietilbenceno	282,238		x	0,316		281,918							
Qi Han Ng															
Torre de destilación 1	Alimento 2,722 atm	Benceno	1168,226	x		1167,430	1,151	0,050	34	17	Parcial				
	Destilado 2,041 atm	Etilbenceno	434,051		x	0,586	0,000	433,544							
	Fondos 2,858 atm	Dietilbenceno	65,375		x	0,000	0,000	69,306							
		metano	1,003	x		0,703	0,219	0,000							
		etano	3,344	x		3,164	0,230	0,000							
Torre de destilación 2	Alimento 2,858 atm	Benceno	0,050	x		0,043		0,000	56	28	Total		Parcial		
	Destilado 2,041atm	Etilbenceno	433,544	x		433,470		0,033							
	Fondo 2,858 atm	Dietilbenceno	69,306		x	0,087		65,257							
Torre de columna dividida	Alimento 2,722 atm	Benceno	1168,394	x		1,153	1167,550	0,000	56	17	Parcial	0,375	Parcial		0,043
	Destilado 2,041 atm	Etilbenceno	434,051		x	0,000	0,586	0,033							433,470
	Destilado 2,041 atm	Dietilbenceno	65,208		x	0,000	0,000	65,187							0,087
	Fondo 2,858atm	metano	1,003	x		0,219	0,703	0,000							0,000
		etano	3,344	x		0,228	3,164	0,000							0,000

Tabla D 2

Variables operacionales para las columnas de Deliana Monsalve, Ruben del Pino y Mariana Alpuche

Nombre	Presion (atm)	Componentes	Flujo molar de entrada	Componente ligero	Componente Pesado	Flujo molar Destilado líquido [Kmol/h]	Flujo molar Destilado vapor [Kmol/h]	Flujo molar Fondos [Kmol/h]	Numero de etapas	Etapa de alimentación	Tipo de condensador	Reflujo de condensador	Tipo de rehevior	Reflujo Rehevior	
Monsalve															
Torre de destilación 1	Destilado	Benceno	183,550	x		183,359		0,181	20	13	Total	0,338	Parcial		
	1,086 atm	Etileno	0,194	x		0,186		0,000							
	Alimentación	Etilbenceno	89,451		x	0,093		89,351							
	1,228 atm	Diethylbenceno	0,968		x	0,000		0,978							
	Fondo	Propeno	1,217	x		1,229		0,000							
	1,303 atm	Etano	1,300	x		1,322		0,000							
Torre de destilación 2	Destilado 1,086 atm	Benceno	0,181	x		0,188		0,000	34	25	Total	5,854	Parcial		
	Fondo 1,382	Etilbenceno	89,351	x		89,262		0,089							
		Diethylbenceno	0,978		x	0,000		0,971							
Ruben del Pino															
Torre de destilación 1	1,1 atm	Benceno	134,390	x		134,380		0,010	60		Total				
		Tolueno	1,140		x	0,000	1,140								
Torre de destilación 2	10 atm	Benceno	566,490		x	0,750		565,750	12		Parcial				
		Etileno	1,180	x		1,180	0,000								
		Etilbenceno	89,590		x	0,000	89,590								
		Diethylbenceno	22,400		x	0,000	22,400								
		Metano	34,060	x		34,060	0,000								
		Etano	73,780	x		73,760	0,020								
Torre de destilación 3	1,1 atm	Benceno	565,750	x		574,640		0,030	34		Total				
		Etilbenceno	89,590		x	0,090	134,120								
		Diethylbenceno	22,400		x	0,000	31,320								
		Etano	0,020	x		0,030	0,000								
Torre de destilación 4	1,1 atm	Benceno	0,030	x		0,030		0,000	53		Total				
		Etilbenceno	134,120	x		134,120	0,000								
		Diethylbenceno	31,320		x	0,090	31,230								
Alpuche															
Torre de destilación 1	Destilado 4,441 atm	Benceno	897,070	x		896,943		0,127	26	15	Total	1,2	Parcial		
	Alimentación 4,544 atm	Etileno	0,101	x		0,101		0,000							
	Fondos 4,638 atm	Etilbenceno	633,104		x	2,955		630,148							
		Diethylbenceno	65,225		x	0,000		65,225							
Torre de destilación 2	destilado 1,974 atm	Benceno	0,127	x		0,127		0,000	32	17	Total	0,8	Parcial		
	Alimentación 2,075 atm	Etileno	0,000	x		0,000		0,000							
	Fondos 2,171 atm	Etilbenceno	630,148		x	630,146		0,002							
		Diethylbenceno	65,225		x	0,227		64,998							

Apéndice E Codificación del paquete termodinámico y el sistema reactante en Aspen Plus**Figura E 1**

Ingreso de los componentes químicos

Select components

Component ID	Type	Component name	Alias
C6H6	Conventional	BENZENE	C6H6
C8H10	Conventional	ETHYLBENZENE	C8H10-4
C10H14	Conventional	1,4-DIETHYLBENZENE	C10H14-8
C2H4	Conventional	ETHYLENE	C2H4

Find Elec Wizard SFE Assistant User Defined Reorder Review

Figura E 2

Selección del paquete termodinámico

Property methods & options

Method filter: ALL

Base method: CHAO-SEA

Henry components: -

Method name: CHAO-SEA

Methods Assistant...

Modify

Figura E 3*Codificación de las reacciones químicas*

New Edit Copy Paste				
	Rxn No.	Reaction type	Stoichiometry	Delete
▶	1	Kinetic	C6H6 + C2H4 --> C8H10(MIXED)	✗
▶	2	Kinetic	C8H10 + C2H4 --> C10H14(MIXED)	✗
▶	3	Kinetic	C10H14 + C6H6 --> 2 C8H10(MIXED)	✗

Figura E 4*Compilación de las constantes cinéticas de las reacciones de William Luyben*

Main Flowsheet x REACTOR1 (RCSTR) x Results Summary - Run Status x R-1 (POWERLAW) x +

Stoichiometry
 Kinetic
Equilibrium
Activity
Comments

1) C6H6 + C2H4 --> C8H10(MIXED)

Reacting phase: *Liquid* Rate basis: *Reac (vol)*

Power Law kinetic expression

If To is specified Kinetic factor = $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)(1/T-1/T_o)}$

If To is not specified Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$

k
n
E *cal/mol*
To
[Ci] basis *Molarity*

Edit Reactions

Solids

Figura E 5

Compilación de las reacciones químicas para la cinética de Ganji et al

No.	Name	Reaction class	Active	Reversible	Stoichiometry	Delete
1	ETILBEN	CUSTOM	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	C6H6 + C2H4 --> C8H10(MIXED)	<input checked="" type="checkbox"/>
2	DIETIL	POWERLAW	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	C8H10 + C2H4 --> C10H14(MIXED)	<input checked="" type="checkbox"/>
3	ETILBEN2	CUSTOM	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	C10H14 + C6H6 --> 2 C8H10(MIXED)	<input checked="" type="checkbox"/>

Figura E 6

Compilación de las constantes cinéticas de las reacciones de Ganji et al

1) C6H6 + C2H4 --> C8H10(MIXED)

Reaction class: CUSTOM Rate Expression: $r = [\text{Kinetic factor}][\text{Driving force}][\text{Custom Term}]$

Kinetic factor
 If To is specified: Kinetic factor = $k(T/T_0)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_0]}$
 If To is not specified: Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$

k: 171100
 n: 0
 E: 63440 kJ/kmol
 To: K
 Custom Term: EC1
 Reaction rate units: kmol/cum-s

Driving Force
 Driving force = $\prod_i [C_i]^{\alpha_i}$

Reacting phase: Liquid
 [C] basis: Molarity
 [C] units: kmol/cum
 Rate basis: Reac (vol)

Power law exponents

Reactants	Exponent	Products	Exponent
C6H6		C8H10	
C2H4	1		

Figura E 7

Ingreso de las ecuaciones especiales de la cinética de Ganji et al

The screenshot shows a software interface with the following sections:

Define constants

Variable	Value	Delete
R	8,31447	X
UNO	1	X
A1	0,0152	X

Define variables

Variable	Variable Type	Component	Substream	Phase	Units	Delete
T	Temperature				K	X
CEB	Molarity	C8H10	MIXED	Liquid	kmol/cum	X
CR	Molarity	C6H6	MIXED	Liquid	kmol/cum	X

Define equations

Custom Term	Equation	Status	Delete
EC1	$UNO/(UNO-A1*CEB*\exp(-EA1/(R*T)))$	OK	X
EC2	$UNO/(UNO+A2*CB)$	OK	X

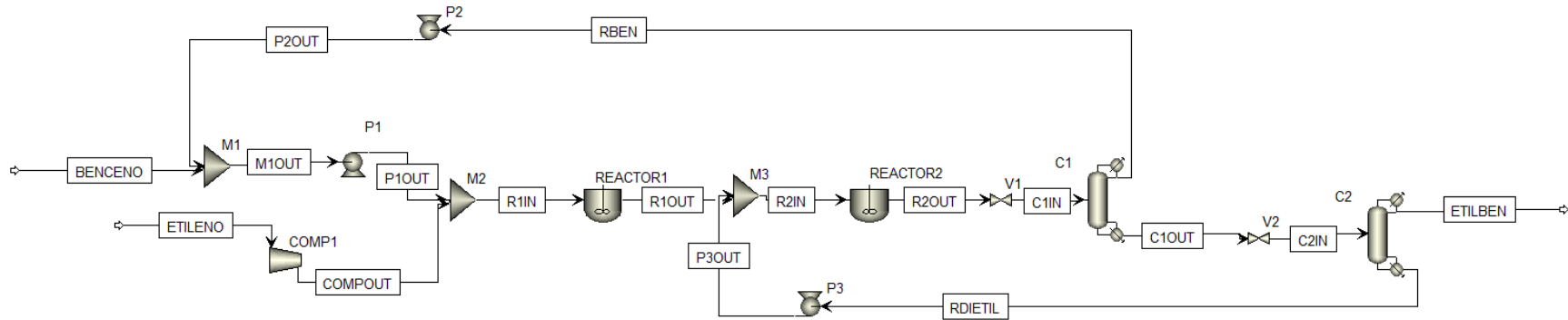
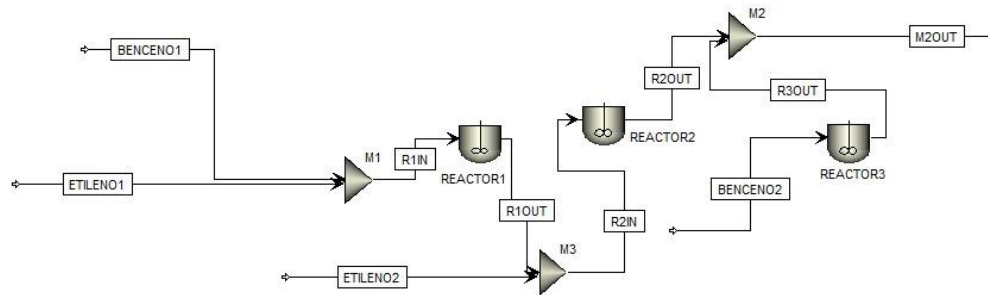
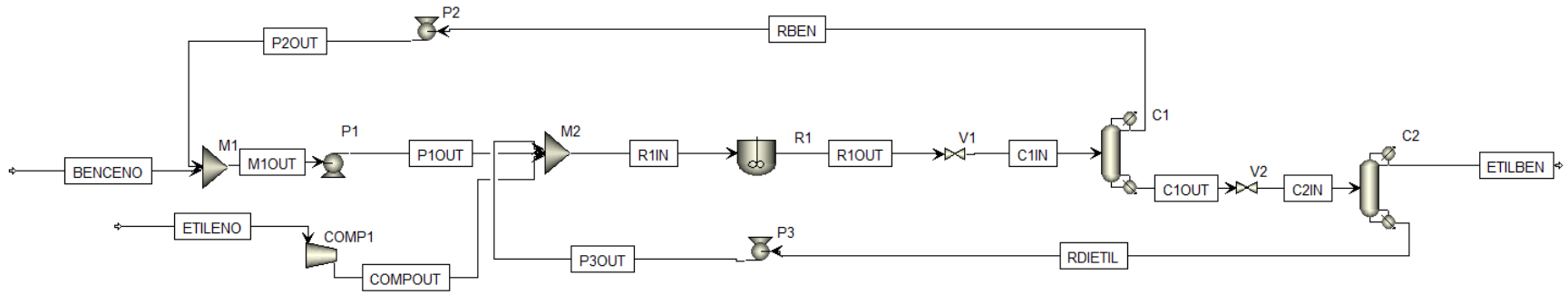
Apéndice F Diagramas de flujo de proceso (PFD) y tablas de corrientes en Aspen Plus**Figura F 1***Configuración de William Luyben en Aspen Plus***Figura F 2***Configuración de Ganji et al en Aspen Plus*

