

**Estudio conceptual de la conversión de la unidad de hidrodealquilación de tolueno en una
planta para la producción de etilbenceno**

José Luis Velásquez Murillo

Trabajo de grado para optar el título de Magister en Ingeniería Química

Director

José Luis Agudelo Valderrama

Ph.D. en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Maestría en Ingeniería Química

Bucaramanga

2019

Contenido

	Pág.
Introducción	14
1. Planteamiento del Problema.	16
2. Objetivos.....	19
2.1 Objetivos Generales	19
2.2 Objetivos Específicos.....	19
3. Estado del Arte.....	20
3.1 Simulación de procesos.....	20
3.2 Producción de etilbenceno	21
4. Marco Teórico.....	24
4.1 Unidad de hidrodealquilación de tolueno, U1600	24
4.2 Síntesis de etilbenceno.....	26
4.3 Mecanismo de reacción.....	28
4.4 Revisión de datos de operación de principales equipos instalados en U1600	30
4.4.1 Intercambiadores.....	31
4.4.2 Reactor R1601	33
4.4.3 Torre Estabilizadora T1601.	34
4.4.4 Horno H1601	35
4.4.5 Separador D1601.	36

4.5 Catálisis.....	37
4.5.1 Propiedades de un Catalizador.....	38
4.5.2 Catalizador empleado.....	39
4.6 Generalidades del modelado en ASPEN HYSYS®	40
4.6.2 Bases iniciales para la simulación.....	41
5. Metodología	43
5.1 Determinación de las condiciones iniciales de operación.....	44
5.1.1 Recolección de datos.....	44
5.1.2 Elección de la tecnología.	44
5.1.3 Parámetros de simulación.	46
5.2 Reconversión de la unidad Hydeal a planta de etilbenceno.....	47
5.2.1 Validación del modelo.	48
5.2.2 Análisis de sensibilidad.....	50
5.3 Caso de negocio de la reconversión de la unidad hydeal.....	54
5.3.1 Análisis de inversión, utilidades, demanda y oferta.	54
5.3.2 Evaluación costos beneficios.	54
6. Resultados.	55
6.1 Validación del modelo.	55
6.2 Reconversion de la unidad Hydeal 1600 a planta de etileno.	60
6.2.1 Sistema de reacción.....	62
6.2.2 Sistema de separación.	70
6.2.3 Sistema de precalentamiento.....	77
6.2.4 Principales reformas a efectuar en la unidad U1600.	81

6.3 Evaluación económica.	83
6.3.1 Cantidad producida.	83
6.3.2 Precio del producto.	83
6.3.3 Inversión económica.	86
6.3.4 Valor presente neto (VPN) y tasa interna de retorno (TIR).	88
7. Conclusiones	89
Referencias Bibliográficas	91

Lista de Figuras

	Pág.
<i>Figura 1.</i> Diagrama planta Aromáticos GRB (ECOPETROL S.A, 2012)	15
<i>Figura 2.</i> Rutas de procesamientos del benceno.	18
<i>Figura 3.</i> Esquema de Proceso Lummus UOP EBOne	22
<i>Figura 4.</i> Diagrama U1600 HYDEAL	24
<i>Figura 5.</i> Balance de masa de la Unidad U1600	26
<i>Figura 6.</i> Diagrama síntesis de etilbenceno.....	26
<i>Figura 7.</i> Rutas de reacción en la producción de etilbenceno.	28
<i>Figura 8.</i> Rutas de reacción en la producción de etilbenceno.	30
<i>Figura 9.</i> Intercambiadores de tubos y carcasa.	31
<i>Figura 10.</i> Reactor R1601 [GRB]	33
<i>Figura 11.</i> Torre Estabilizadora T1601.	34
<i>Figura 12.</i> Horno H1601 [GRB].	35
<i>Figura 13.</i> Tambor Separador D1601 [GRB].....	36
<i>Figura 14.</i> Forma zeolita tipo Beta.....	40
<i>Figura 15.</i> Metodología empleada en la realización del trabajo.	43
<i>Figura 16.</i> Esquema empírico de construcción de planta.....	45
<i>Figura 17.</i> Metodología para los parámetros de simulación.	46
<i>Figura 18.</i> Esquema desarrollo conceptual de la planta etilbenceno.....	47

<i>Figura 19. Metodología Análisis de sensibilidad.</i>	50
<i>Figura 20. Parámetros ajuste Torres.....</i>	51
<i>Figura 21. Metodología para el sistema de calentamiento.</i>	53
<i>Figura 22. Topología producción de Benceno a partir de la hidrodesalquilación de Tolueno Aspen HYSYS.</i>	55
<i>Figura 23. Zona de Estabilización T1601: a) Diagrama grande de control y b) En el ambiente de simulación Aspen HYSYS.....</i>	56
<i>Figura 24. Datos históricos carga de crudo año 2013.</i>	57
<i>Figura 25. Convergencia de la Torre T1501.</i>	58
<i>Figura 26. Convergencia de la Torre T1502.</i>	59
<i>Figura 27. Sistema Entrada - Salida.</i>	61
<i>Figura 28. Sistema Entrada- Salida; distribución de tres zonas.</i>	61
<i>Figura 29. Sistema de reacción sin reciclo.....</i>	62
<i>Figura 30. Convergencia del reactor sin reciclo.....</i>	62
<i>Figura 31. Variación de la presión en el sistema de reacción: a) conversión a diferentes presiones y b) selectividad efluente del R1601.....</i>	63
<i>Figura 32. Conversión a diferentes temperaturas.....</i>	64
<i>Figura 33. Relación carga etileno fija variando cantidad de benceno.....</i>	65
<i>Figura 34. Relación carga variando cantidad de etileno – benceno fijo. a) % Conversión R1601 a diferentes relaciones Benceno/etileno b) fracción molar al efluente del reactor variando el etileno.</i>	66
<i>Figura 35. Variación del reciclo como carga al reactor.</i>	67
<i>Figura 36. Efluente R1601 con reciclo y variando temperatura de la carga</i>	68

<i>Figura 37.</i> Reciclo con variación de etileno de carga.	69
<i>Figura 38.</i> Sistema entrada – salida con valores y criterios de entrada.....	70
<i>Figura 39.</i> Sistema entrada-salida, zona de reacción.	70
<i>Figura 40.</i> Diagrama de procesos Tambor Separador D1601.	71
<i>Figura 41.</i> Convergencia del Tambor Separador D1601.....	71
<i>Figura 42.</i> Torre T1601 manual de operación GRB.....	73
<i>Figura 43.</i> Convergencia Torre T1601.	73
<i>Figura 44.</i> Convergencia de la Torre T1503.	75
<i>Figura 45.</i> Convergencia de la Torre T1505	77
<i>Figura 46.</i> Sistema entrada-salida, zona de precalentamiento.	77
<i>Figura 47.</i> Diagrama de la unidad 1600 Integrado [GRB].	78
<i>Figura 48.</i> Convergencia del Horno H1601.	79
<i>Figura 49.</i> Planta productora ambiente Aspen HYSYS.	80
<i>Figura 50.</i> Instalación línea de etileno.	82
<i>Figura 51.</i> Proyección de precios	83
<i>Figura 52.</i> Esquema del departamento de Planeación y Programación de la Producción.	84
<i>Figura 53.</i> Valor Presente Neto para los años evaluados (2020-2024).	89

Lista de Tablas.

	Pág.
Tabla 1. <i>Mecanismo de reacción.</i>	29
Tabla 2. <i>Datos de operación de los intercambiadores [GRB].</i>	31
Tabla 3. <i>Condiciones de diseño del reactor R1601 [GRB].</i>	34
Tabla 4. <i>Condiciones de operación de la torre T1601 [GRB].</i>	35
Tabla 5. <i>Condiciones de operación Horno H1601</i>	36
Tabla 6. <i>Datos de operación Tambor Separador D1601 [GRB]</i>	37
Tabla 7. <i>Datos de construcción de la torre T1501.</i>	49
Tabla 8. <i>Datos de construcción de la torre T1502.</i>	49
Tabla 9. <i>Datos de construcción de la torre T1601.</i>	49
Tabla 10. <i>Datos de construcción de la torre T1503.</i>	52
Tabla 11. <i>Valores obtenidos en la torre T1601.</i>	56
Tabla 12. <i>Comparativo de producción.</i>	59
Tabla 13. <i>Separación Tolueno T1502 unidad U1500.</i>	60
Tabla 14. <i>Valores reportados del tambor flash D1601.</i>	72
Tabla 15. <i>Valores obtenidos en la torre T1601.</i>	74
Tabla 16. <i>Producción de cima Torre T1503.</i>	75
Tabla 17. <i>Producción Torre T1504</i>	76
Tabla 18. <i>Resultados obtenidos Horno H1601 e intercambiadores servicios industriales.</i>	79

Tabla 19. <i>Margen de utilidades</i>	85
Tabla 20. <i>Precios de venta proyectados del producto de interés para el tiempo de estudio</i>	86
Tabla 21. <i>Inversión necesaria para la adecuación del Reactor R1601</i>	86
Tabla 22. <i>Costos de operación</i>	87
Tabla 23. <i>Matriz flujo Reconversión</i>	88

Resumen

TÍTULO: ESTUDIO CONCEPTUAL DE LA CONVERSIÓN DE LA UNIDAD DE HIDRODEALQUILACIÓN DE TOLUENO EN UNA PLANTA PARA LA PRODUCCIÓN DE ETILBENCENO*

AUTORES: JOSE LUIS VELÁSQUEZ MURILLO**

PALABRAS CLAVES: Reconversión, catalizador, conversión, selectividad, sistema entrada – salidas, Aspen HYSYS, evaluación económica.

DESCRIPCION:

En este proyecto se realizó un estudio conceptual para la reconversión de la unidad U1600 (Hydeal), de una planta productora de benceno que empleaba el mecanismo de hidrodeshidrogenación de tolueno a una planta productora de etilbenceno mediante el mecanismo de alquilación de benceno con etileno. Todo bajo la premisa de mantener el esquema original de la planta. Bajo esta filosofía se identificaron y se propusieron reformas significativas para maximizar la producción, proponiendo un sistema de entradas – salidas y tres zonas (sistema de precalentamiento, reacción y separación) para abarcar la comprensión global del caso de estudio.

Las posibles modificaciones a la unidad U1600 fueron adaptadas y evaluadas mediante el software Aspen HYSYS. Dichas reformas fueron identificadas en el sistema de reacción principalmente, debido a la notable diferencia de la cinética de la reacción y las condiciones con que se logran la producción de etilbenceno. De acuerdo a esto, el equipo que prima es el reactor R1601. Con las adecuaciones propuestas se alcanzaría una conversión del 90%. El análisis técnico-económico permitió validar la viabilidad en términos monetarios la iniciativa, mostrando una tasa interna de retorno del 68% y que la recuperación de la inversión se podría lograr en el primer año, ofreciendo un margen de ganancias en los cuatro años subsiguientes a la implementación del proyecto.

* Proyecto de grado

** Facultad de Ingenierías Físico Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Maestría en Ingeniería Química. Director: José Luis Agudelo Valderrama

Abstract

TITLE: CONCEPTUAL STUDY OF THE CONVERSION OF THE HYDRODEALQUILATION UNIT OF TOLUENO IN A PLANT FOR THE PRODUCTION OF ETHYLBENZENE *

AUTHORS: JOSE LUIS VELÁSQUEZ MURILLO**

KEY WORDS: Reconversion, catalyst, conversion, selectivity, departures system, Aspen HYSYS, economic evaluation.

DESCRIPTION:

In this project, a conceptual study was carried out for the conversion of the unit U1600 (Hydeal), of a benzene producing plant that uses the mechanism of hydrodesalkylation of toluene and an ethylbenzene production plant through the mechanism of alkylation of benzene with ethylene. All under the premise of maintaining the original scheme of the plant. Under this philosophy, reforms were identified and proposed to maximize production, propose a system of inputs - outputs and three zones (preheating, reaction and separation system) to cover the overall understanding of the case study,

Possible modifications to the U1600 unit were adapted and evaluated using the Aspen HYSYS software. These reforms were identified in the reaction system mainly, due to the remarkable difference of the kinetics of the reaction and the conditions under which the production of ethylbenzene is achieved. According to this, the equipment that prevails is reactor R1601. With the proposed adjustments, a conversion of 90%. The technical-economic analysis validates the viability in monetary terms of the initiative, shows an internal rate of return of 68% and the recovery of the investment can be achieved in the first year, a margin of profit is offered in the following four years to the implementation of the project

* Bachelor Thesis

** Facultad de Ingenierías Físico Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Maestría en Ingeniería Química. Director: José Luis Agudelo Valderrama

Introducción

El complejo de aromáticos del Departamento de Petroquímica de la Refinería de Barrancabermeja (GRB) está compuesto por cinco unidades de proceso, en las cuales se procesa nafta debutanizada proveniente de las unidades de destilación atmosférica de crudos. Esta carga se procesa en la unidad 1300, en donde se realizan procesos fisicoquímicos tales como prefraccionamiento por destilación, hidrotratamiento y reformado catalítico. Posteriormente, se realiza la separación de aromáticos y no aromáticos por extracción líquido-líquido en la unidad U1400 y fraccionamiento por destilación en la unidad U1500 (ver Figura 1). Con estos procesos se obtienen disolventes aromáticos tales como benceno, tolueno, xilenos, aromáticos pesados y ciclohexano. El complejo también cuenta con una unidad de hidrodeshidrogenación de tolueno, U1600 (unidad “*Hydeal*”) para la obtención de benceno que, actualmente, se encuentra fuera de servicio de forma permanente. Adicionalmente, se cuenta con una unidad de hidrogenación de benceno, la U1700 (unidad “*Hydrar*”).