Figura F 3

Configuración de William Luyben con un solo reactor en Aspen Plus



Apéndice G. Errores Absolutos de la comparación de paquetes termodinámicos**Tabla G 1***Resultados obtenidos de la simulación de William Luyben en Aspen Plus cambiando el paquete termodinámico*

		R1OUT	R2OUT	RBEN	RDIETIL	ETILBEN
Artículo Luyben						
C6H6	kmol/h	1113,933	968,477	968,334	0,000	0,315
C8H10	kmol/h	490,314	631,223	0,969	0,282	629,969
C10H14	kmol/h	84,970	301,120	0,000	281,918	0,315
C2H4	kmol/h	6,614	0,188	0,097	0,000	0,000
Chao Seader						
C6H6	kmol/h	1055,187	969,602	968,587	0,000	1,015
C8H10	kmol/h	464,128	629,176	0,572	0,033	628,571
C10H14	kmol/h	80,445	283,184	0,000	282,169	1,015
C2H4	kmol/h	6,261	0,107	0,107	0,000	0,000
Peng Robinson						
C6H6	kmol/h	1055,410	969,814	968,859	0,000	0,953

C8H10	kmol/h	463,948	629,004	0,297	0,018	628,689
C10H14	kmol/h	80,398	283,140	0,000	282,185	0,954
C2H4	kmol/h	6,260	0,107	0,107	0,000	0,000
SRK						
C6H6	kmol/h	1055,776	970,060	968,979	0,000	1,076
C8H10	kmol/h	463,397	628,624	0,173	0,012	628,439
C10H14	kmol/h	80,579	283,269	0,000	282,189	1,079
C2H4	kmol/h	6,326	0,108	0,108	0,000	0,000
Lee Kesler Pockler						
C6H6	kmol/h	1055,130	969,544	968,518	0,000	1,027
C8H10	kmol/h	464,176	629,209	0,645	0,014	628,552
C10H14	kmol/h	80,457	283,218	0,000	282,193	1,023
C2H4	kmol/h	6,261	0,107	0,107	0,000	0,000

Tabla G 2

Errores absolutos de la simulación de William Luyben variando los paquetes termodinámicos

Componente	R1OUT	R2OUT	RBEN	RDIETIL	ETILBEN
Chao Seader					
C6H6	58,7462	1,1246	0,2536	0,0000	0,6999
C8H10	26,1860	2,0472	0,3975	0,2493	1,3984
C10H14	4,5247	17,9362	0,0000	0,2514	0,6997
C2H4	0,3533	0,0815	0,0098	0,0000	0,0000
Peng Robinson					
C6H6	58,523	1,337	0,525	0,000	0,638
C8H10	26,365	2,218	0,673	0,265	1,280
C10H14	4,572	17,980	0,000	0,267	0,639
C2H4	0,355	0,082	0,010	0,000	0,000
Soave Redlich Kwong					
C6H6	58,156	1,583	0,646	0,000	0,761
C8H10	26,916	2,599	0,797	0,270	1,530
C10H14	4,391	17,851	0,000	0,271	0,764
C2H4	0,288	0,080	0,011	0,000	0,000

Lee Kesler Pockler					
C6H6	58,803	1,066	0,184	0,000	0,711
C8H10	26,138	2,014	0,324	0,268	1,417
C10H14	4,512	17,902	0,000	0,275	0,707
C2H4	0,353	0,081	0,010	0,000	0,000

Tabla G 3

Resultados obtenidos de la simulación de Ganji et al en Aspen Plus cambiando el paquete termodinámico

		R1IN	R1OUT	R2IN	R2 OUT	R3IN(BENCENO2)	R3 OUT
Articulo Ganji (día 5)							
C6H6	Kg/h	64478,544	57702,048	0,000	53077,537	37861,569	37408,511
C8H10	Kg/h	0,000	6724,051	0,000	12439,834	152,087	1434,417
C10H14	Kg/h	0,000	319,940	0,000	1041,887	1660,946	846,882
C2H4	Kg/h	1899,056		1898,110			
Chao Seader							

C6H6	Kg/h	64478,544	59766,913	0,000	54594,725	38193,855	38047,870
C8H10	Kg/h	0,000	6320,021	0,000	13174,866	153,421	550,251
C10H14	Kg/h	0,000	105,876	0,000	326,973	1675,523	1424,679
C2H4	Kg/h	1899,056		1898,110			
Peng Robinson							
C6H6	Kg/h	64478,544	59766,913	0,000	54594,725	38193,855	38047,870
C8H10	Kg/h	0,000	6320,021	0,000	13174,866	153,421	550,251
C10H14	Kg/h	0,000	105,876	0,000	326,973	1675,523	1424,679
C2H4	Kg/h	1899,056		1898,110			
SRK							
C6H6	Kg/h	64478,544	59766,913	0,000	54594,725	38193,855	38057,007
C8H10	Kg/h	0,000	6320,021	0,000	13174,866	153,421	525,414
C10H14	Kg/h	0,000	105,876	0,000	326,973	1675,523	1440,379
C2H4	Kg/h	1899,056		1898,110			
Lee Kesler Pockler							
C6H6	Kg/h	64478,544	59781,009	0,000	54606,399	38193,855	38047,870

C8H10	Kg/h	0,000	6303,963	0,000	13167,536	153,421	550,251
C10H14	Kg/h	0,000	101,956	0,000	316,181	1675,523	1424,679
C2H4	Kg/h	1899,056		1898,110			

Tabla G 4

Errores absolutos de la simulación de Ganji et al variando los paquetes termodinámicos

Componente	R1IN	R1OUT	R2IN	R2 OUT	R3IN(BENCENO2)	R3 OUT
Chao Seader						
C6H6	0,000	2064,865	0,000	1517,188	332,287	639,359
C8H10	0,000	404,030	0,000	735,031	1,335	884,167
C10H14	0,000	214,064	0,000	714,914	14,577	577,797
Peng Robinson						
C6H6	0,000	2064,865	0,000	1517,188	332,287	639,359
C8H10	0,000	404,030	0,000	735,031	1,335	884,167
C10H14	0,000	214,064	0,000	714,914	14,577	577,797
Soave Redlich Kwong						

C6H6	0,000	2064,865	0,000	1517,188	332,287	648,496
C8H10	0,000	404,030	0,000	735,031	1,335	909,003
C10H14	0,000	214,064	0,000	714,914	14,577	593,497
Lee Kesler Pockler						
C6H6	0,000	2078,961	0,000	1528,862	332,287	639,359
C8H10	0,000	420,088	0,000	727,701	1,335	884,167
C10H14	0,000	217,984	0,000	725,707	14,577	577,797

Apéndice H. Gráficas de Aspen Sensitivity variando las temperaturas de los reactores

Figura H 1

Conversión en el reactor de alquilación contra las temperaturas de los reactores

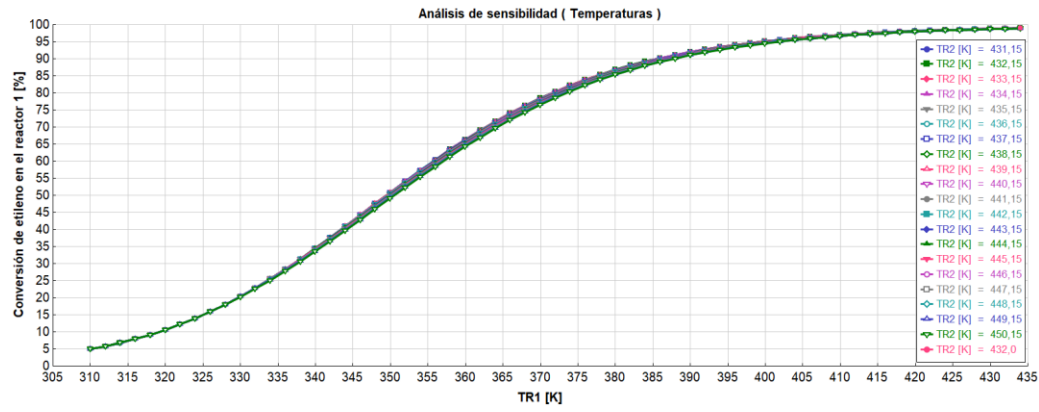


Figura H 2

Conversión global contra las temperaturas de los reactores

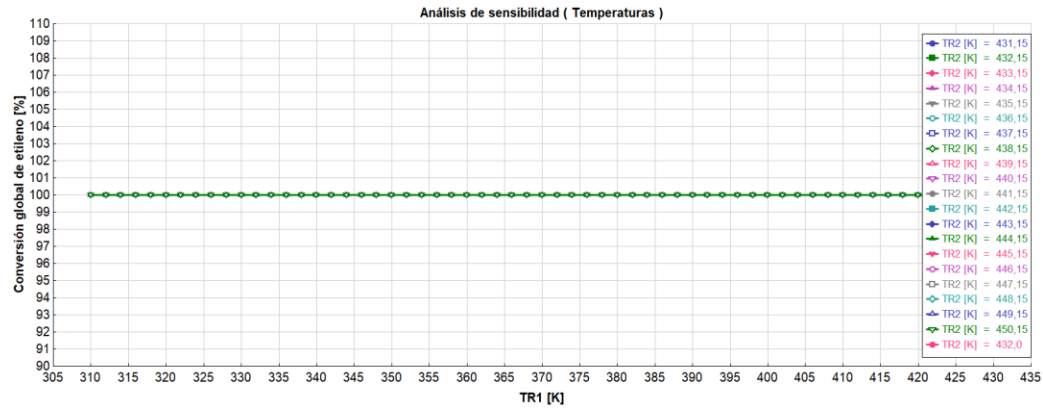


Figura H 3

Flujo molar de benceno a la salida del reactor de alquilación contra las temperaturas de los reactores

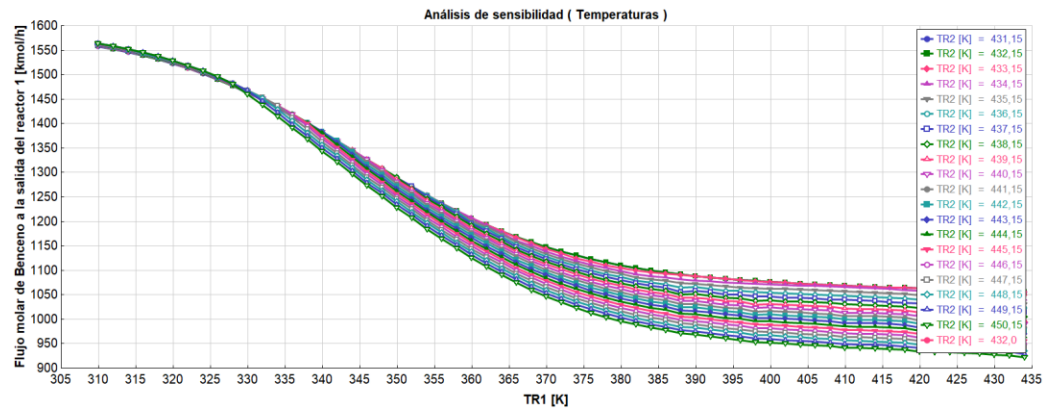


Figura H 4

Flujo molar de etileno a la salida del reactor de alquilación contra las temperaturas de los reactores

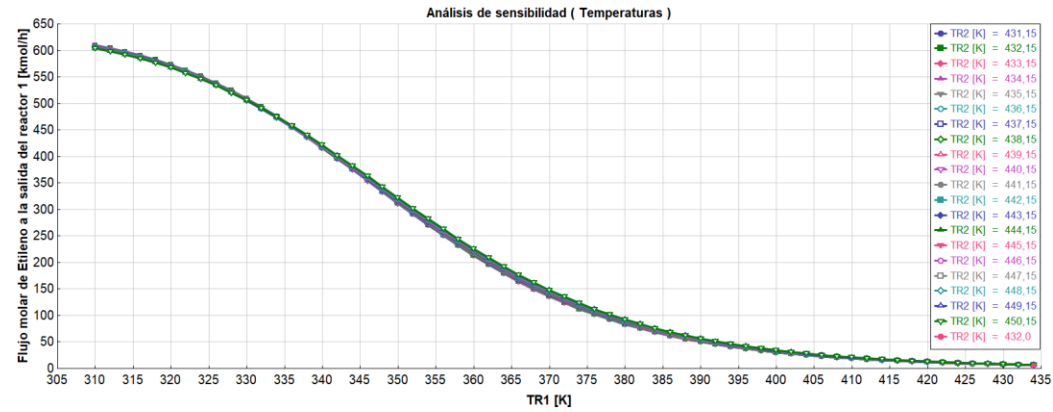


Figura H 5

Flujo molar de etilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra las temperaturas de los reactores