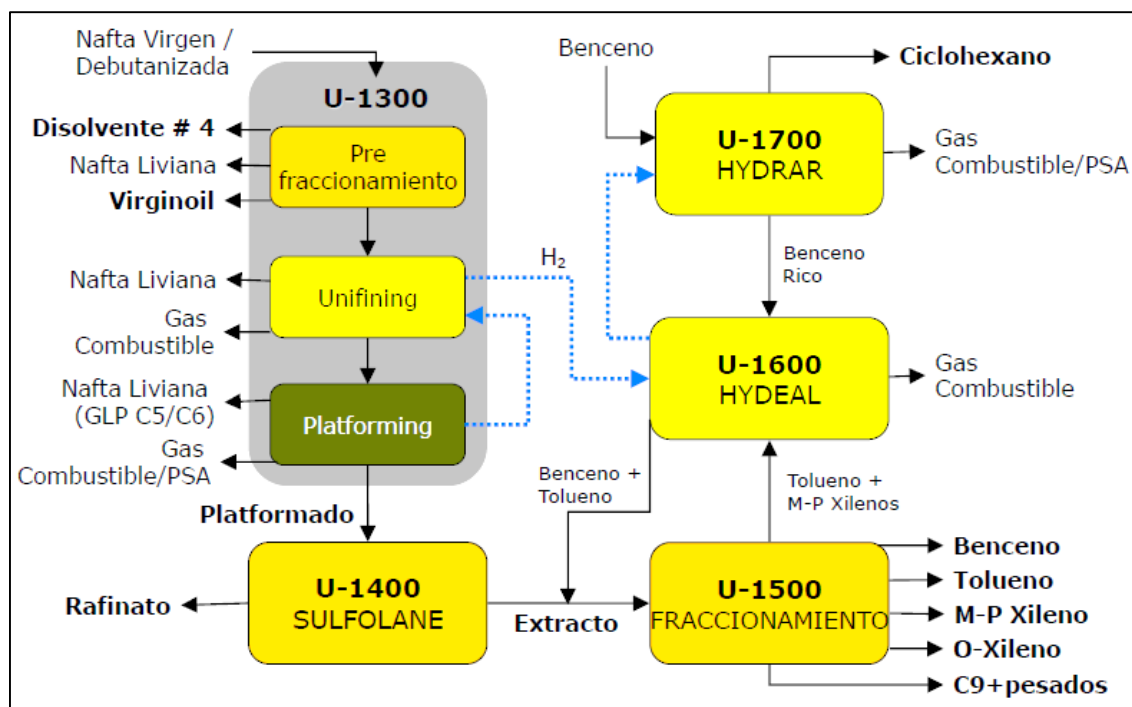


Figura 1. Diagrama planta Aromáticos GRB (ECOPETROL S.A, 2012)

En este trabajo se realizó como alternativa para lograr mayor sinergia en la infraestructura de la Refinería de Barrancabermeja, el estudio conceptual para la reconversión de la unidad HYDEAL (Unidad U1600) del complejo de aromáticos, encargada en la hidrodesalquilación de tolueno para la producción de benceno y xilenos, a una planta productora de etilbenceno mediante la alquilación de benceno con etileno. Supone un reto ingenieril asumir esta alternativa ante la notable diferencia de dos reactores en la filosofía comercial y su posterior adaptación en el funcionamiento de dos reactores en uno (filosofía original). La implementación de la alternativa implica ajustar las condiciones operativas en este sistema de reacción hacia la producción óptima de etilbenceno, como son: temperatura, presión, relación de carga y reciclo, los cuales determinan la conversión y la selectividad. Gracias a esto, se maximizarán las márgenes de producción y, en última instancia, la factibilidad de la reconversión.

Dentro del contexto expuesto, las herramientas computacionales permiten tener una visión virtual, minimizando la inversión o el riesgo de inversión, precisamente sobre los escenarios en donde haya lugar una investigación. La herramienta preferencial para este caso de estudio es *Aspen Hysys* que gracias a su matriz gráfica, el grado de respuesta, la evaluación de variables y la multivariedad de planos subyacentes dentro de su capacidad predictiva, regida por la sincronía en la aplicación de los modelos termodinámicos, ecuaciones, paquetes y balances, hacen que sea una fuente confiable y respetada dentro de la comunidad industrial (Caballero *et al.* 2007).

Este trabajo permite validar diferentes escenarios frente a la posibilidad de obtener mejores rendimientos y eficiencias en la operación de las unidades del complejo aromáticos. Está limitado dentro del campo conceptual por lo que a futuro supone el desarrollo de un diseño detallado e interdisciplinario para la puesta en marcha del diseño propuesto como base inicial.

1. Planteamiento del Problema.

Debido a las regulaciones ambientales y ocupacionales que actualmente se rigen en Colombia (Resolución 2254 del 01 de noviembre 2017 y Resolución 1013 de 25 marzo de 2008), hacen que la producción, venta, transporte y manipulación del benceno sea cada vez más controlada, requiriendo mayor atención en los factores que involucran el procesamiento de éste como materia prima para la transformación en otros productos. Como consecuencia la obtención del benceno en la refinería de Barrancabermeja ha disminuido a tal punto del cierre o suspensión de la producción en la Unidad U1600. Una de las medidas iniciales en la aplicación del benceno y que justificaba su producción era la dilución en gasolina para aumentar el octanaje, pero debido a sus propiedades

cancerígenas (Humberto J. 2009) y las nuevas legislaciones acerca de su contenido permitido en la gasolina esta corriente cada vez tiene menor valor en la línea de refinación.

A su vez la obtención de benceno como subproducto en otros procesos tales como; el reformado catalítico y la pirólisis de las gasolinas, compensa la producción en la unidad U1600, pero estos procesos se encuentran controlados normalmente por la termodinámica, lo que conlleva a que exista un desequilibrio entre la producción y la demanda actual en el mercado. Por lo tanto, en la refinería hay un exceso de obtención de benceno ya sea por producción directa o por producción indirecta y se han tenido que tomar medidas en la disposición de esta materia prima, llegando al caso en bajar los índices de precios de venta para hacer más atractiva al mercado la adquisición del benceno, lo que conlleva en última instancia conlleva a menores ganancias para la GRB.

Los compuestos aromáticos presentan una gran variedad de aplicaciones para la industria química y petroquímica, puesto como se indicó son materias primas para fabricar productos intermedios en la producción de monómeros, plásticos, detergentes, productos farmacéuticos, explosivos, etc. En la Figura 2 se presenta un esquema de las principales rutas de reacción y los productos que pueden obtener a partir del benceno.

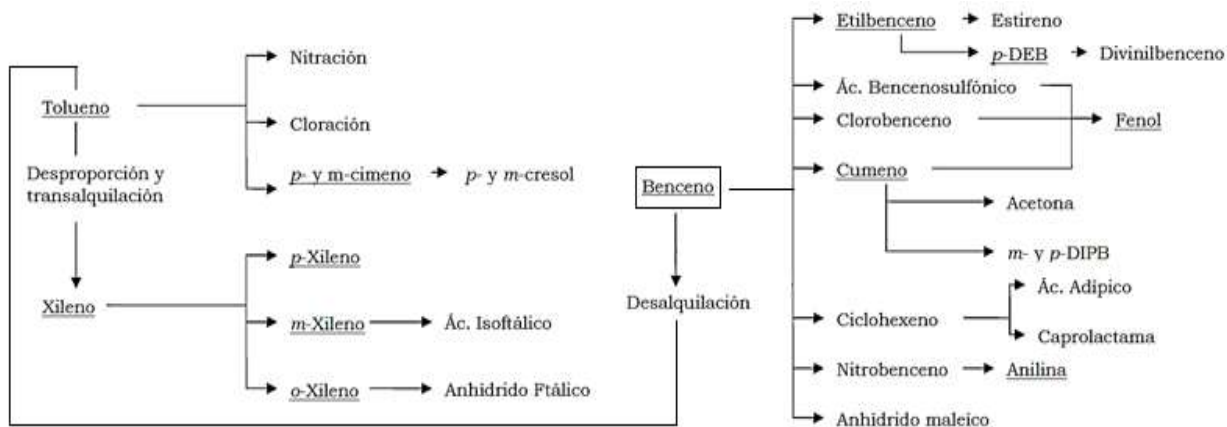


Figura 2. Rutas de procesamientos del benceno.

Entre los productos de mayor interés en la industria petroquímica se encuentra el etilbenceno, cuya importancia radica en que es precursor en la producción de estireno, así como su rol como disolvente de pintura y como intermediario importante en la industria farmacéutica. La producción de etilbenceno estimada para el 2015, a nivel mundial, es alrededor de 45 millones de toneladas métricas (Guido B., 2012).

Teniendo en cuenta la problemática del exceso de producción de benceno en la refinería y la existencia de unidades no utilizadas, el objetivo de este trabajo es evaluar conceptualmente la reconversión de la unidad U1600 a una unidad productora de etilbenceno, aprovechando la disponibilidad de los equipos, talento humano, insumos, y materias primas, para así maximizar el uso de los activos en la refinería de Barrancabermeja, considerando la alta demanda del etilbenceno y su creciente tendencia hacia la fabricación de productos de mayor impacto económico.

2. Objetivos

2.1 Objetivos Generales

Realizar una ingeniería conceptual para la conversión de la unidad U1600 HYDEAL de la planta Aromáticos de la GRB a una planta para la producción de etilbenceno.

2.2 Objetivos Específicos

- Obtener mediante simulación del proceso de producción de etilbenceno a partir de benceno y etileno, las condiciones iniciales de operación de la unidad
- Proponer la ingeniería conceptual necesaria para la reconversión de la unidad HYDEAL a una planta de producción de etilbenceno
- Elaborar caso de negocio de la reconversión de la unidad HYDEAL a una planta de producción de etilbenceno

3. Estado del Arte

3.1 Simulación de procesos

A continuación, se indican algunos reportes de trabajos de simulación enfocados a la reformación o reconversión en líneas de unidades de destilación, haciendo énfasis en la importancia de la obtención de crudos y productos de gran valor comercial (Saraf D. *et al*, 2002). Por otra parte, Bulasara y colaboradores exponen la simulación de una unidad de destilación considerando tres tipos de crudo como alimento, empleando Aspen plus como herramienta computacional, (Bulasara V. *et al*, 2010)- También Ali y colaboradores aplicaron las ventajas de Aspen plus como software de simulación, pero dirigido a un tren de torre preflash y torre atmosférica, analizando el efecto de una mezcla de crudos como alimento (Ali F. *et al*, 2013). Así mismo, autores como Gadalla reportan la optimización de una columna de destilación, maximizando el empleo de equipos al realizar integración energética, valorando las interacciones entre el proceso y el sistema de recuperación de calor (Gadalla M. *et al*, 2013). Por otro lado, Yesid y colaboradores proponen un modelo para la reconversión de la planta Viscorreductora como unidad destiladora de crudo de la refinería de Barrancabermeja (Yesid G., 2016), encontrando condiciones óptimas de operación para torres de destilación atmosférica. Adicionalmente Vega y colaboradores, simularon la operación de una torre pre-flash usando Aspen Hysys, realizando un análisis de sensibilidad luego de reubicar los reflujos circulantes de la torre (M. Vega, 2012)

3.2 Producción de etilbenceno

Para la producción de etilbenceno existen diferentes procesos industriales. El proceso Mobil Badger fue un modelo introducido en 1980, que actualmente extensamente utilizado en la síntesis de etilbenceno catalizada por zeolitas. Desde su aplicación comercial en 1981, cerca de 35 licencias han sido otorgadas, con una capacidad de producción anual de 8 millones de toneladas métricas. En este proceso el benceno es alquilado en un reactor de lecho fijo, con etileno en fase gaseosa, usando como base una zeolita tipo ZSM-5 como catalizador. Las condiciones del proceso usaban un rango de temperatura de 370°C a 420 °C y una relación molar de benceno a etileno de 1:4 y la presión oscilaba entre 50 y 390 psig (Bellussi G., 2009).

El proceso propuesto por UOP es el proceso Lummus / UOP EBOne, proceso de alquilación en fase líquida que utiliza un catalizador basado en una zeolita (serie EB patentada a GRB). Como se observa en la Figura 3, en esta tecnología hay dos secciones de reacción, la de alquilación y la de transalquilación. Como subproducto se obtienen los polietilbencenos en menor proporción, por lo que se requiere realizar un reciclo para que reaccione con benceno fresco para producir más etilbenceno. Posteriormente, el efluente del reactor de alquilación y el efluente del reactor de transalquilación se fraccionan en benceno reciclado y etilbenceno producto, usando tres torres de destilaciones. Una cuarta columna se utiliza para retirar livianos y no aromáticos (Meyers, 2005).

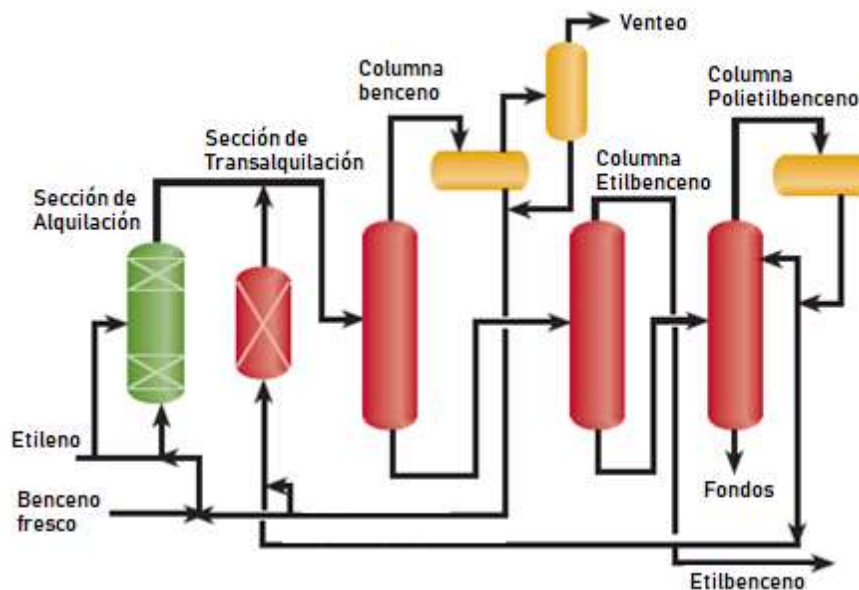


Figura 3. Esquema de Proceso Lummus UOP EBOne

En otro tipo de tecnología de producción de etilbenceno es el que ocurre en fase líquida, en donde se usan catalizadores ácidos tipo Lewis (halogenuros metálicos), como el cloruro de aluminio, y ácidos inorgánicos (ácidos tipo Brønsted), como el ácido sulfúrico, ácido fluorhídrico y ácido fosfórico soportado (Hoelderich. *et al*, 1999).

El uso industrial de catalizadores ácidos en fase líquida ofreció grandes ventajas, tales como: alta actividad y selectividad a bajas temperaturas, bajos costos de inversión y mayor flexibilidad (Haag *et al*, 1997) así como ciertas desventajas relacionadas con la difícil separación del catalizador y el producto, la corta vida del catalizador, la necesidad de otro catalizador como promotor, la continua generación de residuos de catalizador, ya que el mismo es utilizado sólo una vez, la alta toxicidad y corrosividad de los reactivos, la difícil manipulación y tratamiento de los residuos del proceso, la eliminación de residuos y sobre todo los problemas ambientales asociados (Stadelhofer *et al*, 1988).

Otro de los procesos en fase líquida más usados es el proceso catalítico Monsanto-Lummus, el cual se realiza a temperaturas entre 260 °F y 440 °F y presiones entre 43 psig y 145 psig. Este proceso utiliza aproximadamente 0,25 kg de AlCl_3 por cada 1000 kg de etilbenceno producido. Un requisito importante para que se lleve a cabo es que el etileno no esté en exceso para minimizar la producción de polietilbencenos. Para ello el etileno se introduce de manera controlada en pequeñas cantidades para que esté siempre en defecto. En estas condiciones se consigue una selectividad a etilbenceno en torno al 99%. Los principales inconvenientes de este proceso es que se requiere materiales resistentes a la corrosión, y además requiere separar por lavados acuosos y básicos el catalizador que queda disuelto o suspendido en el producto de reacción, y luego secar el benceno que no ha reaccionado antes de reciclarlo (Arrol, 1998).

4. Marco Teórico

4.1 Unidad de hidrodealquilación de tolueno, U1600

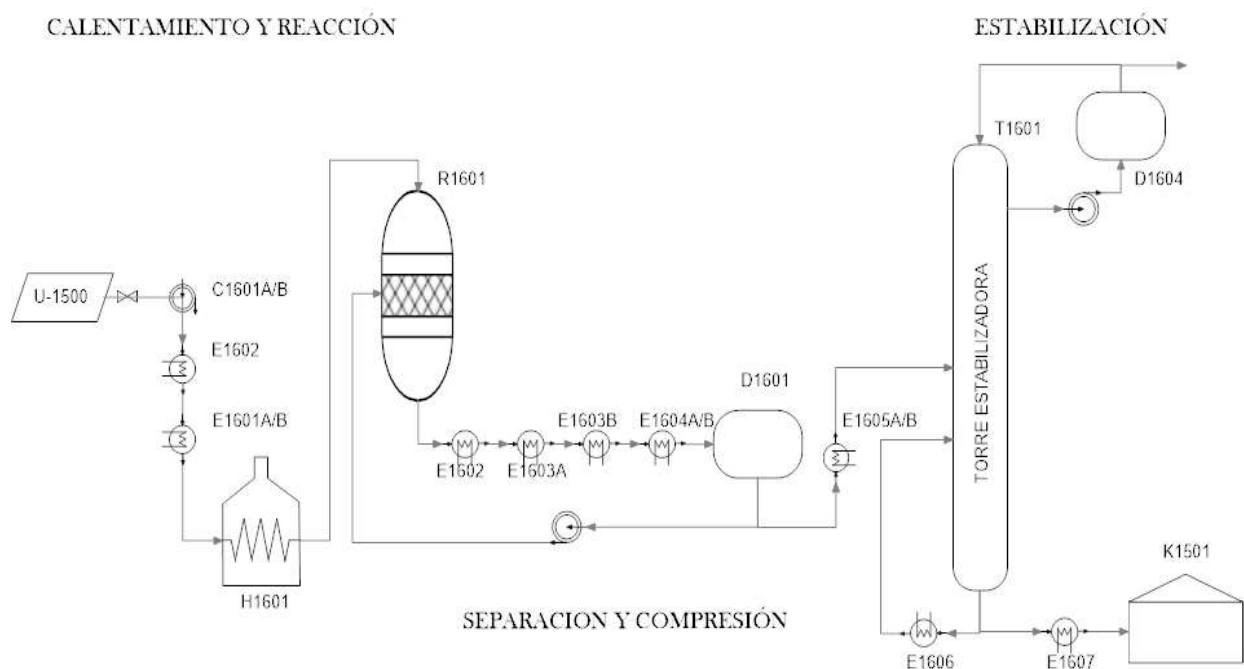
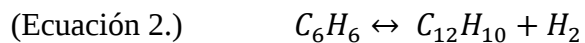
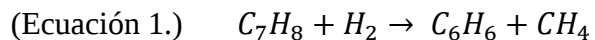


Figura 4. Diagrama U1600 HYDEAL

Actualmente, la Refinería de Barrancabermeja cuenta con la unidad U-1600 (ver Figura 4) que convierte tolueno y xilenos a benceno. Esto se logra retirando el grupo metilo que llega en la carga gracias a la reacción química de hidrodesalquilación, la cual posee el siguiente mecanismo de reacción (Gallegos J., 1998):



En la GRB este proceso se divide en tres zonas.

- Zona de calentamiento y reacción.

Inicialmente, se carga el tolueno, proveniente de la unidad U1500, con hidrógeno de los compresores C1601A/B al intercambiador E1602 para luego entrar al horno H1601 donde alcanza la temperatura de reacción necesaria de alrededor de 1150 °F con una presión de entrada de 521 psi, para continuar al reactor R1601 y llevar a cabo la reacción de hidrodesalquilación atravesando el lecho de cerámica con la inyección de hidrógeno en exceso para evitar la coquización adentro.

- Zona de separación y compresión

El efluente de la reacción es enfriado por un tren de intercambiadores hasta una temperatura de 252 °F con la finalidad de condensar la corriente cuya composición es en mayor proporción benceno, tolueno y difenilo, para luego entrar al tambor separador D1601 a 113 °F, que separa benceno en gran porción, tolueno y difenilo del hidrógeno. Una parte se purga para eliminar el metano formado, y otra parte de la corriente de mezcla rica en benceno se recicla al reactor R1601 y la otra parte de la mezcla benceno, tolueno y difenilo sale hacia la torre T1601.

- Zona de estabilización.

La mezcla entra a la torre estabilizadora en donde se separan por separación directa, los vapores de hidrocarburo por la cima y la corriente de fondos se envía hacia el tanque de almacenamiento K1501 su separación final ocurre en la unidad de fraccionamiento U1500, dicha unidad se obtienen todos los productos finales.

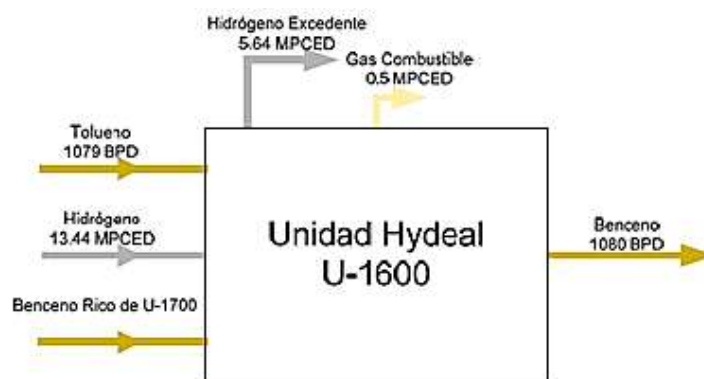


Figura 5. Balance de masa de la Unidad U1600

En la Figura 5 se muestra el balance general de la unidad para una producción de benceno de 1080 BPD, para ello se carga Tolueno 1079 BPD.

4.2 Síntesis de etilbenceno.

En la Figura 6 se presenta un diagrama de la síntesis de etilbenceno a nivel comercial.

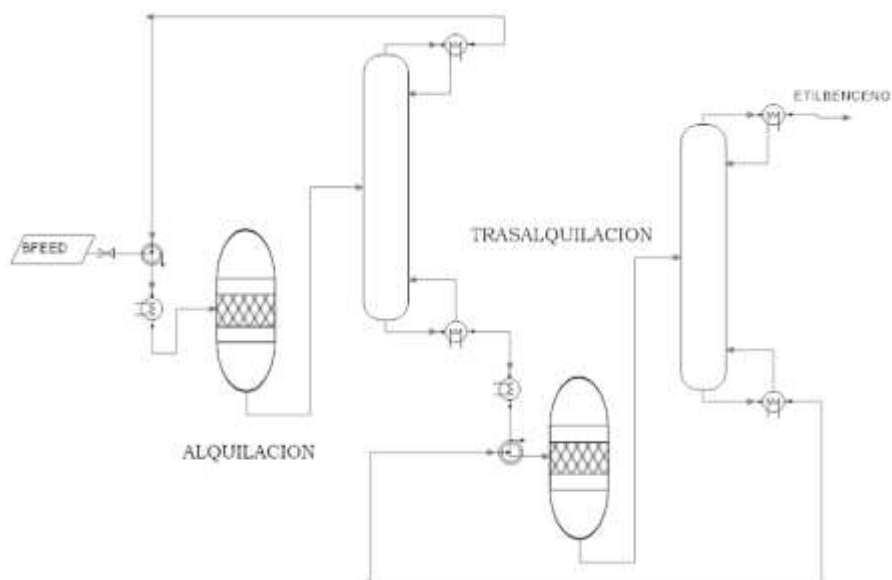
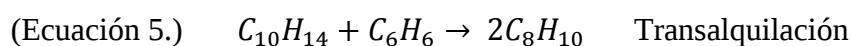
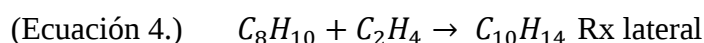
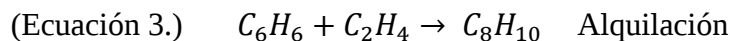


Figura 6. Diagrama síntesis de etilbenceno.

Para plantear la alternativa de obtención de etilbenceno usando la estructura existente en el complejo aromáticos de la refinería, se identificaron y se seleccionaron los datos requeridos para el desarrollo del modelo, basado en datos de reacción reportados por otros autores. Para el caso presente se toman los datos publicados por William y colaboradores. (Pierson, 1993), en cuyo modelo propone el siguiente mecanismo de reacción.



La reacción se planteó catalizada en fase líquida a condiciones de presión de 270 psig y 160°F. rango dentro del cual cumple para los estudios publicados por Luyben (Yi-feng Shi, 2001). La razón principal para la elección de este modelo es el ajuste de la tipología de la planta, ante los equipos disponibles y las condiciones de operación en contrastes con los modelos ofrecidos en el capítulo anterior, además de la patente licenciada a la GRB, el cual se describe a continuación.

La sección de reacción consiste de dos reactores: un primer reactor de lecho empacado donde ocurre la alquilación para producir etilbenceno, la cual consiste de dos reacciones en serie donde se obtiene como coproducto dietilbenceno, y los alimentos son benceno y etileno. Las reacciones ocurren en fase gaseosa; por tratarse de exotérmica libera gran cantidad de energía que puede ser utilizada en otra unidad. El benceno no convertido se separa en una columna de destilación para ser recirculada a este primer reactor y el dietilbenceno pasa a un segundo reactor donde se realiza la transalquilación del dietilbenceno donde se obtiene más etilbenceno y el flujo de salida de este reactor pasa por otra columna de destilación donde se separa el etilbenceno purificándose el producto deseado, etilbenceno. Durante este proceso las corrientes reciben varios acondicionamientos de temperatura para los cuales se utilizan dos intercambiadores de calor

previos al primer reactor, donde cada intercambiador de calor acondiciona cada uno de los dos reactivos y un tercer intercambiador que acondiciona la entrada de los reactivos al segundo reactor (T.F. Degnan Jr., 2001).

4.3 Mecanismo de reacción

En el estudio de la reconversión lo ideal es mantener la topología intacta de la planta productora de benceno, es por ello que ante los equipos presentes hay que ajustar todos los parámetros para la producción de etilbenceno. Una diferencia notable con respecto a la tecnología original es que se deben emplear dos reactores en vez de uno, lo cual hace necesario que el mecanismo de reacción se de en su totalidad en el reactor R1601 propio de la Unidad 1600 (ver Figura 7). Además, según las especificaciones del datasheet es importante tener en cuenta que el reactor R1601 tiene como temperatura máxima de diseño 1450 °F, por ello estamos limitados a que la temperatura máxima alcanzada de reacción no debe superar este valor.

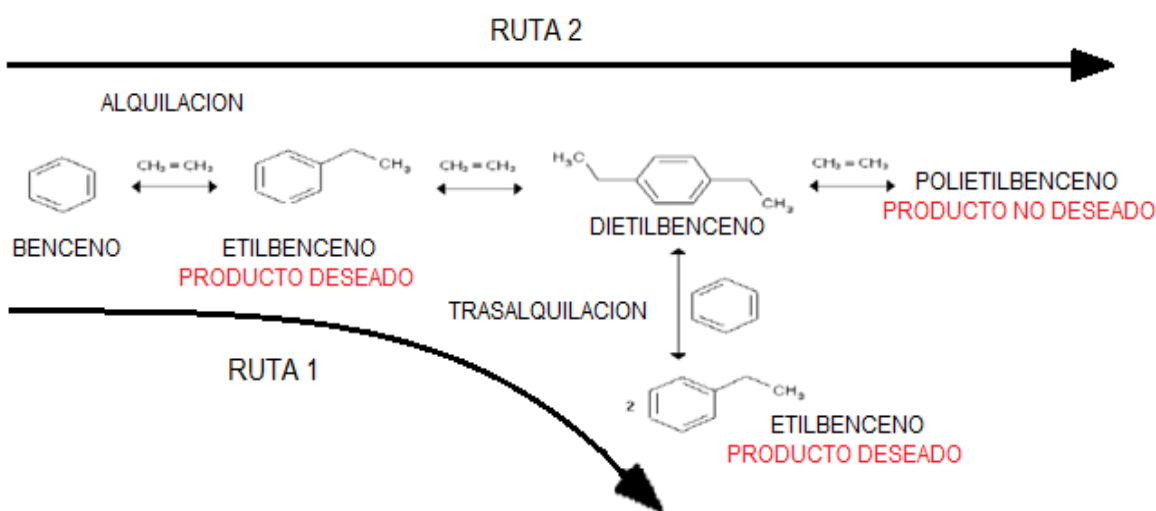


Figura 7. Rutas de reacción en la producción de etilbenceno.