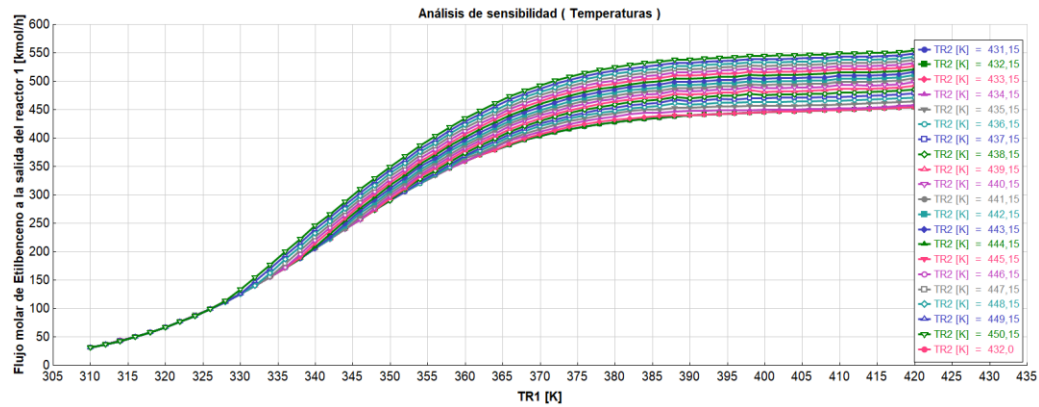


Figura H 6

Flujo molar de dietilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra las temperaturas de los reactores

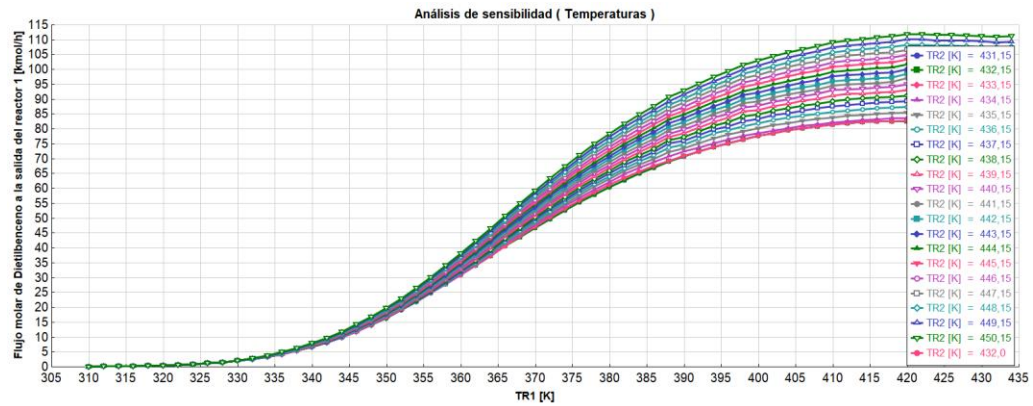


Figura H 7

Flujo molar de benceno a la salida del reactor de transalquilación contra las temperaturas de los reactores

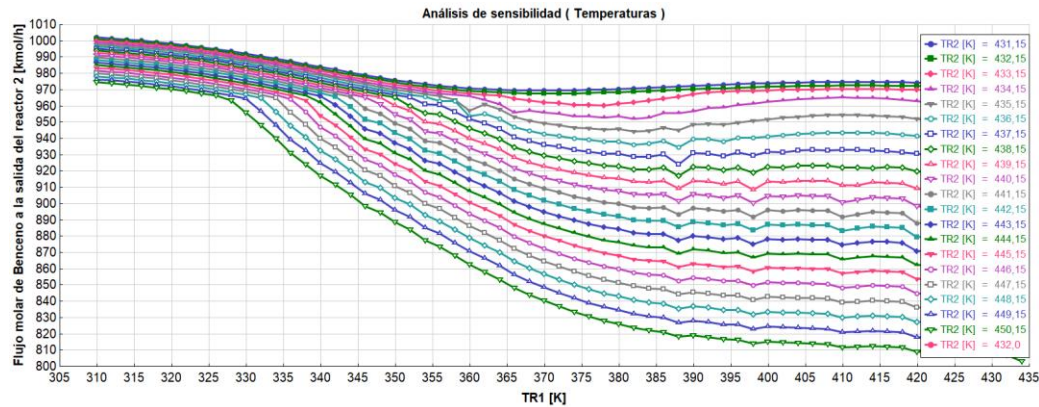


Figura H 8

Flujo molar de etileno a la salida del reactor de transalquilación contra las temperaturas de los reactores

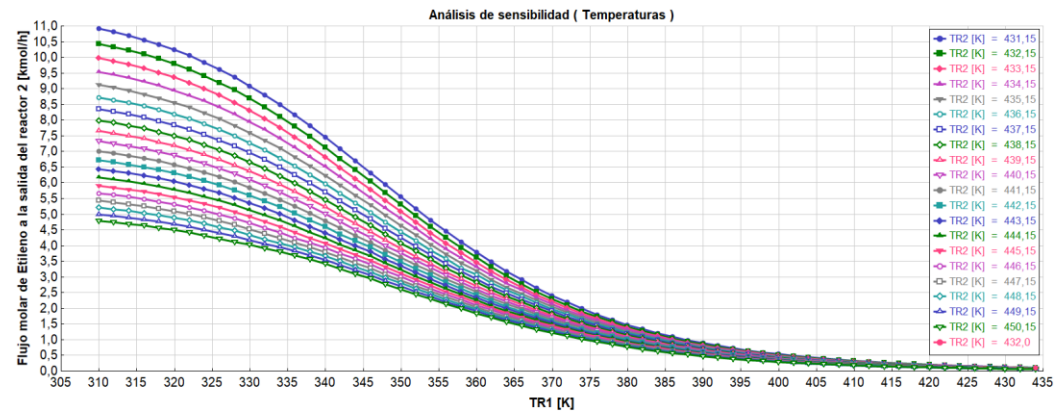


Figura H 9

Flujo molar de etilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra las temperaturas de los reactores

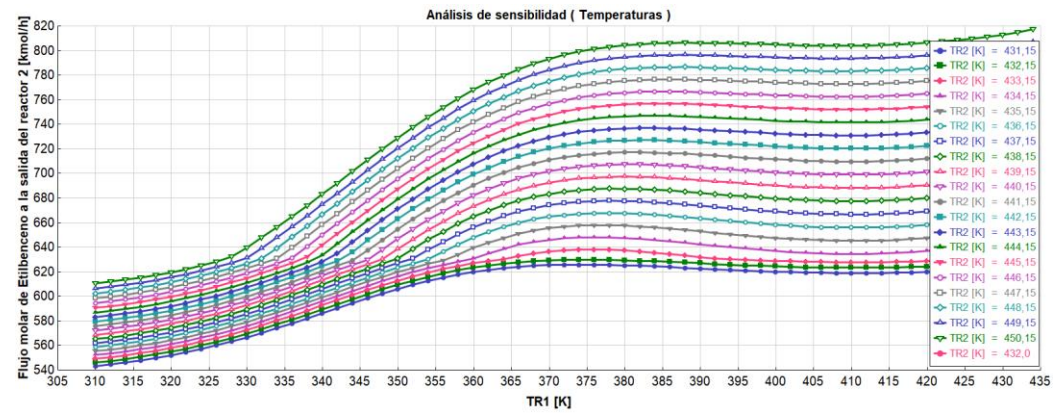


Figura H 10

Flujo molar de dietilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra las temperaturas de los reactores

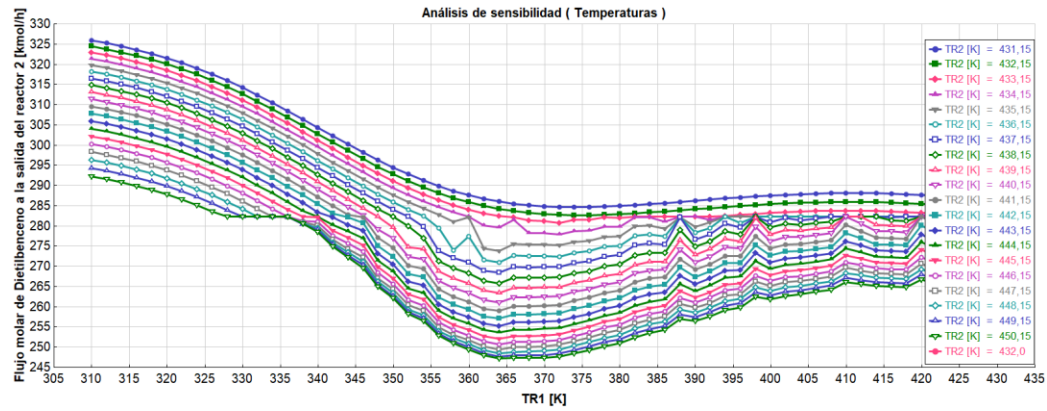


Figura H 11

Flujo molar de benceno en el destilado de la primera columna de destilación contra las temperaturas de los reactores

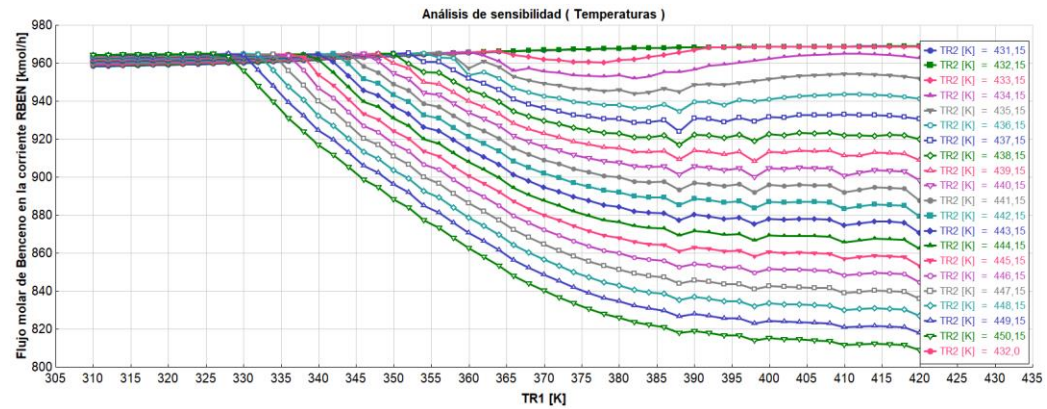


Figura H 12

Flujo molar de etileno en el destilado de la primera columna de destilación contra las temperaturas de los reactores

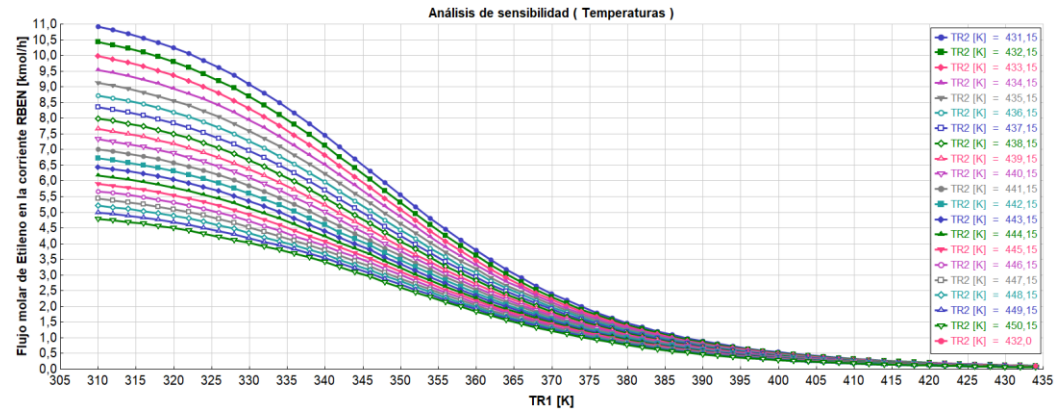


Figura H 13

Flujo molar de etilbenceno en el destilado de la primera columna de destilación contra las temperaturas de los reactores

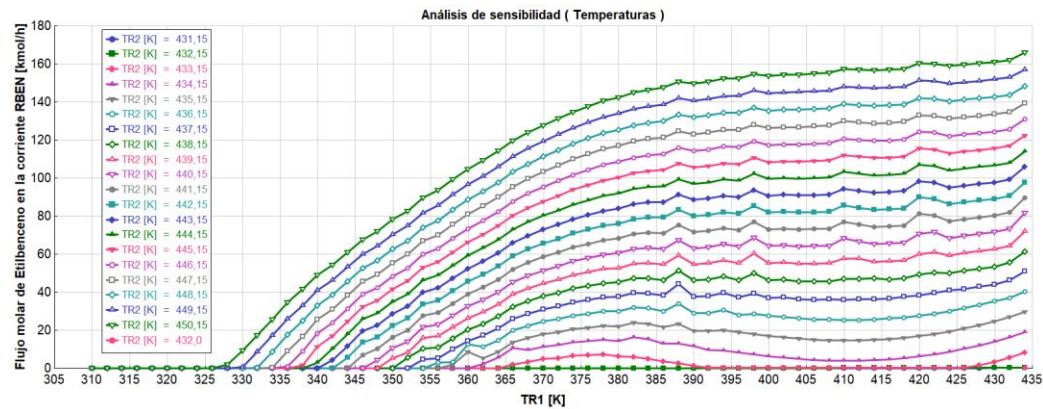


Figura H 14

Flujo molar de etilbenceno en el fondo de la segunda columna de destilación contra las temperaturas de los reactores