Para producir la mayor cantidad de etilbenceno posible es necesario optar por suministrar benceno en exceso y mantener las proporciones fijas de etileno, esto quiere decir que nuestro reactivo límite para el caso de estudio es el etileno. Según se muestra en la Figura 7, con una mayor proporción de etileno se incrementa la producción de dietilbenceno y a su vez la producción de polietilbenceno siguiendo el patrón de la Ruta 2. En contraste, con una mayor proporción de benceno se favorece la Ruta 1, ruta deseada para el caso de estudio. Se espera que en la producción de etilbenceno se obtengan productos secundarios (ver Tabla 1) (Sundaram, 1991), por ende se ajustaron los parámetros de selectividad para favorecer el producto de interés. Los procesos de transalquilación con el exceso de benceno presente y el aumento de la conversión, se logran gracias al reciclo efectuado hacia el reactor R1601 cuya capacidad permite una gran carga. Las reacciones estipuladas para el desarrollo conceptual se presentan en la siguiente Tabla 1.

Tabla 1.

Mecanismo de reacción.

Reacción	<i>Ea</i> (KJ/mol)	<i>K</i>
$C_6H_6 + C_2H_4 \rightarrow (C_2H_5)C_6H_5$	63,4	$1,528 \times 10^6$
$(C_2H_5)C_6H_5 + C_2H_4 \rightarrow (C_2H_5)_2C_6H_4$	47,0	$2,778 \times 10^7$
$(C_2H_5)_2C_6H_4 + C_2H_4 \rightarrow (C_2H_5)_3C_6H_3$	68,3	$1,528 \times 10^6$
$C_6H_6 + (C_2H_5)_2C_6H_4 \rightarrow 2(C_2H_5)C_6H_5$	47,4	10000
$C_6H_6 + C_2H_4 \rightarrow (o, m, p)(CH_3)_2C_6H_4$	o 57,5; m 54,1; p 54,0	$0,348 \times 10^5$
$(C_2H_5)_3C_6H_3 + C_6H_6 \rightarrow (C_2H_5)_2C_6H_4 + (C_2H_5)C_6H_5$	48,9	$1,008 \times 10^5$
$C_6H_6 + C_3H_6 \rightarrow (C_3H_7)C_6H_5$	71,7	$1,205 \times 10^5$

Nota. Adaptado de: (Yuliya Chsherbakova, 2007); (Stromberg, 1988)

En la producción de etilbenceno se favorecen muchas reacciones paralelas, para nuestro caso de estudio se dio pie a la implementación de varias reacciones con la intención de acercarse a los parámetros reales en condiciones de operación. En la Tabla 1 se expresan los valores de energías de activación (E_a) y las constantes de equilibrio (K); al igual en la Figura 8 se muestra las diferentes opciones de los mecanismos en lo que hay lugar a las reacciones.

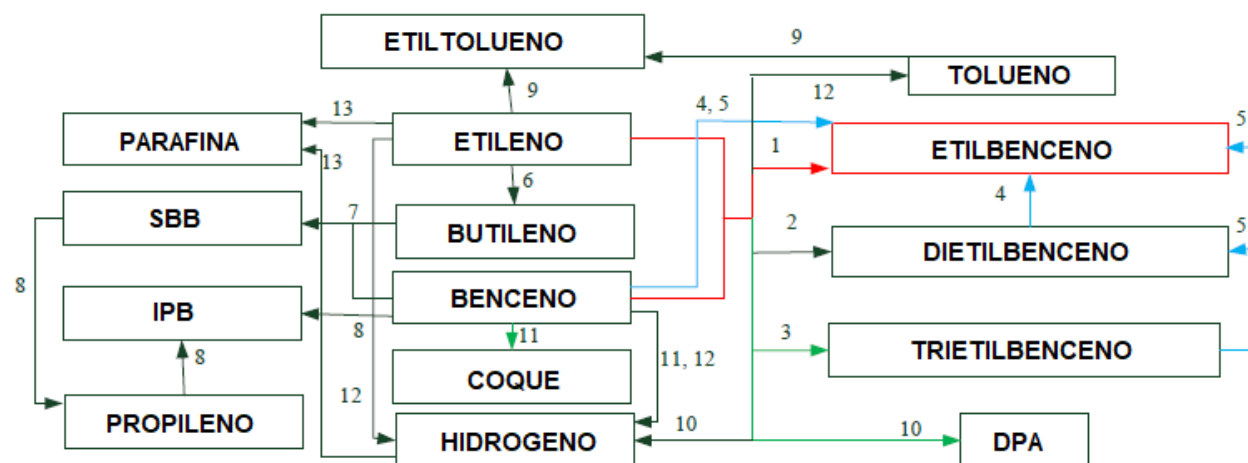


Figura 8. Rutas de reacción en la producción de etilbenceno.

4.4 Revisión de datos de operación de principales equipos instalados en U1600

Ante la disponibilidad de los equipos en la unidad U1600, se busca mantener la misma topología de la planta para la producción de etilbenceno los principales equipos instalados en la unidad, son R1601, intercambiadores del tren de precaliente, H1601, T1601 y SP1601, cuyas especificaciones de operación se presentan a continuación.

4.4.1 Intercambiadores. Haciendo una revisión de los diferentes intercambiadores disponibles se hace alusión a los parámetros de operación, tales como presión, temperatura y flujos, (ver Tabla 2) empleados en el estudio de la topología de la planta U1600.

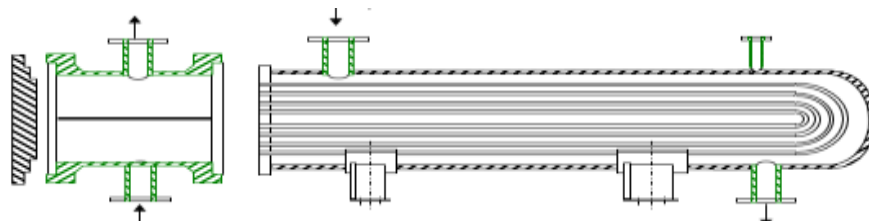


Figura 9. Intercambiadores de tubos y carcasa.

Tabla 2.

Datos de operación de los intercambiadores [GRB].

LADO CASCO			LADO TUBOS	
SE-1601A PRECALENTAMIENTO	Flujo (Lb/h)	24048	Flujo (Lb/h)	41648
	T. Diseño (°F)	1025	T. Diseño (°F)	1175
	Presión Diseño (psi)	700	Presión Diseño (psi)	625
SE-1601B PRECALENTAMIENTO	Flujo (Lb/h)	24048	Flujo (Lb/h)	41648
	T. Diseño (°F)	845	T. Diseño (°F)	1025
	Presión Diseño (psi)	700	Presión Diseño (psi)	625
SE-1602 PRECALENTAMIENTO	Flujo (Lb/h)	24048	Flujo (Lb/h)	41648
	T. Diseño (°F)	700	T. Diseño (°F)	500
	Presión Diseño (psi)	900	Presión Diseño (psi)	1050

LADO CASCO			LADO TUBOS	
SE-1603A PRECALENTAMIENTO	Flujo (Lb/h)	41648	Flujo (Lb/h)	405000
	T. Diseño (°F)	500	T. Diseño (°F)	250
	Presión Diseño (psi)	575	Presión Diseño (psi)	75
SE-1603B PRECALENTAMIENTO	Flujo (Lb/h)	41648	Flujo (Lb/h)	405000
	T. Diseño (°F)	500	T. Diseño (°F)	250
	Presión Diseño (psi)	575	Presión Diseño (psi)	75
SE-1604AB	Flujo (Lb/h)	14238	Flujo (Lb/h)	9091
	T. Diseño (°F)	650	T. Diseño (°F)	650
	Presión Diseño (psi)	500	Presión Diseño (psi)	500
SE-1605AB	Flujo (Lb/h)	9091	Flujo (Lb/h)	32000
	T. Diseño (°F)	650	T. Diseño (°F)	300
	Presión Diseño (psi)	500	Presión Diseño (psi)	500
SE-1606	Flujo (Lb/h)	41300	Flujo (Lb/h)	41648
	T. Diseño (°F)	450	T. Diseño (°F)	800
	Presión Diseño (psi)	200	Presión Diseño (psi)	600
SE-1607	Flujo (Lb/h)	2904	Flujo (Lb/h)	22500
	T. Diseño (°F)	650	T. Diseño (°F)	300
	Presión Diseño (psi)	500	Presión Diseño (psi)	500

4.4.2 Reactor R1601

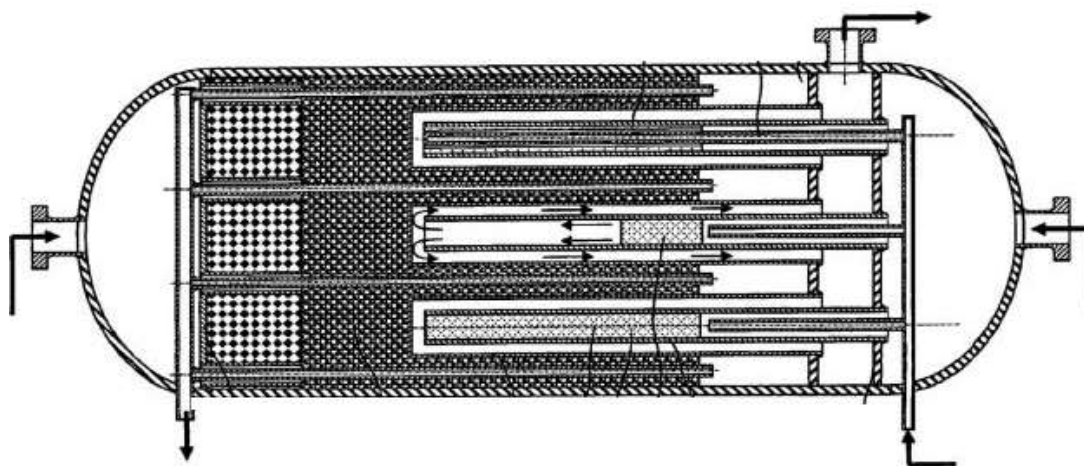


Figura 10. Reactor R1601 [GRB]

Para el reactor es necesario mencionar la condición de modificación sobre la cual se someterá en la implementación del catalizador además del doble sistema de alquilación y transalquilación. Debido a su tamaño, se postuló realizar la simulación del reactor en base a la cinética de reacción en un reactor de equilibrio con lecho empacado como compete al caso de estudio; se postuló ajustar un reciclo que permita aumentar la selectividad en la formación de etilbenceno como producto principal favoreciendo la cinética de la reacción de transalquilación y en su defecto la baja obtención de productos secundarios como dietilbencenos o polietilbencenos. La base del catalizador es zeolita, basados en las patentes y la tecnología elegida se ajusta a los equipos y a la integridad del mismo. En la Tabla 3 se exponen las condiciones de operación.

Tabla 3.

Condiciones de diseño del reactor R1601 [GRB].

	DISEÑO
Presión (psi)	658
Temperatura (°F)	750
Volumen (m3)	30

4.4.3 Torre Estabilizadora T1601.

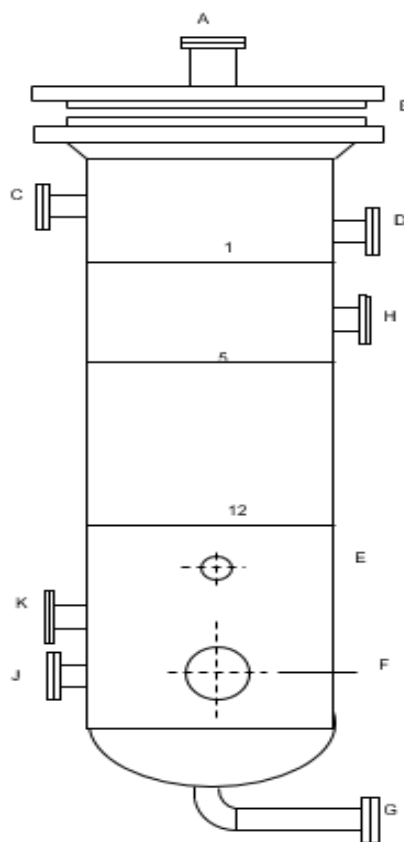


Figura 11. Torre Estabilizadora T1601.

En la torre estabilizadora es donde se da lugar la obtención del etilbenceno como producto de fondo, consiste en una torre de 27 platos, en la operación normal de la unidad U1600 el producto

de fondo es una mezcla rica de benceno con tolueno, mientras lo único que se obtiene como producto de cima o subproducto son gases usualmente empleados como combustible o gases de purga.

Tabla 4.

Condiciones de operación de la torre T1601 [GRB].

	DISEÑO	OPERACIÓN
Presión (psig)	175	140
Temperatura (°F)	450	350
Prueba Hidrostática (PSIg)	262	262

4.4.4 Horno H1601

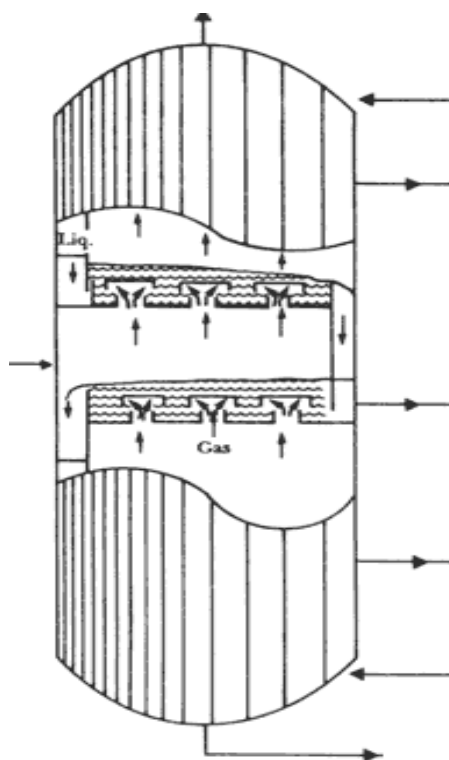


Figura 12. Horno H1601 [GRB].