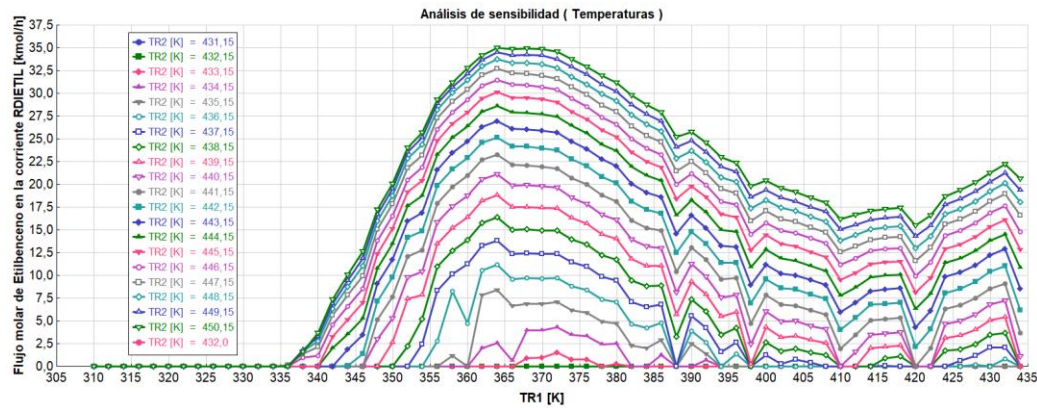


Figura H 15

Flujo molar de dietilbenceno en el fondo de la segunda columna de destilación contra las temperaturas de los reactores

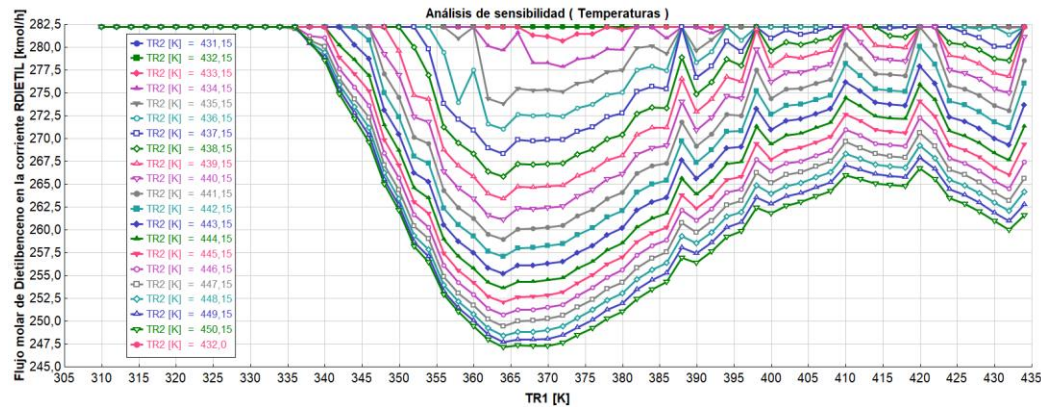


Figura H 16

Exceso de Benceno en el reactor de alquilación contra las temperaturas de los reactores

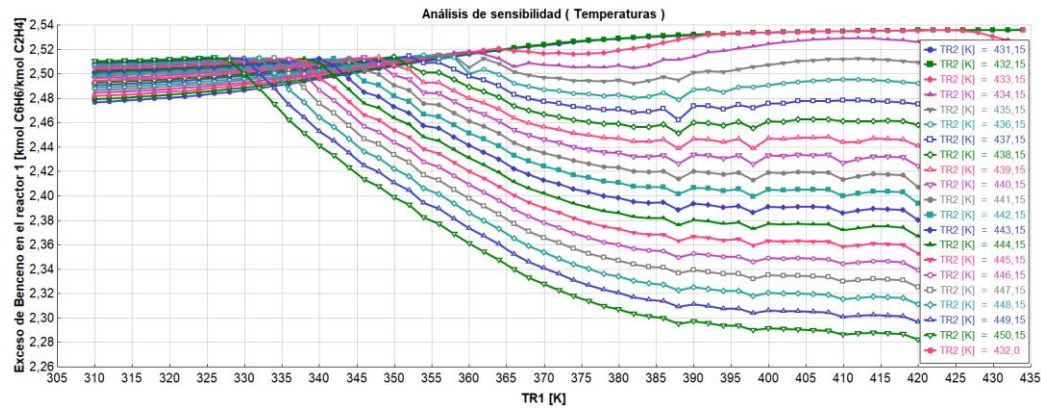


Figura H 17

Exceso de Benceno en el reactor de transalquilación contra las temperaturas de los reactores

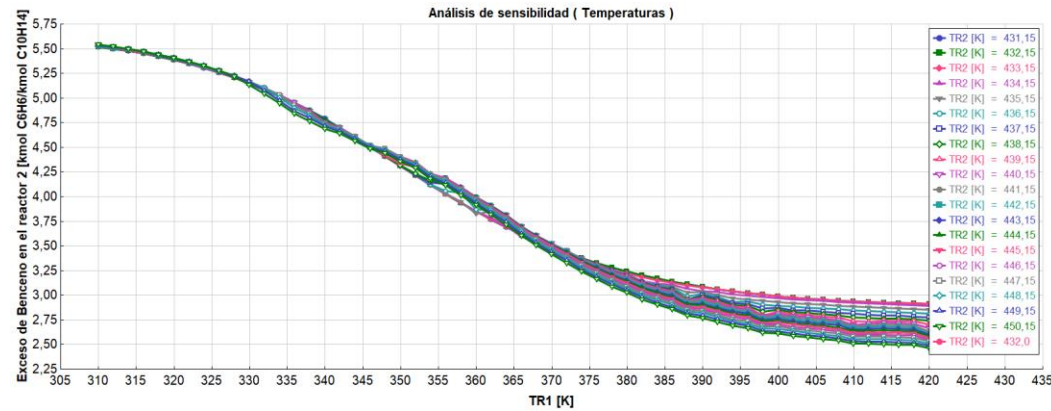


Figura H 18

Energía en el reactor de alquilación (MWatt) contra las temperaturas de los reactores

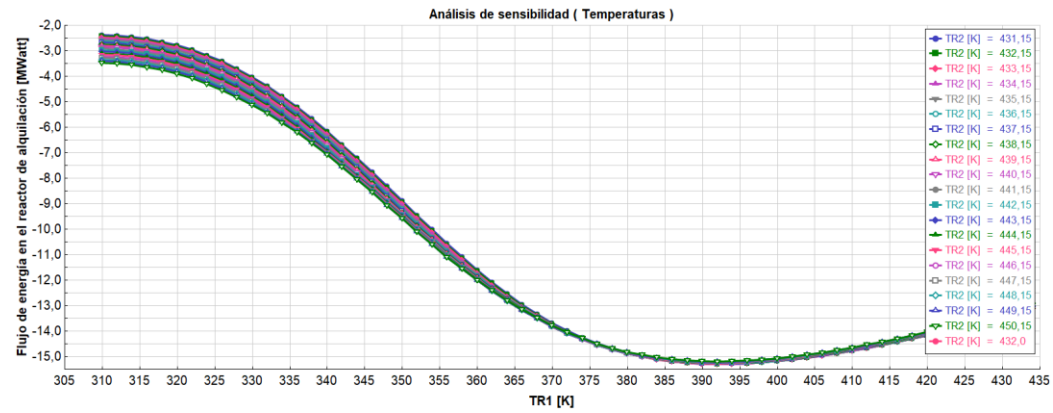
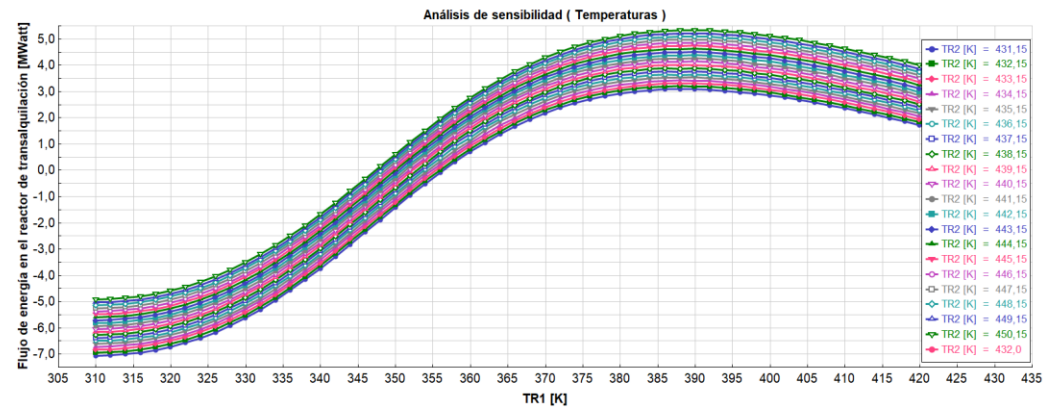


Figura H 19

Energía en el reactor de transalquilación (MWatt) contra las temperaturas de los reactores



Apéndice I. Gráficas de Aspen Sensitivity variando las presiones de los reactores

Figura I 1

Conversión en el reactor de alquilación contra las presiones de los reactores

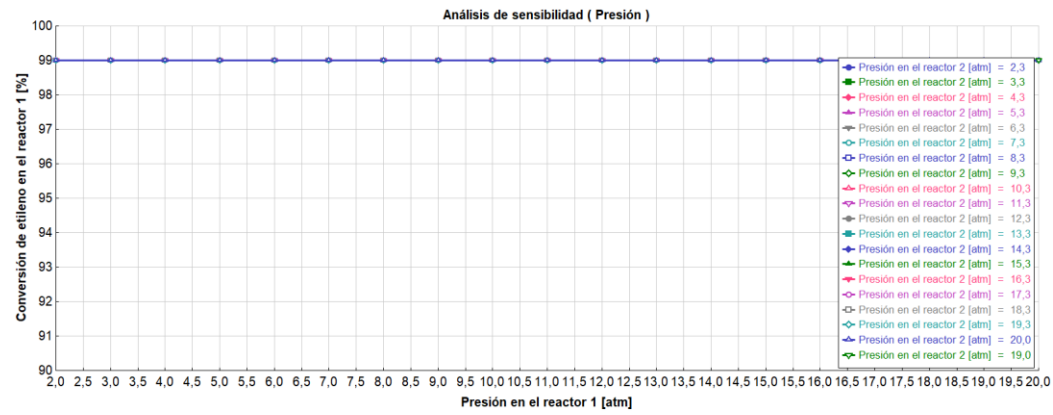
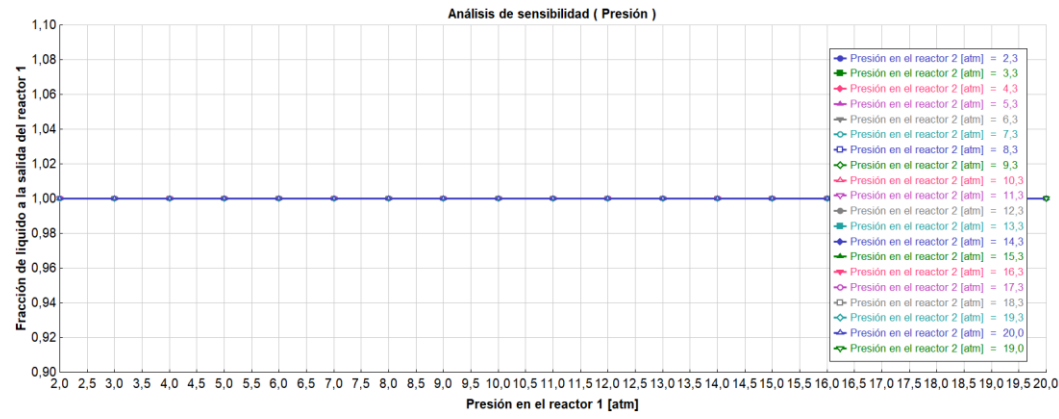


Figura I 2

Fracción de líquido a la salida del primer reactor contra las presiones de los reactores



Apéndice J. Gráficas de Aspen Sensitivity variando las relaciones de reflujo de las columnas de destilación

Figura J 1

Flujo molar del etilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra las relaciones de reflujo de las columnas

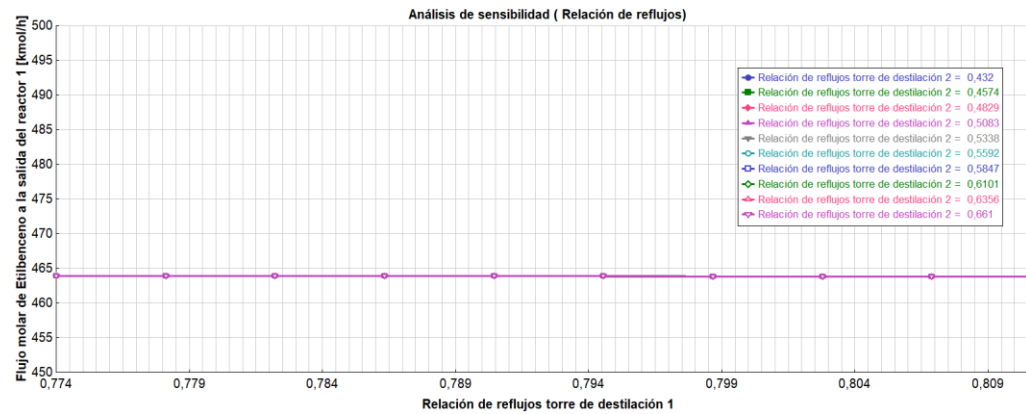
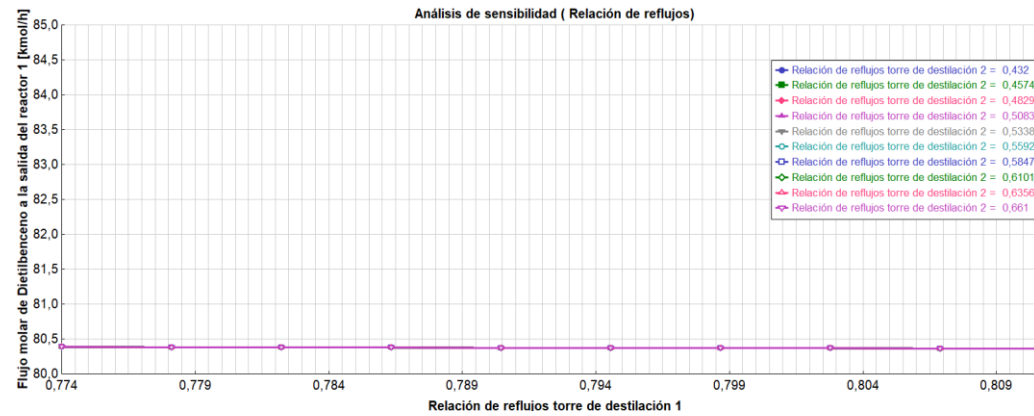


Figura J 2

Flujo molar del dietilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra las relaciones de reflujo de las columnas

**Figura J 3**

Flujo molar del etilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra las relaciones de reflujo de las columnas.

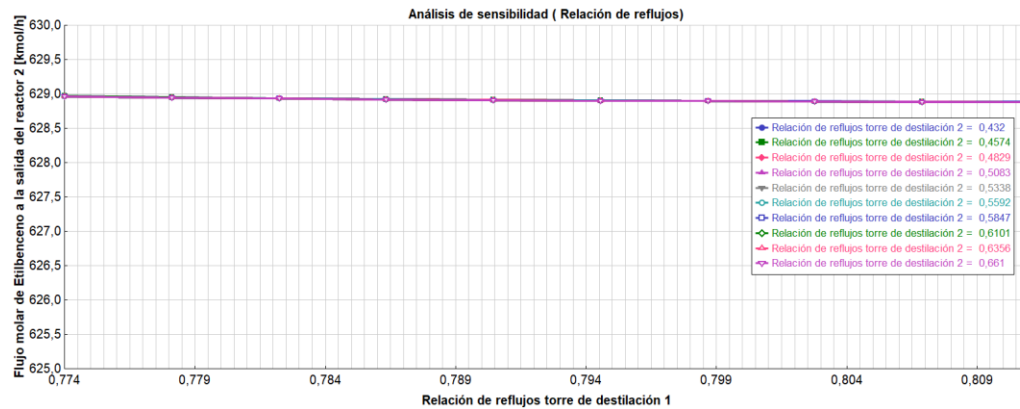
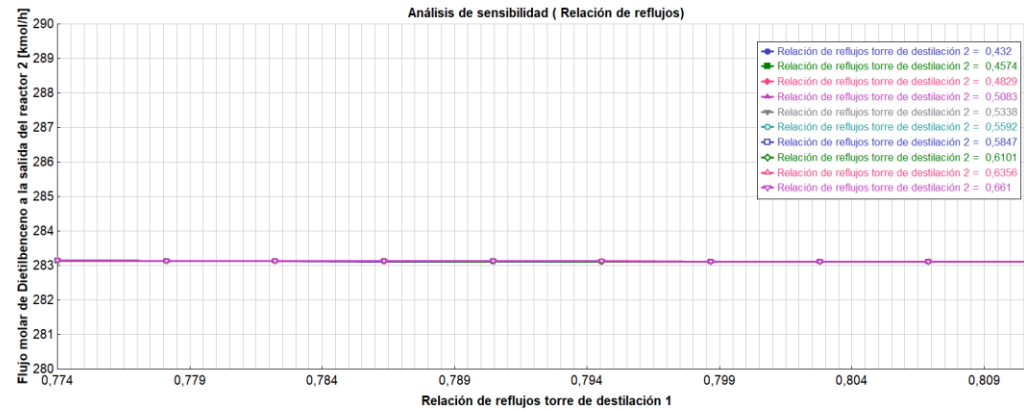


Figura J 4

Flujo molar del dietilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra las relaciones de reflujo de las columnas

**Figura J 5**

Flujo molar del benceno en el destilado de la primera columna contra las relaciones de reflujo de las columnas.

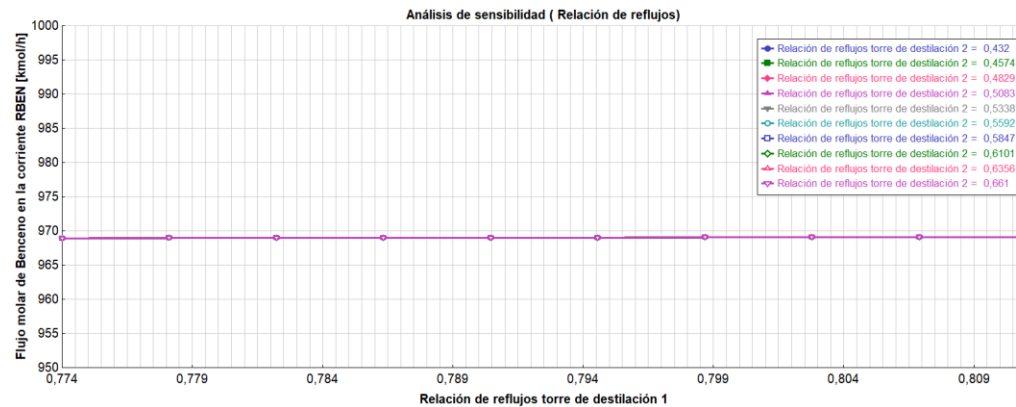
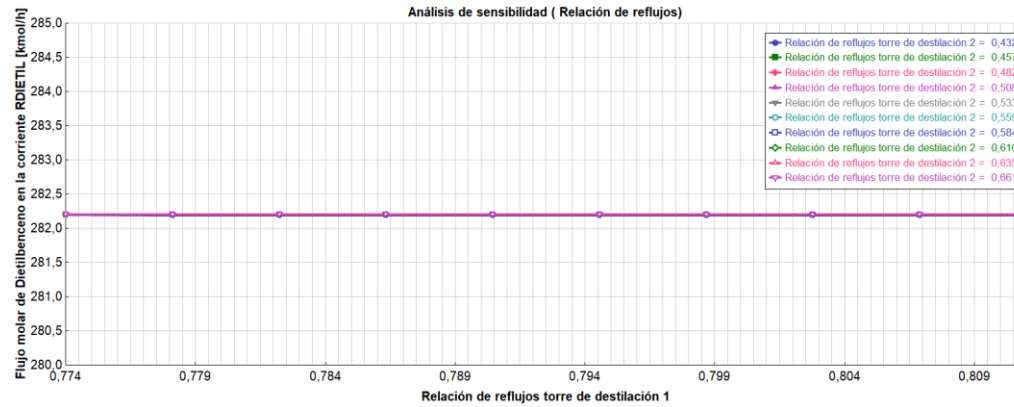


Figura J 6

Flujo molar del dietilbenceno en los fondos de la segunda columna contra las relaciones de reflujo de las columnas.



Apéndice K. Gráficas de Aspen Sensitivity variando el exceso de benceno en el reactor de alquilación**Figura K 1**

Conversión en el reactor de alquilación contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

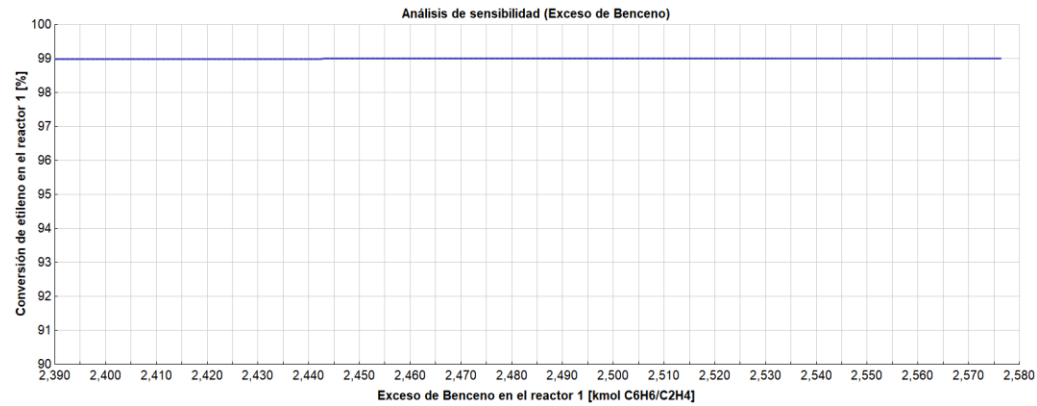


Figura K 2

Conversión global contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

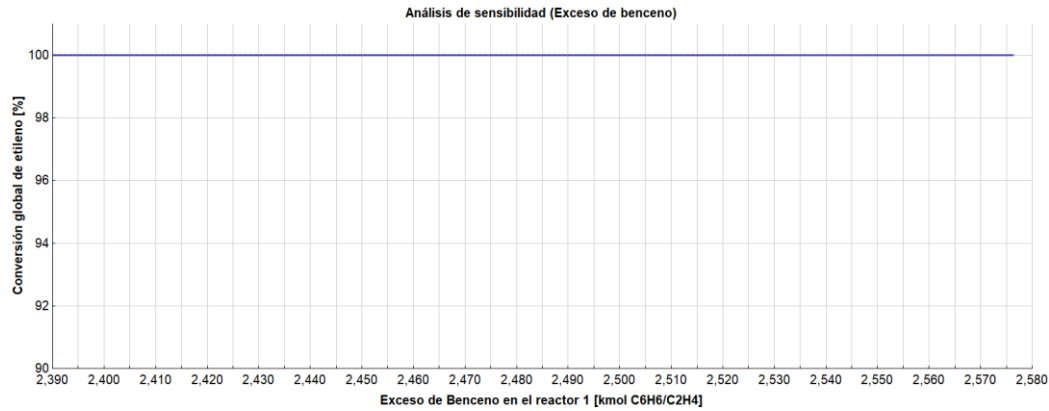


Figura K 3

Flujos molares a la salida del reactor de alquilación contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

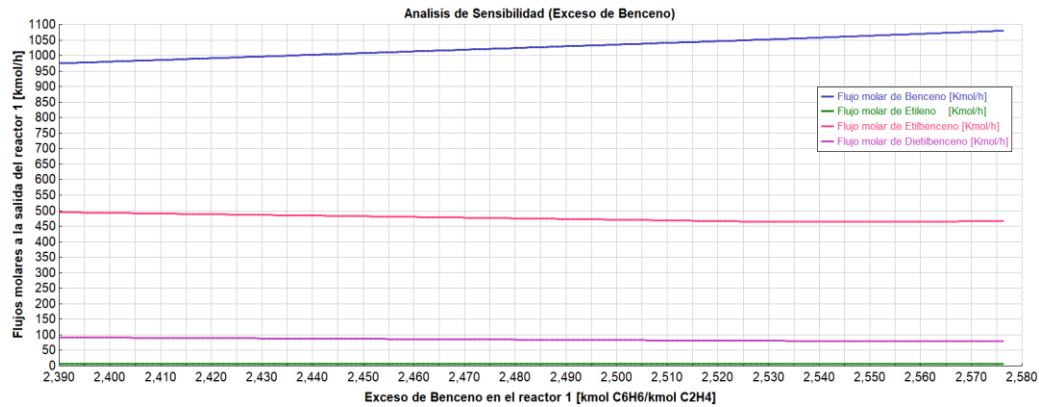


Figura K 4

Flujos molares a la salida del reactor de transalquilación contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