El Horno H1601 es el equipo donde ocurre el calentamiento del tolueno para mantener las condiciones necesarias del reactor R1601 y las condiciones de energéticas, en cuanto a la energía de activación para la generación de benceno, en la tabla 5 se expresa las condiciones de operación de los vapores de calentamiento y los vapores de ingreso al horno.

Tabla 5.

Condiciones de operación Horno H1601

	entrada	SALIDA
Presión (psig)	600	560
Temperatura (°F)	880	1305
Flujo de Vapor (Lb/h)	24048	24048
Peso Vapor Molecular	14,85	14,85

4.4.5 Separador D1601.

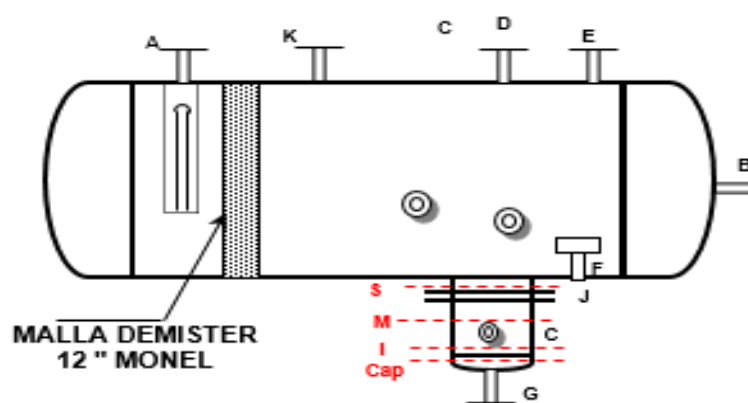


Figura 13. Tambor Separador D1601 [GRB]

Este equipo es el encargado de la separación primaria del benceno y el tolueno no convertido para posteriormente enviar una corriente de reciclo optimizando la conversión y la selección de productos hacia el benceno, a su vez otra corriente se dirige a la torre estabilizadora.

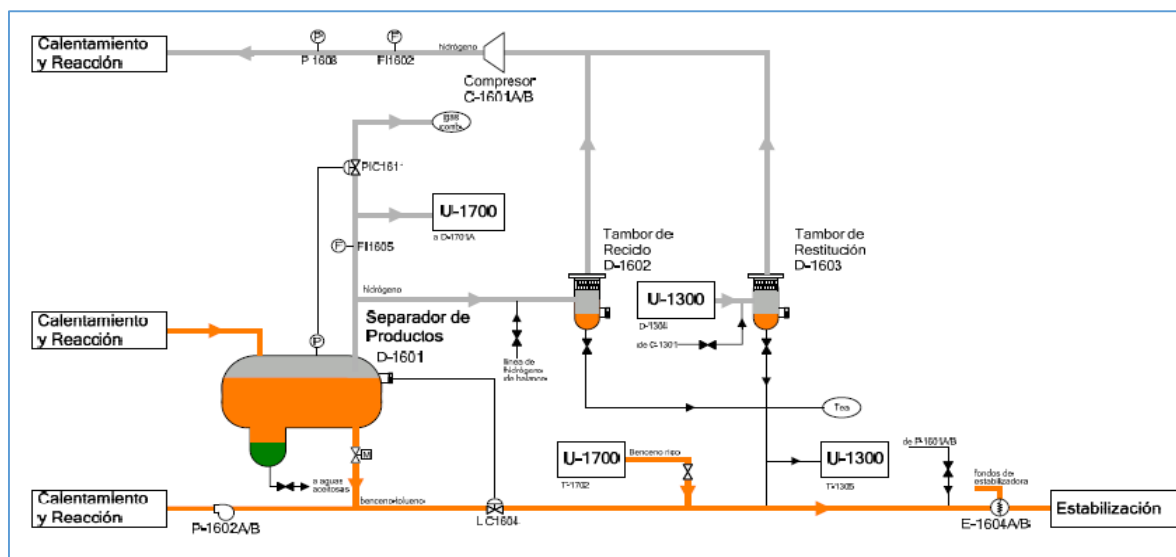


Tabla 6.

Datos de operación Tambor Separador D1601 [GRB]

	DISEÑO	OPERACIÓN
Presión (psig)	550	500
Temperatura (°F)	250	255

4.5 Catálisis

El término catálisis fue usado por primera vez por Berzelius en 1836 (Berzelius, 1835), para describir algunas reacciones de conversión y descomposición causadas por ciertas sustancias. Este efecto se describió en aquella época como una nueva manifestación de la afinidad electroquímica del material.

Los procesos catalíticos modernos son responsables del desarrollo de combustibles más limpios, y la producción de plásticos avanzados y compuestos petroquímicos, junto con detergentes más efectivos (Antonio, 2012).

El concepto fundamental de catalizador, derivado desde el punto de vista químico, es que una reacción involucra procesos cíclicos en los cuales sobre un sitio activo del catalizador se forma un complejo con los reactantes y productos intermedios, a partir del cual se desprenden los productos finales, restaurándose el sitio activo original y continúa el ciclo infinitas veces. Aunque los catalizadores no se consumen directamente en la reacción, sí hay que tener en cuenta la posibilidad de envenenamiento del catalizador; la reacción con una impureza da lugar a una especie sin actividad catalítica. Se estima que un 90% de los procesos actuales de producción de sustancias químicas y de refinado son catalíticas (M.C.J. Bradford, 1999).

4.5.1 Propiedades de un Catalizador. Un catalizador bueno y útil debe reunir ciertas características para que pueda ser empleado de una manera óptima y segura en un proceso químico, las más importantes son (M.A. Goula, 1996):

- **Actividad:** Puede definirse como la propiedad de aumentar la velocidad de la reacción con respecto a la manifestada sin catalizador, en las mismas condiciones de temperatura, presión, concentración, etc. La actividad puede incrementarse usualmente elevando la temperatura, aunque de esta manera se puede acortar la vida del catalizador o incrementar las reacciones indeseables.
- **Selectividad:** Se define como el porcentaje de reactante consumido para formar los productos deseados. Es una medida de la extensión a la cual el catalizador acelera una reacción específica para formar uno o más de los productos deseados, evitando la

formación de subproductos que eventualmente puedan reducir el rendimiento de la reacción. Varía usualmente con la presión, temperatura, composición de los reactantes, extensión de la conversión y la naturaleza del catalizador y, por lo cual, se debe hablar de la selectividad de una reacción catalizada bajo condiciones específicas.

- **Estabilidad:** Es la capacidad de un catalizador de mantener sus propiedades, en especial la actividad y la selectividad, durante un tiempo de uso suficiente para aplicarlo industrialmente. En general, el catalizador pierde eficacia con el tiempo debido a cambios físicos o químicos ocurridos durante la reacción. La estabilidad también puede expresarse como el tiempo de vida útil del catalizador.

4.5.2 Catalizador empleado. La elección de la tecnología y por ende el catalizador empleado se realizó bajo la patente Lummus Crest-Unocal-UOP con base a las siguientes razones:

- La GRB tiene convenio con Honeywell UOP, esto quiere decir que, como aliado estratega, faculta la proporción de herramientas, insumos, tecnología y todos los requerimientos en la puesta en marcha del proyecto.
- El actual proceso de Lummus Crest emplea un catalizador de zeolita tipo beta, la tecnología original en fase líquida empleaba ácidos de Lewis, pero por los inconvenientes corrosivos se prestó a cambios y a modificaciones empleando un catalizador a base de zeolita tipo Y, con estas medidas se construyó la primera planta, cambiando al actual proceso con la zeolita tipo B, en última instancia mayor selectividad (S.-G. Yoon, 2007).
- La regeneración del catalizador se realiza una vez al año, su periodo de vida es bastante alto, la formación de xilenos se minimiza, lo que resulta en una purificación más simple (West, 1990).

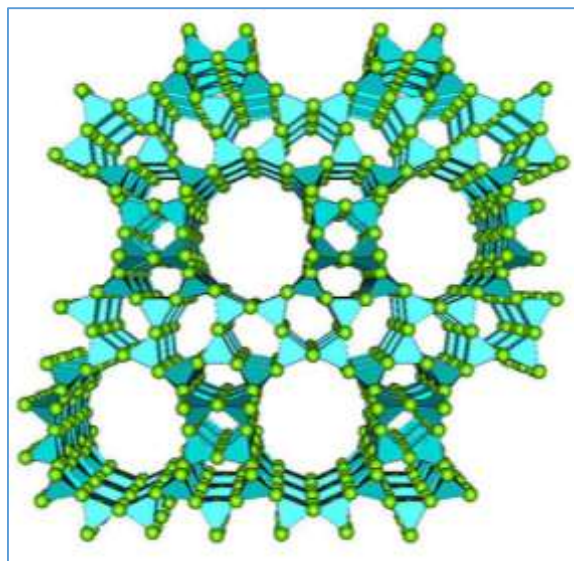


Figura 14. Forma zeolita tipo Beta.

Además de la zeolita ácida / alúmina y la zeolita Y / alúmina, otros catalizadores basados en zeolita tales como mordenita desaluminada, alúmina / silicato de magnesio (Berna Tejero, 1989) y zeolita beta / alúmina (Innes, 1990) son también usados. Sin embargo, los rendimientos con estos catalizadores son menores.

4.6 Generalidades del modelado en ASPEN HYSYS®

En los años 1970s, los investigadores del Laboratorio de Energía del Instituto Tecnológico De Massachusetts (MIT) desarrollaron un prototipo para la simulación de proceso al cual llamaron Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos (ASPEN: Advanced System for Process Engineering). Este software ha sido comercializado desde 1980 por la fundación de una compañía denominada AspenTech (Dente *et al*, 2004).

Aspen HYSYS® es una herramienta de simulación de procesos que sirve para el diseño conceptual, la optimización, planificación empresarial, gestión de activos y la supervisión del

rendimiento de procesos químicos. Ha sido creada teniendo en cuenta lo siguiente: Arquitectura de programa, diseño de interface, capacidades ingenieriles, y operación interactiva (Robertson, 2010).

Sus operaciones y propiedades permiten modelar una amplia gama de procesos con confianza, tiene una gran base termodinámica y sus paquetes de propiedades llevan a la presentación de un modelo más realista. En general, éste es un software muy robusto que puede ser usado en casi todos los aspectos de ingeniería de proceso desde la etapa del diseño hasta el análisis de costos y rentabilidad. Tiene una biblioteca modelo incorporada para columnas de destilación, separadores, cambiadores de calor, reactores, entre otros (Raja, 2010).

4.6.2 Bases iniciales para la simulación. La primera tarea a la hora de emprender una simulación es tener a la mano toda la información técnica requerida. En este caso, la información consiste en:

- Composiciones de las cargas y productos. En este caso se obtienen a partir de las medidas reportadas por los laboratorios o inferidos por cálculos (pseudo-componentes).
- Flujos volumétricos, másicos o molares de las corrientes involucradas en el proceso a modelar.
- Parámetros del proceso como temperaturas y presiones además propiedades termodinámicas como: entalpías, entropías y todas aquellas que puedan afectar la operación.
- Datos técnicos de los equipos involucrados en el proceso y que serán parte del modelo.

El siguiente paso en la simulación es conocer la ruta para acceder al programa, su entorno y su configuración. Estando dentro del software se debe configurar el sistema de unidades. Aspen

HYSYS® admite que se cambie en cualquier momento el sistema de unidades con el que se está trabajando. Es más, al introducir los datos es posible mezclar unidades y el programa se encargará de efectuar las conversiones para expresar los valores en las unidades que corresponda (Shi, 2017).

5. Metodología

En el siguiente esquema se expresa de manera general la metodología realizada.

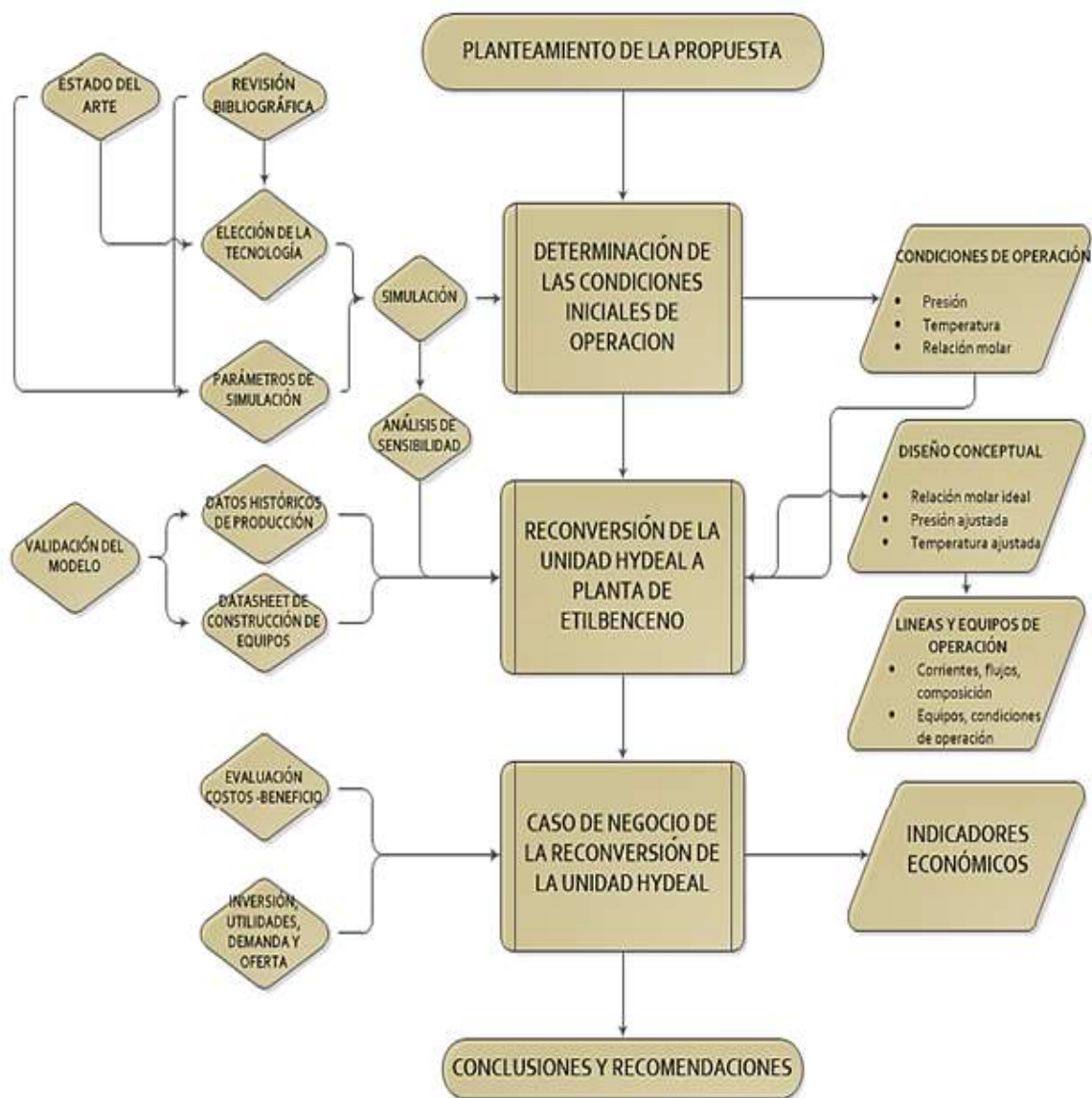


Figura 15. Metodología empleada en la realización del trabajo.

5.1 Determinación de las condiciones iniciales de operación

El enfoque general dado al presente trabajo de aplicación es desarrollar un modelo de la unidad U1600 en estado estacionario, usando la herramienta Aspen HYSYS® en condiciones de estabilidad operacional. Además, se pretende entregar la ingeniería conceptual para la implementación de las facilidades necesarias para la reconversión de la U1600 en una unidad productora de etilbenceno. Para esto se aplicó una metodología que facilitó el alcance de los objetivos trazados. Para determinar las condiciones iniciales o preliminares de operación; antes de emplear el software se validaron dos puntos importantes a tener en cuenta, descritos en los capítulos anteriores, se abordó el caso de estudio como el análisis de un caso de síntesis de proceso, ensamblando un esquema empírico. Para ello se requiere recolección de datos y la selección de la tecnología.

5.1.1 Recolección de datos. Inicialmente, se procedió con la recolección de datos, elaborando una matriz de información bibliográfica a tener en cuenta para el procesamiento de los parámetros de operación y, posteriormente, validando el modelo para determinar las condiciones iniciales de arranque y operación en el nuevo modelo.

5.1.2 Elección de la tecnología. Por medio de una revisión de la literatura, se procedió a identificar tecnologías empleadas en la industria para la obtención de etilbenceno y se seleccionó una en aras de validar los resultados de Aspen HYSYS durante el desarrollo de la simulación.

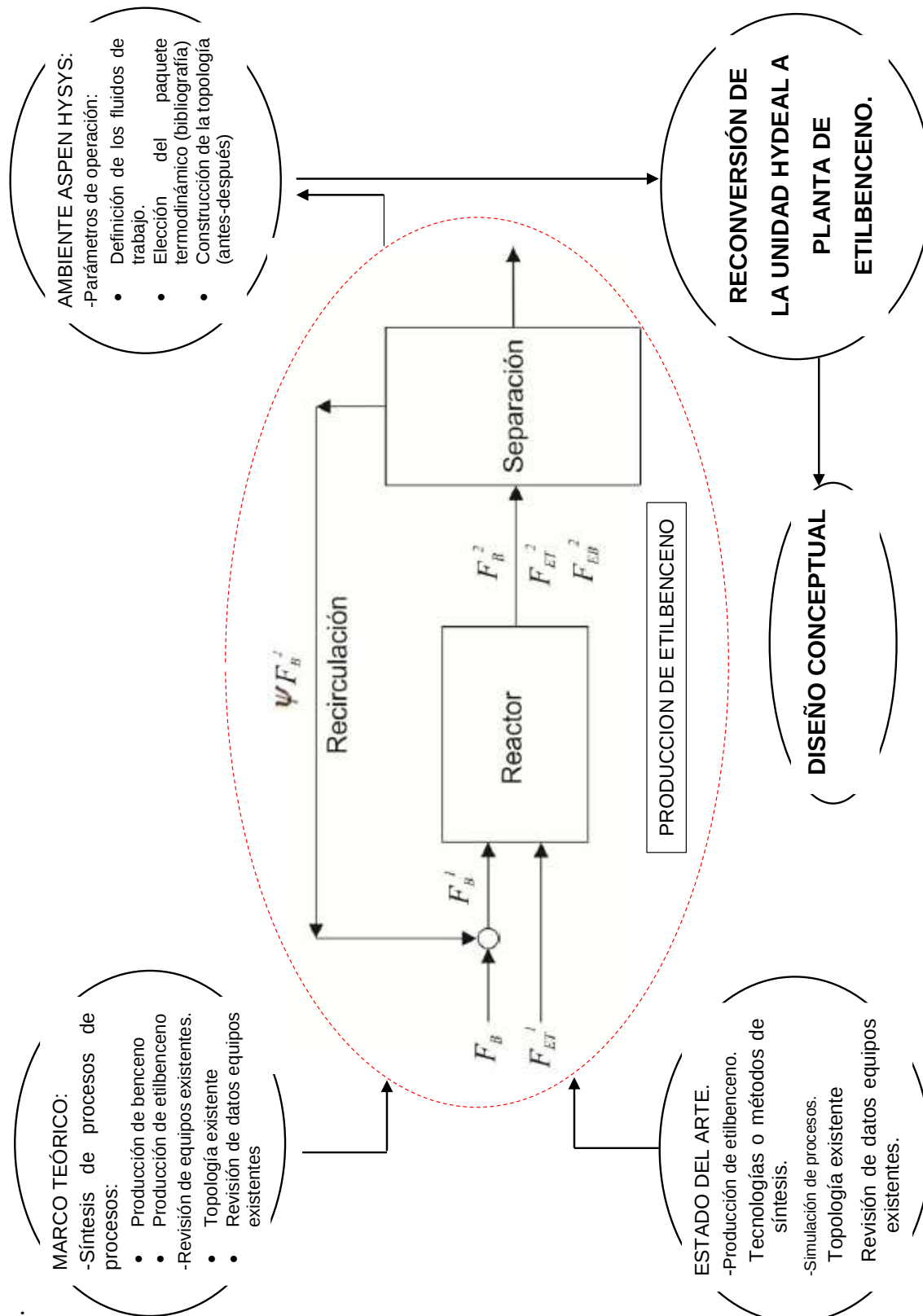


Figura 16. Esquema empírico de construcción de planta

En la Figura 16 se resalta la importancia en la búsqueda de información presentada en los capítulos anteriores, los cuales sirvieron como etapas en el desarrollo de las actividades para la finalización en el desarrollo conceptual, con el objetivo de cerrar el balance presente en las siguientes ecuaciones.

(Ecuación 6.) $F_B^2 = F_B^1(1 - X)$

(Ecuación 7.) $F_{ET}^2 = F_B^1 \left(\frac{F_{ET}^1}{F_B^1} - X \right)$

(Ecuación 8.) $F_{EB}^2 = F_B^1(X)$

(Ecuación 9.) $F_B^1 = F_B + \psi F_B^2$: Balance punto de mezcla

5.1.3 Parámetros de simulación.

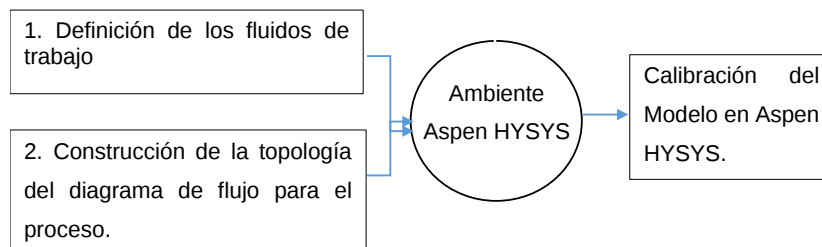


Figura 17. Metodología para los parámetros de simulación.

Primera medida: se eligió el paquete termodinámico (Peng Robinson) el cual se confirmó en la validación del sistema de separación del modelo de planta productora de benceno.

Segunda medida: se construyeron dos topologías de planta. Inicialmente se construyó la planta productora de benceno, que sirvió para la validación del sistema de separación. Paralelamente se construyó la topología de la antigua filosofía para adaptarla a la nueva filosofía en la producción de etilbenceno. Como resultados se calibro el sistema de separación de acuerdo al error encontrado.

5.2 Reconversión de la unidad Hydeal a planta de etilbenceno.

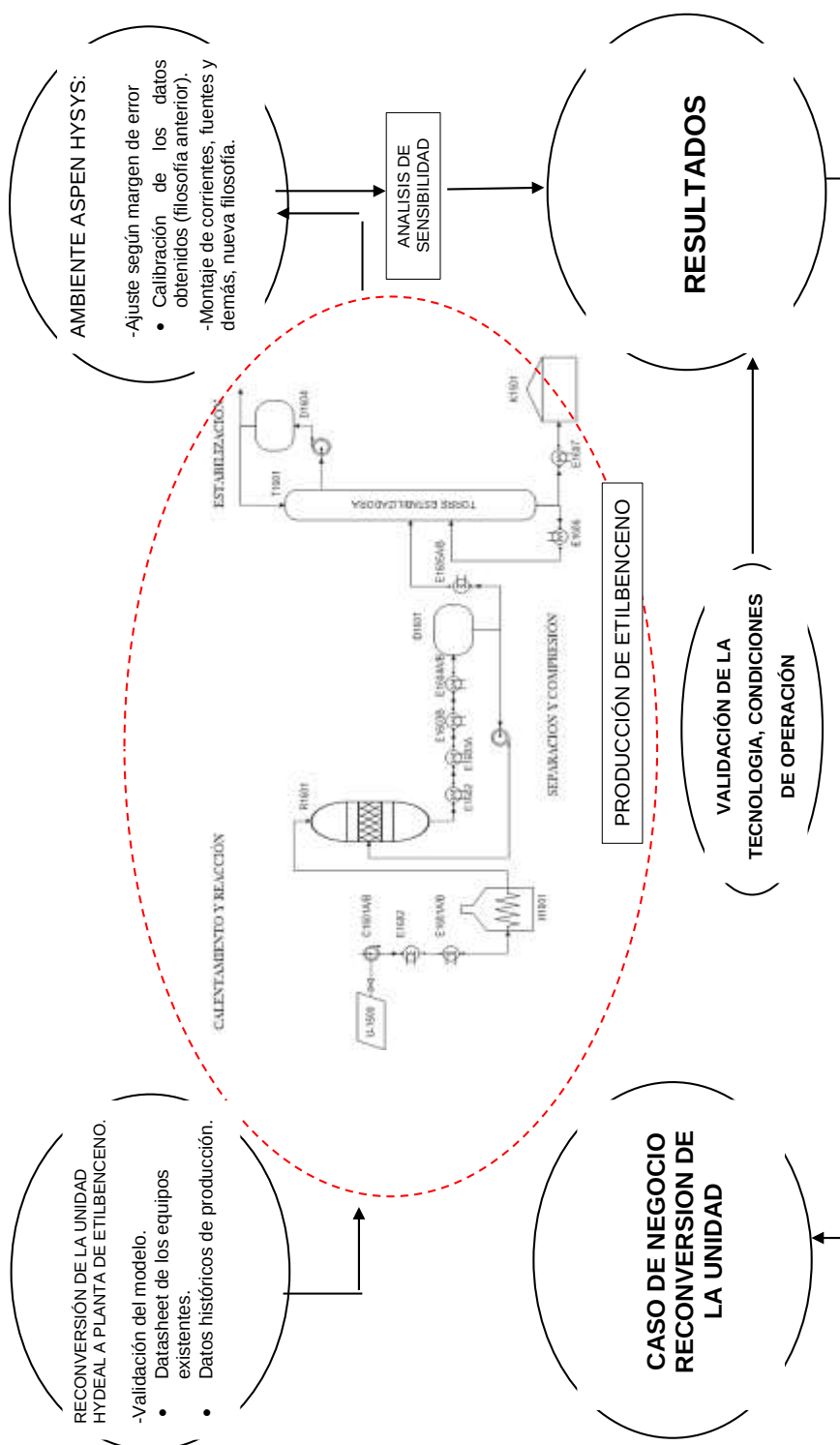


Figura 18. Esquema desarrollo conceptual de la planta etilbenceno.

En la Figura 18 se presenta un esquema del paso a paso utilizado en la construcción del diseño conceptual de la planta productora de etilbenceno, se da pie al avance y a la forma en cual se expresarán los resultados.

5.2.1 Validación del modelo. Para la validación del modelo se tomó la filosofía de la planta anterior. Se validó con la simulación el anterior proceso efectuado principalmente en el sistema de separación en la unidad de fraccionamiento U1500 compuesta por cuatro torres; en la Torre T1501 se obtiene el benceno como producto y en la torre T1502 se obtiene el tolueno estudiadas en la validación del modelo, torre T1503 se obtienen xilenos (p-xilenos y m-xilenos) y etilbenceno, en la torre T1504 se obtienen o-xilenos, productos de fondos aromáticos como materia prima y fueron estudiadas en el sistema de separación en la reconversión de la unidad U1600, debido a que el sistema de reacción presenta una cinética diferente y bajo condiciones diferentes, no es posible calibrar esta sección con la filosofía anterior. El datasheet sirvió como medida de restricción en los demás equipos, es decir que se tuvo en cuenta las consideraciones de diseño para no violar sus límites.

Se tomaron como datos históricos los del año 2013, periodo en el cual la planta estaba en funcionamiento, así como la carga a la unidad U1500 proveniente del complejo aromático la cual cabe recalcar posee una corriente de etilbenceno; adicionalmente, se analizó la remoción de livianos en la torre estabilizadora T1601. Se usaron los datos de la Tabla 7,8,9 propios del datasheet que no se presentaron en el marco teórico para la simulación de la validación.

Tabla 7.

Datos de construcción de la torre T1501.

DIMENSIONES TORRE T1501			
Descripción: Torre de platos perforados de 1 paso, con perforaciones de configuración circular. Eficiencia plato 85%			
Diámetro torre	4.5 ft	Espesor plato	1/8 in
Espaciado entre platos	2 ft	Diámetro perforaciones	1/2 in
Longitud derramadero	3.967 ft	Altura rebosadero	1.969 in
Área activa	9.912 ft ²	Numero platos	54

Tabla 8.

Datos de construcción de la torre T1502.