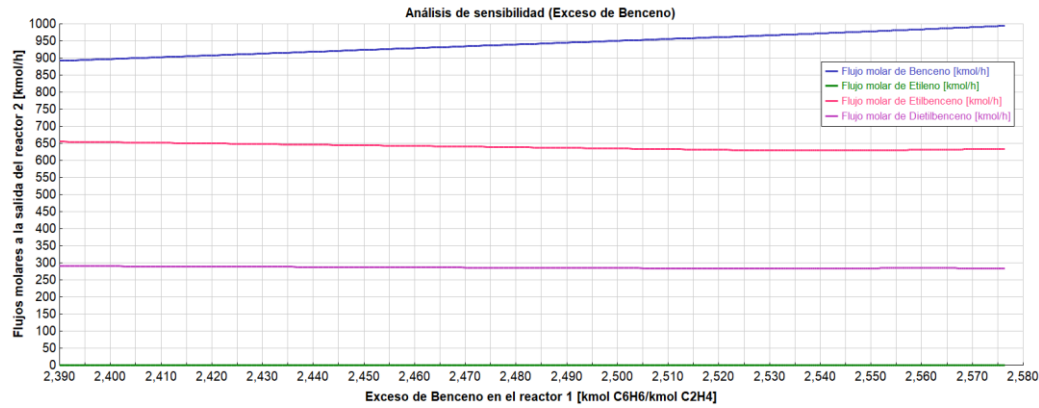


Figura K 5

Flujos molares en el destilado de la primera torre de destilación contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

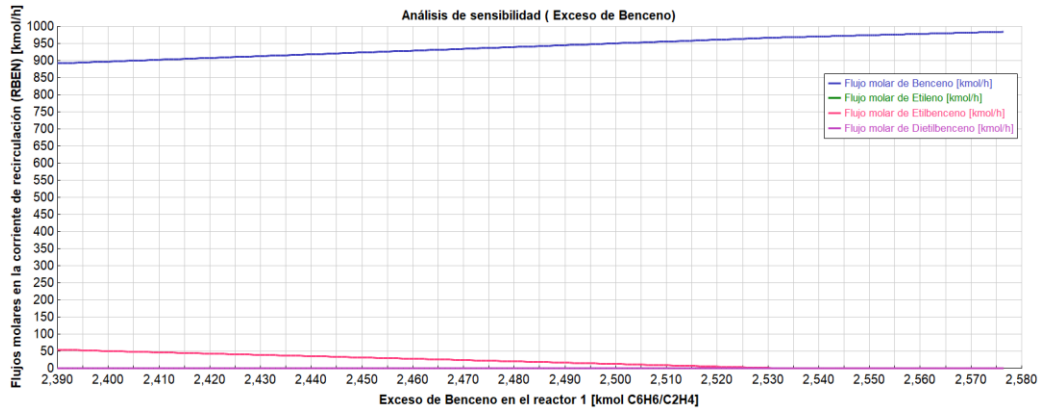
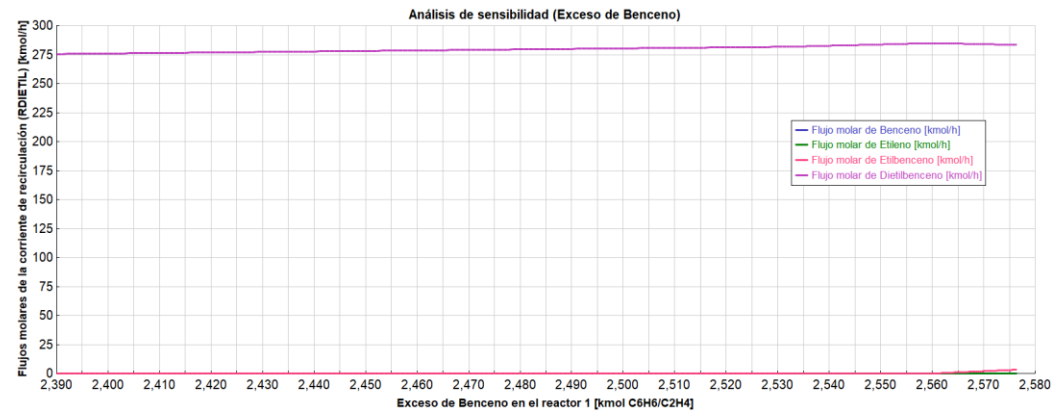


Figura K 6

Flujos molares en el fondo de la segunda torre de destilación contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

**Figura K 7**

Energía del reactor de alquilación (MWatt) contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

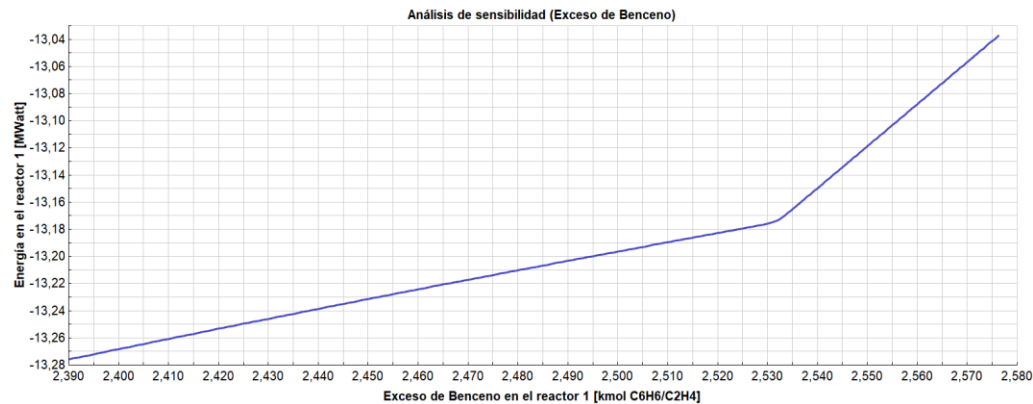
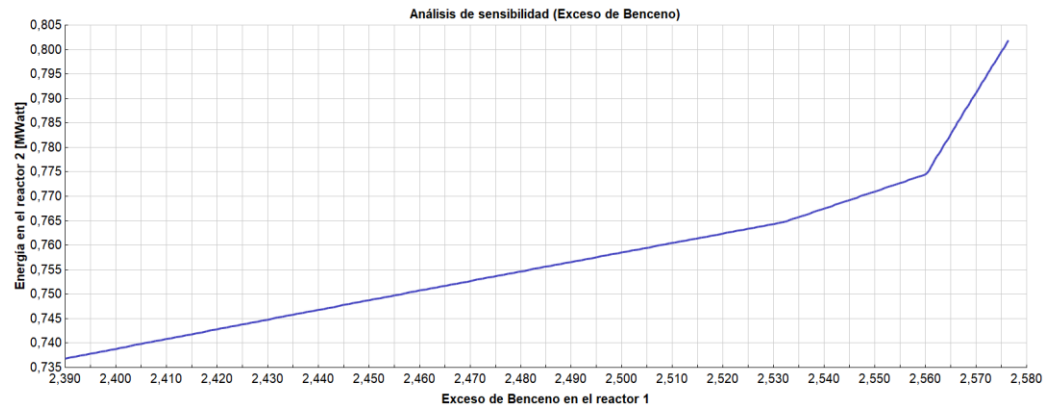
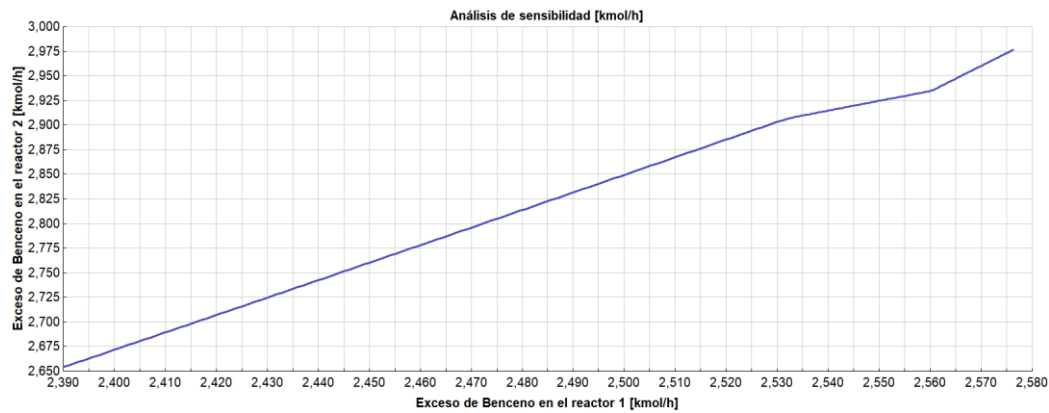


Figura K 8

Energía del reactor de transalquilación (MWatt) contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación

**Figura K 9**

Exceso de benceno en el reactor de transalquilación contra el exceso de benceno en el reactor de alquilación



Apéndice L. Análisis de varianza, graficas de pareto y ecuaciones de regresión halladas en el software Minitab V19**Figura L 1**

Diagrama de pareto del flujo molar de etilbenceno a la salida del proceso contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

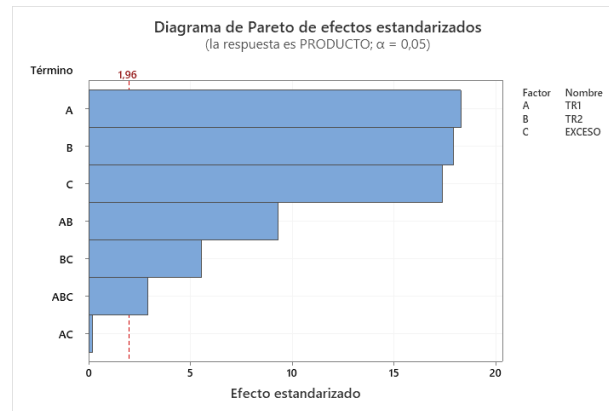


Figura L 2

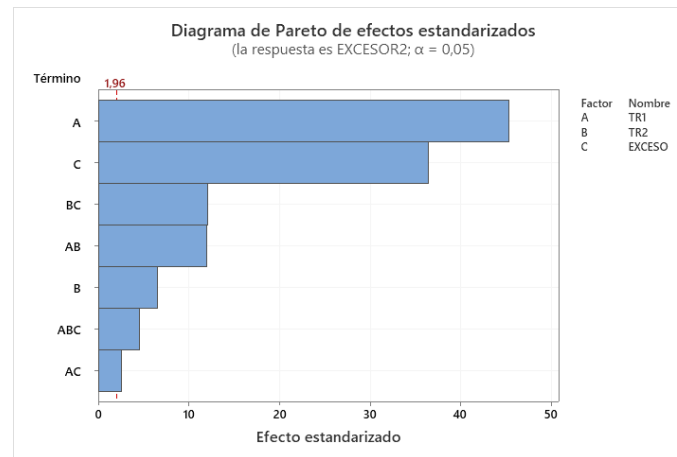
Análisis de varianza del exceso de benceno en el reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	1091,22	155,889	2045,42	0,000
Lineal	3	519,67	173,223	2272,86	0,000
TR1	1	156,64	156,637	2055,24	0,000
TR2	1	3,22	3,222	42,28	0,000
EXCESO	1	101,26	101,259	1328,63	0,000
Interacciones de 2 términos	3	17,07	5,691	74,67	0,000
TR1*TR2	1	10,94	10,936	143,49	0,000
TR1*EXCESO	1	0,52	0,515	6,76	0,009
TR2*EXCESO	1	11,20	11,195	146,90	0,000
Interacciones de 3 términos	1	1,55	1,548	20,31	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	1,55	1,548	20,31	0,000
Error	993	75,68	0,076		
Total	1000	1166,90			

Figura L 3

Diagrama de pareto del exceso de benceno en el reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