DIMENSIONES TORRE T1502			
Descripción: Torre de platos perforados de 1 paso, con perforaciones de configuración circular. Eficiencia plato 85%			
Diámetro torre	4.5 ft	Espesor plato	1/8 in
Espaciado entre platos	2 ft	Diámetro perforaciones	1/2 in
Longitud derramadero	3.967 ft	Altura rebosadero	1.969 in
Área activa	9.912 ft ²	Numero platos	60

Tabla 9.

Datos de construcción de la torre T1601.

DIMENSIONES TORRE T1601			
Descripción: Torre de platos perforados de 1 paso, con perforaciones de configuración circular. Eficiencia plato 85%			
Diámetro torre	4.5 ft	Espesor plato	1/8 in
Espaciado entre platos	2 ft	Diámetro perforaciones	1/2 in
Longitud derramadero	3.967 ft	Altura rebosadero	1.969 in
Área activa	9.912 ft ²	Numero platos	27

5.2.2 Análisis de sensibilidad. Las descripciones del análisis de sensibilidad para el sistema de reacción, separación y calentamiento se describen a continuación.

- **Sistema de reacción.**

En la siguiente Figura 19 se establece el desarrollo de la metodología sobre el análisis de sensibilidad. En aras de encontrar las mejores condiciones de operación, se hace una retroalimentación de los parámetros encontrados.



Figura 19. Metodología Análisis de sensibilidad.

↑ Aumento • Posición fija // BLS: barriles, LB: Libras.

Con el montaje de la simulación y la obtención de los parámetros iniciales de funcionamiento, se ajustaron los valores de operación mediante un análisis de sensibilidad para obtener la máxima conversión posible. Esto se hizo modificando un parámetro a la vez, es decir, por ejemplo, moviendo la presión y manteniendo la temperatura y relación molar constante en varios rangos determinados limitados por la termodinámica de la reacción ofrecidas por las referencias bibliográficas, hasta hallar la mayor conversión del caso de estudio y, por último, el ajuste del

reciclo. Todo efectuado en estado estacionario en el sistema de reacción como corazón de la planta, que en última instancia es el que reacondiciona toda la operación.

- **Sistema de separación.**

Primero: Se ajustó los parámetros para el funcionamiento del tanque separador, del cual se obtiene la corriente rica de etilbenceno mezclada con benceno y dietilbenceno, una corriente de fondo de agua de condensación y una corriente de cima compuesta por gases de formación de bajo de peso molecular.

Segundo: Se procedió con ajustar la torre estabilizadora T1601 la cual termina de retirar de la mezcla rica de etilbenceno productos livianos como hidrógeno, metano e hidrocarburos de baja densidad, y el complejo de torres en la unidad de fraccionamiento U1500 en donde da lugar la separación de la mezcla. En la Figura 20 se establece el desarrollo de la metodología sobre el análisis de sensibilidad. En aras de encontrar las mejores condiciones de operación, se hace una retroalimentación de los parámetros encontrados.

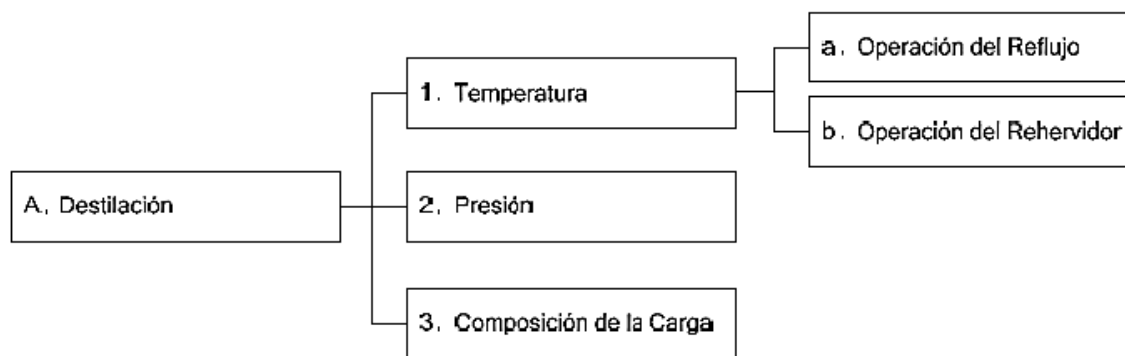


Figura 20. Parámetros ajuste Torres.

Se fijan inicialmente las temperaturas de fondo y cima, comprobando la variación de la temperatura, estas temperaturas fueron totalmente dependientes del reflujo puestos que esta relación de retorno a la torre controla la temperatura misma de la torre y la calidad de la separación. Se fija la caída de presión de la torre con las presiones de cima y fondo a la cual trabajarán los extremos de la torre, la cual está en los parámetros de operación de alrededor de los 20 psig, esto garantiza la dirección del flujo adecuado. Y por último la composición de la carga, aunque en este proceso este último parámetro está totalmente controlado por la conversión y los productos del reactor.

Tercero: Finalmente se contrasta el incremento en la corriente de xilenos de la torre T1503 la producción de etilbenceno, puesto es en esta línea donde se refleja la separación de etilbenceno, además en la simulación se cargarán en el complejo la carga real de esta unidad a fin de obtener los datos necesarios en la proyección de costos en el análisis económico. Es necesario tener los parámetros de diseño de las torres para su simulación presentado en la Tabla 10.

Tabla 10.

Datos de construcción de la torre T1503.

DIMENSIONES TORRE T1503			
Descripción: Torre de platos perforados de 1 paso, con perforaciones de configuración circular. Eficiencia plato 85%			
Diámetro torre	4.5 ft	Espesor plato	1/8 in
Espaciado entre platos	2 ft	Diámetro perforaciones	1/2 in
Longitud derramadero	3.967 ft	Altura rebosadero	1.969 in
Área activa	9.912 ft ²	Numero platos	120

- **Sistema de precalentamiento y calentamiento.**

El análisis del sistema de precalentamiento está íntimamente ligado con el sistema de calentamiento durante toda la operación, puesto que el servicio o suministro de energía en la filosofía es dependiente de la reacción exotérmica (flujo de fondos del reactor), y el horno H1601, es decir posee aprovechamiento energético (red de intercambio de energía) intercambiadores E1601 y E1602. Se realizó la metodología presentada en la Figura 21.

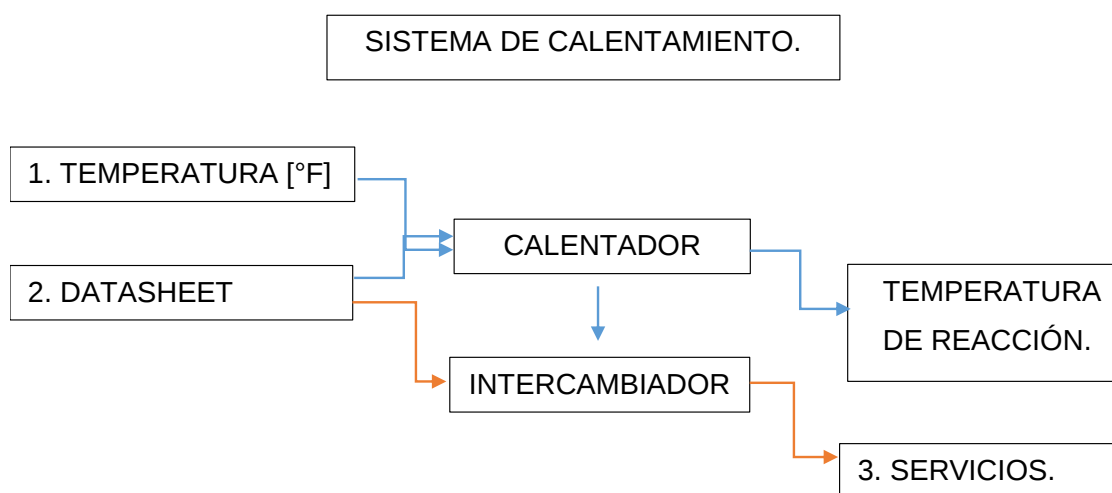


Figura 21. Metodología para el sistema de calentamiento.

Inicialmente, se abarcó la simulación como si fueran calentadores, para encontrar la temperatura a la cual era precisa la reacción o en su defecto que favoreciera de manera global la reacción. A la temperatura alcanzada se tomaron los datos del datasheet para no violar los $\Delta T_{\min}$ y las heurísticas de construcción en los calentadores, luego se pasó de un calentador a un intercambiador manteniendo la idea original de obtener los servicios industriales más bajos sobre el horno H1601 el cual aprovecha la energía por radiación en la combustión de un flujo de gas y oxígeno, haciendo pasar por los intercambiadores el flujo de fondo del reactor por los intercambiadores E1601 y E1602. Nuevamente para este paso se valió del datasheet para

predisponer de su información en las restricciones adecuadas, tubos y demás parámetros de construcción. Por último, se hicieron los cálculos para servicios del horno valiéndose de las herramientas de Aspen HYSYS (Energy Analysis), rehervidor y para el resto de sistema de enfriamiento intercambiador E1603 y E1605.

5.3 Caso de negocio de la reconversión de la unidad hydeal.

Para dar una factibilidad sobre el caso de estudio se habla en términos monetarios, se analiza la producción, la demanda del mercado, el valor de venta, y otros factores. Gracias a este análisis se tiene una visión completa para validar o considerar la alternativa y la puesta en marcha del proyecto, reflejados en indicadores económicos tales como la tasa interna de retorno (TIR) y el Valor Presente Neto (VPN).

5.3.1 Análisis de inversión, utilidades, demanda y oferta. Considerando factores reales de producción, frente al mercado, se planteó hacer un análisis detallando los valores significativos en la inversión y el valor de venta en aras de facultar la viabilidad del proyecto, empleando el esquema de las plantillas del departamento de Planeación y Programación de la Producción de la GRB.

5.3.2 Evaluación costos beneficios. En términos monetarios, para la alternativa de reconversión de la unidad se contrasta con los costos que involucra las reformas y las ganancias que se obtendrán en una matriz de proyección.

6. Resultados.

6.1 Validación del modelo.

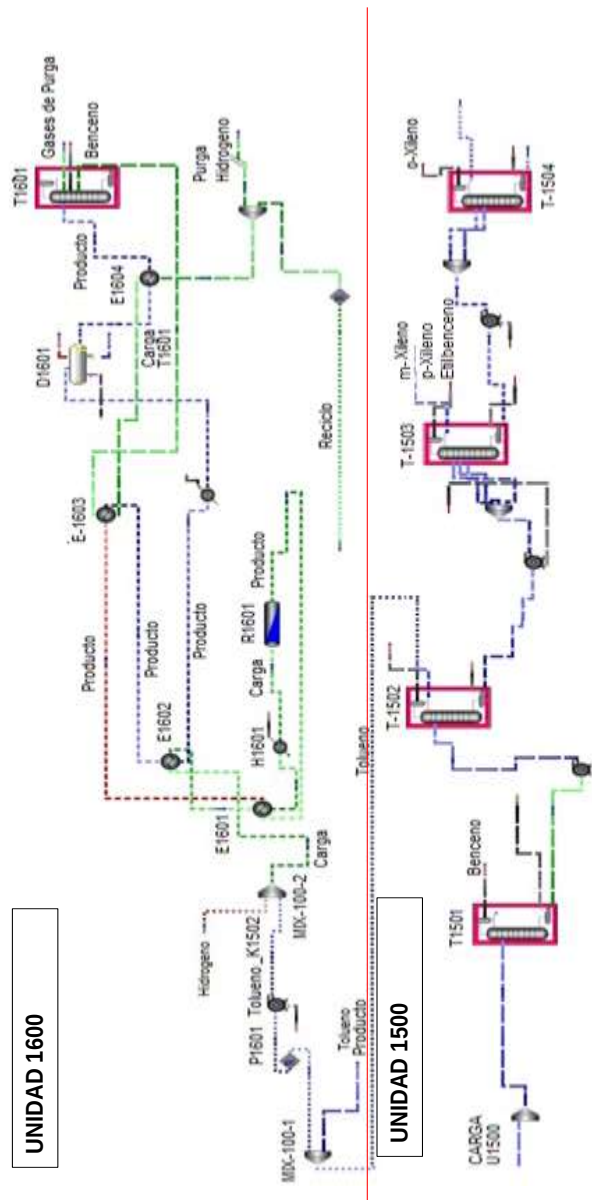


Figura 22. Topología producción de Benceno a partir de la hidrodesalquilación de Tolueno Aspen HYSYS.

Para hacer foco en la reconversión de la Unidad U1600 (ver Figura 22), es necesario validar la confiabilidad del software a nivel industrial sobre los datos obtenidos de planta, así como en los requerimientos y consideraciones que sobre algunos equipos, en especial atención a la zona de estabilización (ver Figura 23), con base a la producción de benceno como fuente generatriz de calibración, así como en la torre T1501 y T1502 de la unidad de fraccionamiento U1500.