**Figura L 4**

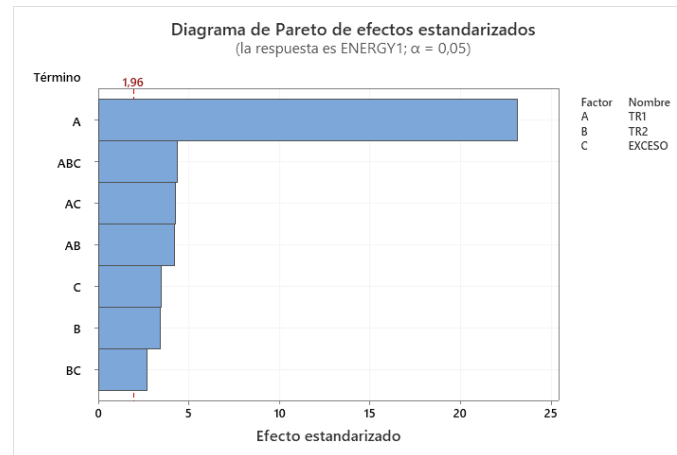
Análisis de varianza de la energía en el reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	15791,8	2255,96	451,98	0,000
Lineal	3	4391,5	1463,84	293,28	0,000
TR1	1	2677,1	2677,08	536,34	0,000
TR2	1	59,1	59,12	11,84	0,001
EXCESO	1	59,5	59,49	11,92	0,001
Interacciones de 2 términos	3	400,5	133,50	26,75	0,000
TR1*TR2	1	88,4	88,35	17,70	0,000
TR1*EXCESO	1	90,9	90,90	18,21	0,000
TR2*EXCESO	1	36,8	36,76	7,36	0,007
Interacciones de 3 términos	1	94,6	94,64	18,96	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	94,6	94,64	18,96	0,000
Error	993	4956,4	4,99		
Total	1000	20748,1			

Figura L 5

Diagrama de Pareto de la energía en el reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

**Figura L 6**

Análisis de varianza de la energía en el reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	10148,9	1449,84	353,28	0,000
Lineal	3	3106,7	1035,56	252,33	0,000
TR1	1	1613,9	1613,92	393,25	0,000
TR2	1	369,1	369,09	89,93	0,000
EXCESO	1	7,8	7,84	1,91	0,167
Interacciones de 2 términos	3	259,7	86,57	21,09	0,000
TR1*TR2	1	38,0	37,97	9,25	0,002
TR1*EXCESO	1	70,0	69,98	17,05	0,000
TR2*EXCESO	1	48,3	48,29	11,77	0,001
Interacciones de 3 términos	1	99,0	99,00	24,12	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	99,0	99,00	24,12	0,000
Error	993	4075,3	4,10		
Total	1000	14224,2			

Figura L 7

Diagrama de Pareto de la energía en el reactor de transquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

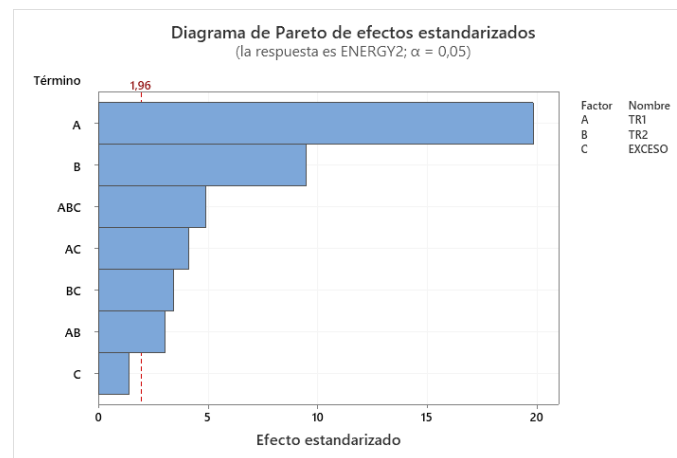


Figura L 8

Análisis de varianza de la conversión en el reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	1083427	154775	1502,42	0,000
Lineal	3	299277	99759	968,37	0,000
TR1	1	212169	212169	2059,54	0,000
TR2	1	635	635	6,16	0,013
EXCESO	1	986	986	9,57	0,002
Interacciones de 2 términos	3	6883	2294	22,27	0,000
TR1*TR2	1	1008	1008	9,78	0,002
TR1*EXCESO	1	1977	1977	19,19	0,000
TR2*EXCESO	1	968	968	9,39	0,002
Interacciones de 3 términos	1	2071	2071	20,10	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	2071	2071	20,10	0,000
Error	993	102297	103		
Total	1000	1185724			

Figura L 9

Diagrama de pareto de la conversión en el reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

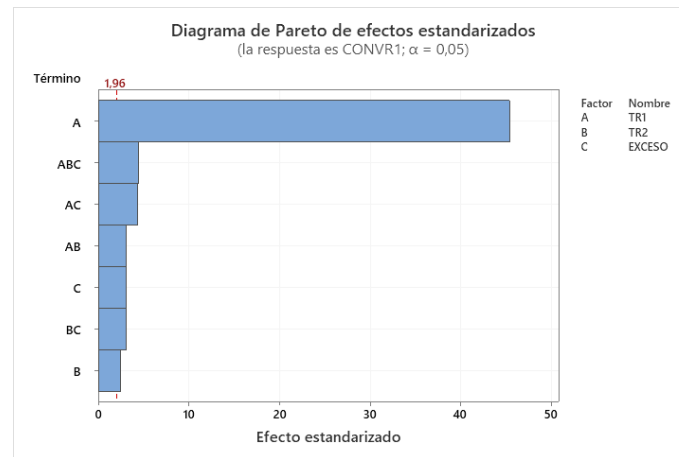


Figura L 10

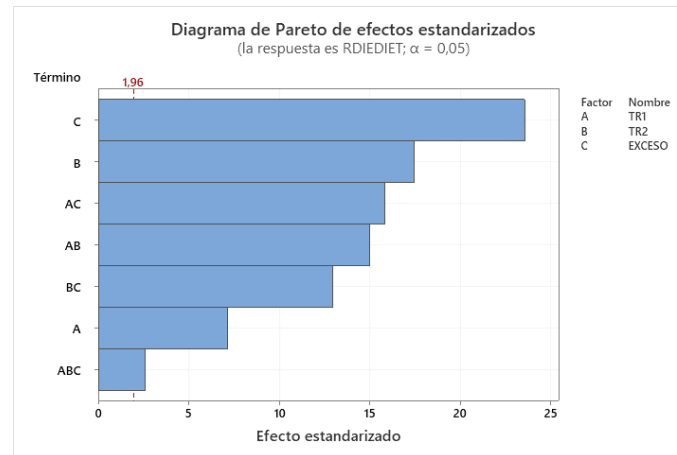
Análisis de varianza del flujo molar de dietilbenceno en los fondos de la segunda columna de destilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	863509	123358	684,26	0,000
Lineal	3	106985	35662	197,81	0,000
TR1	1	9214	9214	51,11	0,000
TR2	1	54707	54707	303,45	0,000
EXCESO	1	99946	99946	554,39	0,000
Interacciones de 2 términos	3	63244	21081	116,94	0,000
TR1*TR2	1	40361	40361	223,88	0,000
TR1*EXCESO	1	45071	45071	250,01	0,000
TR2*EXCESO	1	30252	30252	167,81	0,000
Interacciones de 3 términos	1	1197	1197	6,64	0,010
TR1*TR2*EXCESO	1	1197	1197	6,64	0,010
Error	993	179018	180		
Total	1000	1042527			

Figura L 11

Diagrama de Pareto del flujo molar de dietilbenceno en los fondos de la segunda columna de destilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

**Figura L 12**

Análisis de varianza del flujo molar de benceno en el destilado de la primera columna de destilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	4226839	603834	29725,70	0,000
Lineal	3	3497128	1165709	57385,84	0,000
TR1	1	23817	23817	1172,48	0,000
TR2	1	21603	21603	1063,46	0,000
EXCESO	1	1567207	1567207	77150,88	0,000
Interacciones de 2 términos	3	7526	2509	123,50	0,000
TR1*TR2	1	706	706	34,78	0,000
TR1*EXCESO	1	1389	1389	68,37	0,000
TR2*EXCESO	1	6778	6778	333,65	0,000
Interacciones de 3 términos	1	1192	1192	58,70	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	1192	1192	58,70	0,000
Error	993	20171	20		
Total	1000	4247011			

Figura L 13

Diagrama de Pareto del flujo molar de benceno en el destilado de la primera columna de destilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

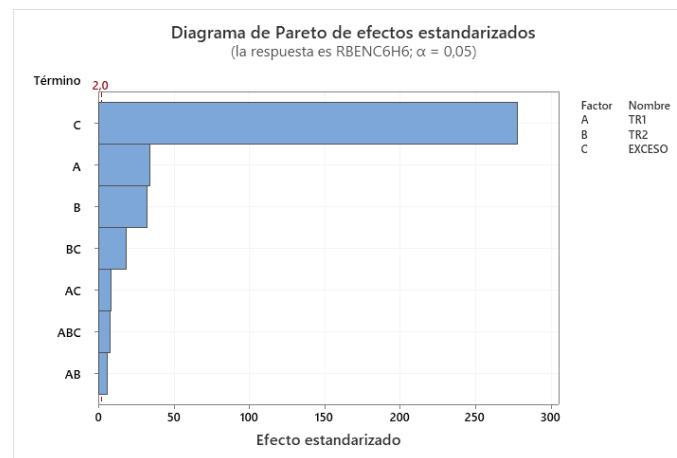


Figura L 14

Análisis de varianza del flujo molar de etilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	26407076	3772439	1027,40	0,000
Lineal	3	9946916	3315639	903,00	0,000
TR1	1	4270608	4270608	1163,08	0,000
TR2	1	196428	196428	53,50	0,000
EXCESO	1	611885	611885	166,64	0,000
Interacciones de 2 términos	3	394465	131488	35,81	0,000
TR1*TR2	1	71908	71908	19,58	0,000
TR1*EXCESO	1	67874	67874	18,49	0,000
TR2*EXCESO	1	137235	137235	37,38	0,000
Interacciones de 3 términos	1	150009	150009	40,85	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	150009	150009	40,85	0,000
Error	993	3646121	3672		
Total	1000	30053197			

Figura L 15

Diagrama de Pareto del flujo molar de etilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

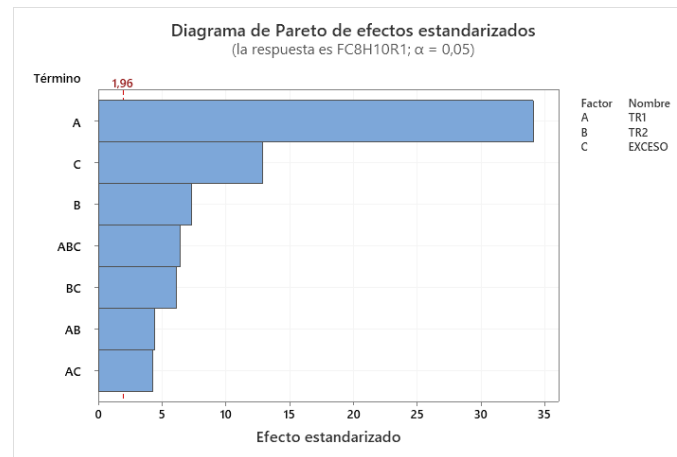


Figura L 16

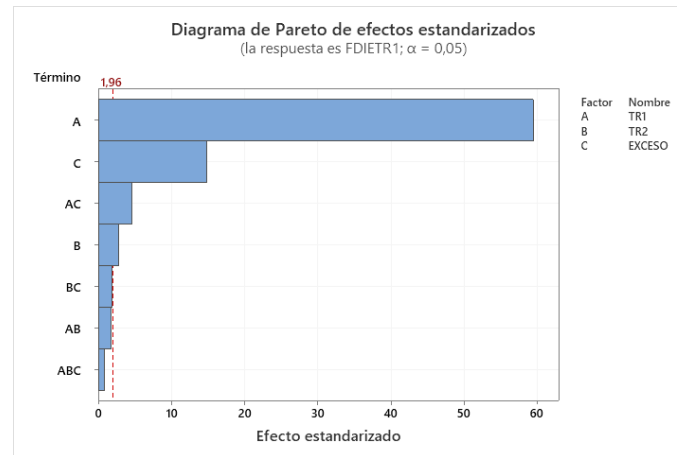
Análisis de varianza del flujo molar de dietilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	1430860	204409	2283,48	0,000
Lineal	3	559269	186423	2082,56	0,000
TR1	1	316384	316384	3534,36	0,000
TR2	1	674	674	7,52	0,006
EXCESO	1	19595	19595	218,89	0,000
Interacciones de 2 términos	3	4855	1618	18,08	0,000
TR1*TR2	1	265	265	2,96	0,086
TR1*EXCESO	1	1900	1900	21,23	0,000
TR2*EXCESO	1	313	313	3,49	0,062
Interacciones de 3 términos	1	56	56	0,62	0,431
TR1*TR2*EXCESO	1	56	56	0,62	0,431
Error	993	88890	90		
Total	1000	1519750			

Figura L 17

Diagrama de Pareto del flujo molar de dietilbenceno a la salida del reactor de alquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

**Figura L 18**

Análisis de varianza del flujo molar de etilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Modelo	7	4639648	662807	1343,50	0,000
Lineal	3	2331641	777214	1575,40	0,000
TR1	1	400055	400055	810,91	0,000
TR2	1	695356	695356	1409,48	0,000
EXCESO	1	52998	52998	107,43	0,000
Interacciones de 2 términos	3	41262	13754	27,88	0,000
TR1*TR2	1	3377	3377	6,85	0,009
TR1*EXCESO	1	7364	7364	14,93	0,000
TR2*EXCESO	1	18226	18226	36,94	0,000
Interacciones de 3 términos	1	27201	27201	55,14	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	27201	27201	55,14	0,000
Error	993	489890	493		
Total	1000	5129538			

Figura L 19

Diagrama de Pareto del flujo molar de etilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

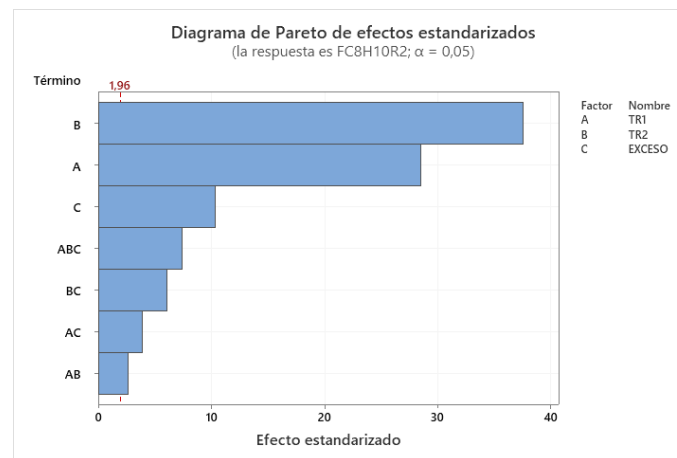


Figura L 20

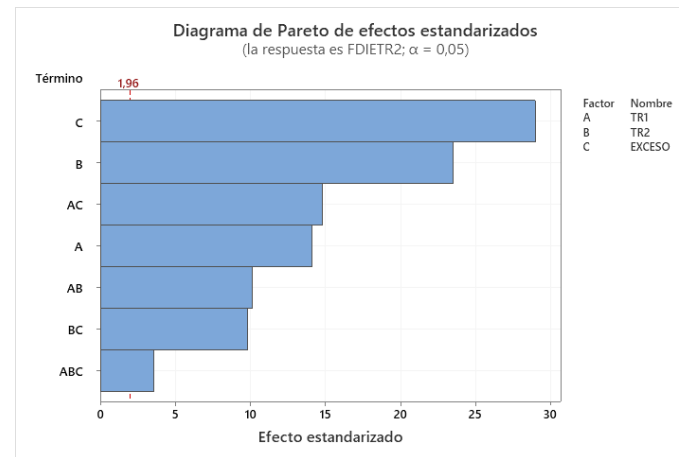
Análisis de varianza del flujo molar de dietilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

Análisis de Varianza

<u>Fuente</u>	<u>GL</u>	<u>SC</u>	<u>Ajust. MC</u>	<u>Ajust. Valor F</u>	<u>Valor p</u>
Modelo	7	1265565	180795	869,23	0,000
Lineal	3	191337	63779	306,64	0,000
TR1	1	41277	41277	198,45	0,000
TR2	1	114867	114867	552,26	0,000
EXCESO	1	174666	174666	839,76	0,000
Interacciones de 2 términos	3	53031	17677	84,99	0,000
TR1*TR2	1	21402	21402	102,90	0,000
TR1*EXCESO	1	45582	45582	219,15	0,000
TR2*EXCESO	1	19974	19974	96,03	0,000
Interacciones de 3 términos	1	2677	2677	12,87	0,000
TR1*TR2*EXCESO	1	2677	2677	12,87	0,000
Error	993	206539	208		
Total	1000	1472104			

Figura L 21

Diagrama de pareto del flujo molar de dietilbenceno a la salida del reactor de transalquilación contra los factores de temperatura en los reactores y el exceso de benceno en el primer reactor

**Tabla L 1**

Ecuaciones de regresión de las variables respuesta en base a los factores de temperatura en los reactores (TR1 y TR2) y el exceso de benceno en el primer reactor (EXCESO)

FC8H10R1	$-297570 + 730 \text{ TR1} + 681 \text{ TR2} + 120085 \text{ EXCESO} - 1,665 \text{ TR1*TR2} - 295,0 \text{ TR1*EXCESO} - 275,8 \text{ TR2*EXCESO} + 0,676 \text{ TR1*TR2*EXCESO}$	kmol/h
FDIETR1	$3840 - 13,3 \text{ TR1} - 10,1 \text{ TR2} - 1506 \text{ EXCESO} + 0,0349 \text{ TR1*TR2} + 5,23 \text{ TR1*EXCESO} + 3,71 \text{ TR2*EXCESO} - 0,0130 \text{ TR1*TR2*EXCESO}$	kmol/h
FC8H10R2	$-120264 + 291,5 \text{ TR1} + 276,1 \text{ TR2} + 50640 \text{ EXCESO} - 0,6643 \text{ TR1*TR2} - 125,9 \text{ TR1*EXCESO} - 116,0 \text{ TR2*EXCESO} + 0,2880 \text{ TR1*TR2*EXCESO}$	kmol/h
FDIETR2	$19387 - 71,7 \text{ TR1} - 47,0 \text{ TR2} - 10079 \text{ EXCESO} + 0,1751 \text{ TR1*TR2} + 37,4 \text{ TR1*EXCESO} + 24,54 \text{ TR2*EXCESO} - 0,0904 \text{ TR1*TR2*EXCESO}$	kmol/h

RBENC6H6	30733 - 67,00 TR1 - 69,51 TR2 - 11867 EXCESO + 0,1492 TR1*TR2 + 27,00 TR1*EXCESO+ 27,77 TR2*EXCESO - 0,06030 TR1*TR2*EXCESO	kmol/h
RDIEDIET	2653 - 34,2 TR1 - 9,4 TR2 - 4200 EXCESO + 0,0902 TR1*TR2 + 24,2 TR1*EXCESO+ 11,29 TR2*EXCESO - 0,0604 TR1*TR2*EXCESO	kmol/h
EXCESOR2	1208 - 2,678 TR1 - 2,721 TR2 - 450,4 EXCESO + 0,00599 TR1*TR2 + 0,966 TR1*EXCESO + 1,025 TR2*EXCESO - 0,002172 TR1*TR2*EXCESO	
CONVR1	-34063 + 85,8 TR1 + 77,9 TR2 + 13723 EXCESO - 0,1957 TR1*TR2 - 34,51 TR1*EXCESO - 31,60 TR2*EXCESO + 0,0795 TR1*TR2*EXCESO	%
ENERGY1	7336 - 18,57 TR1 - 16,84 TR2 - 2916 EXCESO + 0,04252 TR1*TR2 + 7,38 TR1*EXCESO+ 6,72 TR2*EXCESO - 0,01699 TR1*TR2*EXCESO	MWatt
ENERGY2	-7476 + 18,61 TR1 + 17,11 TR2 + 3012 EXCESO - 0,04259 TR1*TR2 - 7,56 TR1*EXCESO- 6,92 TR2*EXCESO + 0,01737 TR1*TR2*EXCESO	MWatt

Apéndice M Especificaciones de los equipos y del Aspen Sensitivity en los artículos de William Luyben y Ganji et al

Tabla M 1

Especificación de equipos de la simulación de William Luyben en Aspen Plus

Equipo	Modulo	Variables	Magnitud	Unidades
V1	VALVE	Presión de salida	0,3	atm

V2	VALVE	Presión de salida	0,1	atm
M1	MIXER	Caída de presión	0	atm
M2	MIXER	Caída de presión	0	atm
M3	MIXER	Caída de presión	0	atm
P1	PUMP	Presión de descarga	20	atm
P2	PUMP	Presión de descarga	1	atm
P3	PUMP	Presión de descarga	19	atm
		Temperatura	434	K
REACTOR1	CSTR	Presión	20	atm
		Volumen	200	m ³
		Temperatura	432	K
REACTOR2	CSTR	Presión	19	atm
		Volumen	200	m ³
		Etapas	21	
C1	RADFRAC	Etapas de alimentación	10	
		Tipo de condensador	Total	

		Relación de reflujo	0,774	
		Relación destilado/alimentación	0,515	
		Presión del condensador	0,3	atm
		Etapas	25	
		Etapas de alimentación	15	
		Tipo de condensador	Total	
C2	RADFRAC	Relación de reflujo	0,661	
		Relación destilado/alimentación	0,691	
		Presión del condensador	0.1	atm
COMP	COMPRESSOR	Presión de descarga	20	atm

Tabla M 2

Especificación de equipos de la simulación de William Luyben con un solo reactor en Aspen Plus

Equipo	Modulo	Variables	Magnitud	Unidades
M1	MIXER	Caída de presión	0	atm

M2	MIXER	Caída de presión	0	atm
M3	MIXER	Caída de presión	0	atm
		Temperatura	485,66	K
REACTOR1	CSTR	Presión	38	bar
		Volumen	10,273	m ³
		Temperatura	490,5	K
REACTOR2	CSTR	Presión	38	bar
		Volumen	10,273	m ³
		Temperatura	490,6	K
REACTOR3	CSTR	Presión	38	bar
		Volumen	32,0914	m ³

Tabla M 3

Especificación de equipos de la simulación de Ganji et al en Aspen Plus

Equipo	Modulo	VARIABLES	Magnitud	Unidades
V1	VALVE	Presión de salida	0,3	atm

V2	VALVE	Presión de salida	0,1	atm
M1	MIXER	Caída de presión	0	atm
M2	MIXER	Caída de presión	0	atm
P1	PUMP	Presión de descarga	20	atm
P2	PUMP	Presión de descarga	1	atm
P3	PUMP	Presión de descarga	20	atm
		Temperatura	434	K
R	CSTR	Presión	20	atm
		Volumen	400	m ³
		Etapas	21	
		Etapas de alimentación	10	
		Tipo de condensador	Total	
C1	RADFRAC	Relación de reflujo	0,774	
		Relación destilado/alimentación	0,515	
		Presión del condensador	0,3	atm

		Etapas	25	
		Etapas de alimentación	15	
		Tipo de condensador	Total	
C2	RADFRAC	Relación de reflujo	0,661	
		Relación destilado/alimentación	0,691	
		Presión del condensador	0,1	atm
COMP	COMPRESSOR	Presión de descarga	20	atm

Tabla M 4

Variables independientes de Aspen Sensitivity

Nº	Tipo de variable	Bloque/corriente	Variable/Compuesto	Units
1	Block-Var	Reactor 1	Temperatura	K
2	Block-Var	Reactor 1	Presión	atm
3	Mole Flow	BENCENO	C6H6	kmol/h
4	Block-Var	Reactor 2	Temperatura	K
5	Block-Var	Reactor 2	Presión	atm

6	Block-Var	C1	Rate Reflux
7	Block-Var	C2	Rate Reflux

Tabla M 5

Variables dependientes tabuladas en Aspen Sensitivity

N°	Ecuación	Descripción	Unidades
1	FBENR1	Flujo salida del reactor 1 (C6H6)	kmol/h
2	FC2H4R1	Flujo salida del reactor 1 (C2H4)	kmol/h
3	FC8H10R1	Flujo salida del reactor 1 (C8H10)	kmol/h
4	FDIETR1	Flujo salida del reactor 1 (C10H14)	kmol/h
5	FBENR2	Flujo salida del reactor 2 (C6H6)	kmol/h
6	FC2H4R2	Flujo salida del reactor 2 (C2H4)	kmol/h

7	FC8H10R2	Flujo salida del reactor 2 (C8H10)	kmol/h
8	FDIETR2	Flujo salida del reactor 2 (C10H14)	kmol/h
9	RBENC6H6	Flujo Benceno (RBEN)	kmol/h
10	RBENC2H4	Flujo Etileno (RBEN)	kmol/h
11	RBENETIL	Flujo Etilbenceno (RBEN)	kmol/h
12	RBENDIET	Flujo Dietilbenceno (RBEN)	kmol/h
13	RDIEC6H6	Flujo Benceno (RDIETIL)	kmol/h
14	RDIEC2H4	Flujo Etileno (RDIETIL)	kmol/h
15	RDIETIL	Flujo Etilbenceno (RDIETIL)	kmol/h
16	RDIEDIET	Flujo Dietilbenceno (RDIETIL)	kmol/h
17	PRODUCTO	Salida Etilbenceno Proceso	kmol/h
18	FC6H6IN/FC2H4IN1	Exceso Benceno reactor 1	
19	BENR2IN/DIETR2IN	Exceso Benceno reactor 2	
20	ENERGY1	Energía reactor 1	MWatt

21	ENERGY2	Energía reactor 2	MWatt
22	$(FC2H4IN1-FC2H4R1) * 100 / FC2H4IN1$	Conversión reactor 1	%
23	$(FC2H4IN1-PRODC2H4) * 100 / FC2H4IN1$	Conversión global	%