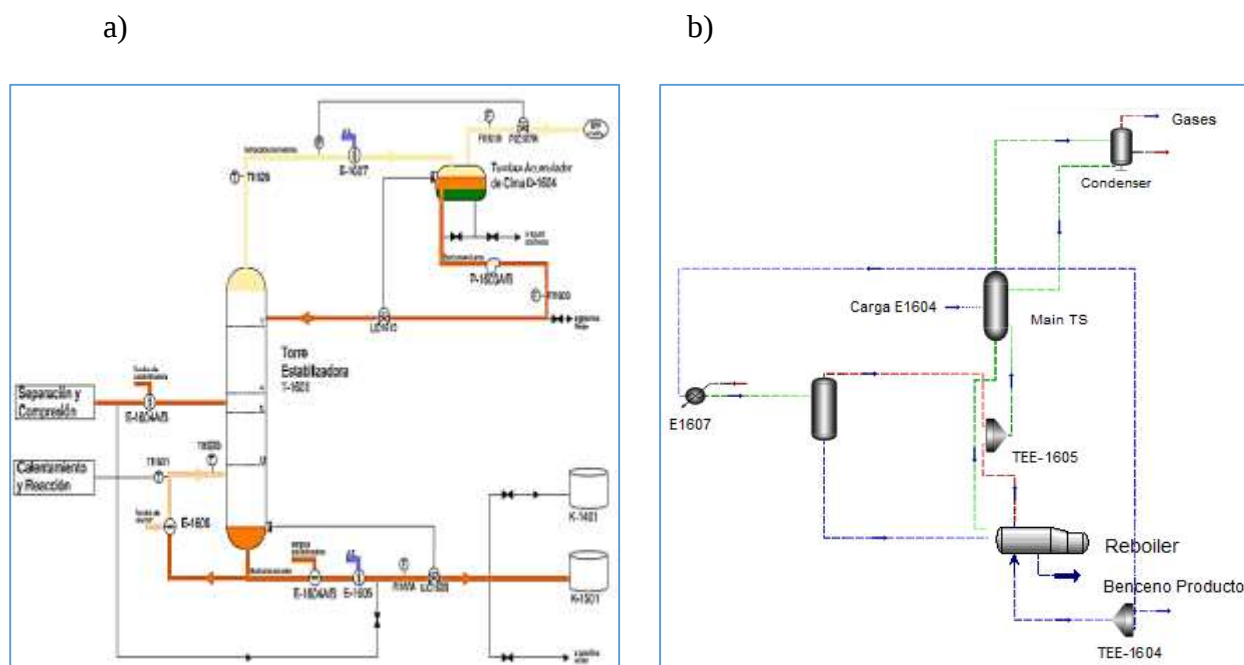


Figura 23. Zona de Estabilización T1601: a) Diagrama grande de control y b) En el ambiente de simulación Aspen HYSYS.

Tabla 11.

Valores obtenidos en la torre T1601.

Compuesto	[%Mol]	
	Cima	Fondo
Propeno	0,9000	4,97E-16
Benceno	0	0,49229
Tolueno	2,31E-05	0,34642

Compuesto	[%Mol]	
	Cima	Fondo
O-xileno	3,50E-09	8,74E-02
M-xileno	5,79E-09	3,47E-03
P-xileno	4,51E-07	0,01133
Hidrogeno	0,1000	0

La comparación se hizo con los datos históricos de producción del año 2013, el flujo de producción de la unidad fue graficado y se presenta en la Figura 24, corresponde a días cuyas fechas demuestran una estabilidad de producción y se contrastó con los datos exportados o suministrados de la simulación en la torre T1501.

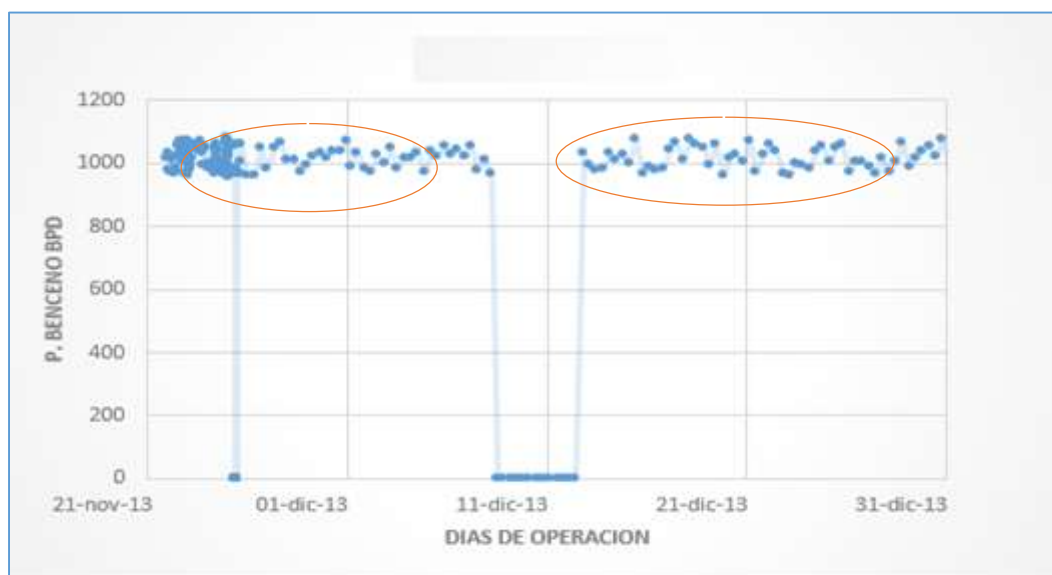


Figura 24. Datos históricos carga de crudo año 2013.

El eje x corresponde a las fechas de los valores reportados de producción de benceno cada dos horas a partir del 22 de noviembre del 2013, se señala en rojo los periodos en los cuales se puede establecer que la planta opera en estado estacionario, los valores promedios de producción son

956±50 BPD (95% de confianza) lo que representa el 2% al 10% del valor total de producción. Gracias a la ventaja que ofreció los diferentes paquetes termodinámicos, se empleó Pen Robinson para el caso de estudio, puesto que es el más adecuado para este tipo de procesos en donde se encuentran vinculadas sustancias como compuestos aromáticos (benceno, tolueno, xilenos, etc.). Este paquete termodinámico predice y se correlaciona con un margen mínimo de error en cuanto a la cinética de la reacción y el comportamiento para el caso de estudio, validando los resultados obtenidos en la simulación con los resultados de planta (Wang, 1993)

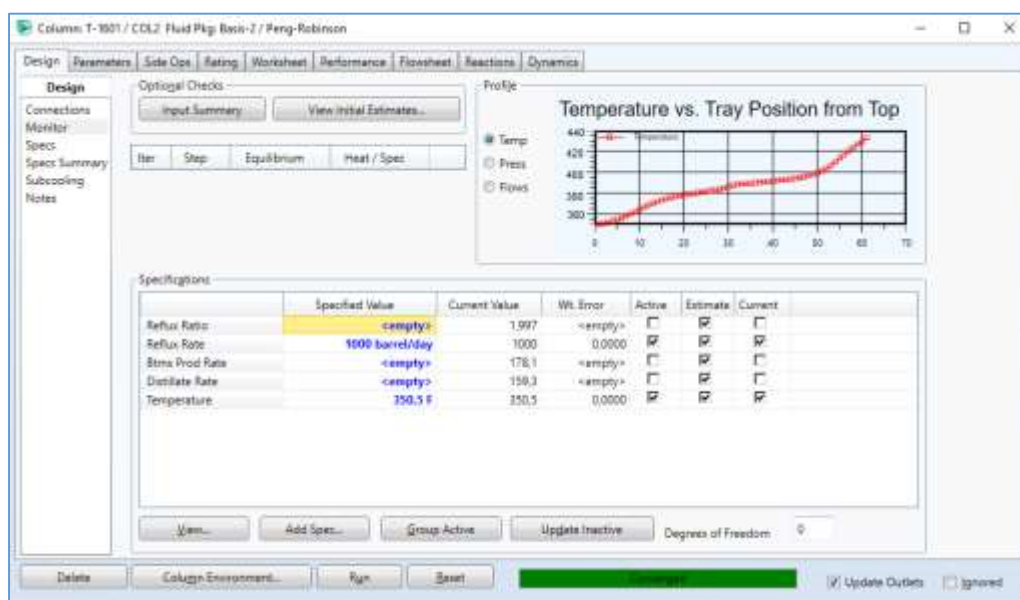


Figura 25. Convergencia de la Torre T1501.

La Figura 25 muestra la convergencia de la torre T1501 con los parámetros de operacionales propios en la producción de benceno. En la Tabla 12 se muestran el comparativo de los resultados en Aspen HYSYS y los valores promedios de la variable monitoreada.

Tabla 12.

Comparativo de producción.

Fecha	Datos	Producción Benceno [BDP]	% ERROR
27/11/2013	Reales	1005.5	<u>3.09</u>
	Simulados	975.3	
15/12/2013	Reales	998.7	<u>1.09</u>
	Simulados	1018.6	
26/12/2013	Reales	1020.3	<u>1.01</u>
	Simulados	1010	

Existe una pequeña desviación menor al 5%, que puede ser atribuida a que los valores de temperatura, presión y flujo extraídos de la base de datos, son promedios diarios que no implican necesariamente el valor de cada variable para un mismo instante de tiempo.

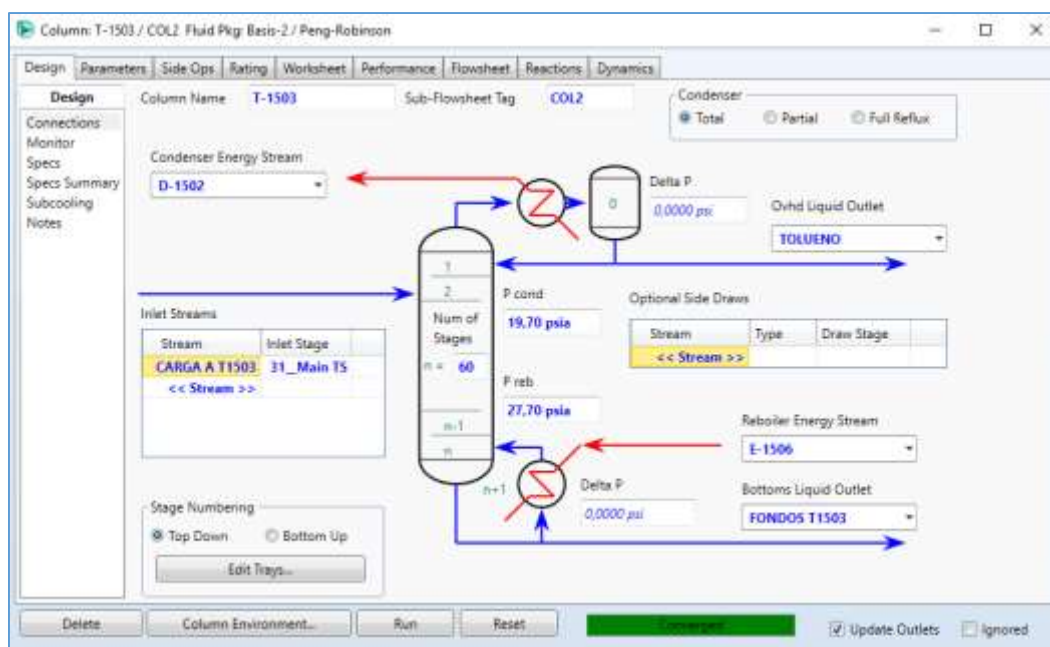


Figura 26. Convergencia de la Torre T1502.

En la Figura 26 se muestra la convergencia de la torre T1502, junto con la Tabla 12 se expresan los valores en la recuperación y obtención de tolueno de la corriente de carga y de mezcla.

Tabla 13.

Separación Tolueno T1502 unidad U1500.

	CIMA	FONDO
Fracción Molar		
Benceno	2,60E-07	4,73E-18
N-Bbenzene	4,70E-22	1,59E-04
Cumeno	2,74E-11	1,78E-04
Etilbenceno	6,28E-03	0,10070911
Polietilbenceno	2,64E-10	0,19945678
O-xileno	4,06E-05	0,16392753
M-xileno	2,63E-03	0,35578827
P-xileno	1,40E-03	0,15493963
Tolueno	0,98965073	2,48E-02

Se comprueba la efectividad de la recuperación de tolueno el cual sirve de carga a la unidad U1600.

6.2 Reconversion de la unidad Hydeal 1600 a planta de etileno.

Para reconvertir la Unidad 1600 de una planta productora de benceno a una planta productora de etilbenceno, inicialmente se implementó un sistema de Entrada – Salida (ver Figura 27). Se estableció que la materia prima de entrada es el Benceno y el etileno, el producto deseado es el etilbenceno, teniendo como subproductos polietilbencenos.

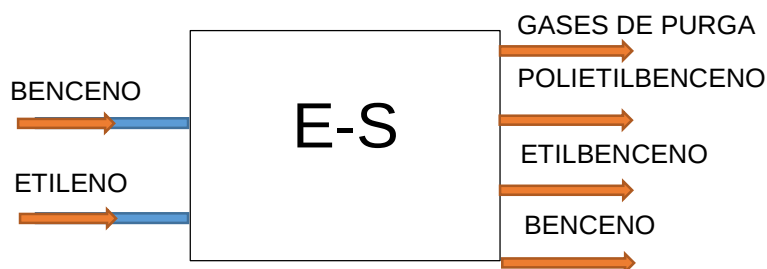


Figura 27. Sistema Entrada - Salida.

La mayoría de los procesos en la industria de refinación se separan en tres zonas, como se indicó anteriormente la Unidad U1600 tiene esta misma perspectiva ajustada al análisis de procesos, El proceso se ajusta a una ampliación del sistema entrada – salida, en donde se definen la zona de precalentamiento, zona de reacción y zona de separación (ver Figura 28).

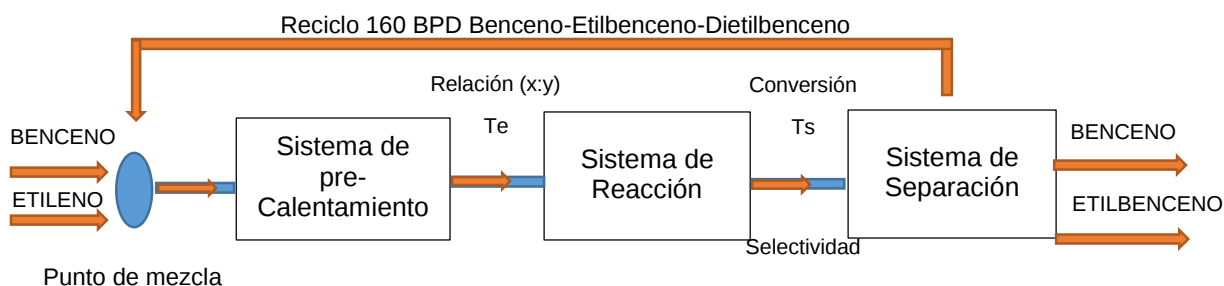


Figura 28. Sistema Entrada- Salida; distribución de tres zonas.

Para la simulación es necesario que reacondicionar los parámetros de presión, temperatura y relación molar en función de la conversión, la selectividad y principalmente la temperatura de salida en el sistema de reacción como medida inicial, puesto el reactor es el corazón de la planta en todo proceso.

6.2.1 Sistema de reacción. Inicialmente, se abarcó el caso de estudio analizando la variación de la presión y la relación molar, así como la presión sin reciclo, obedeciendo al análisis de procesos según se evidencia en la Figura 29.

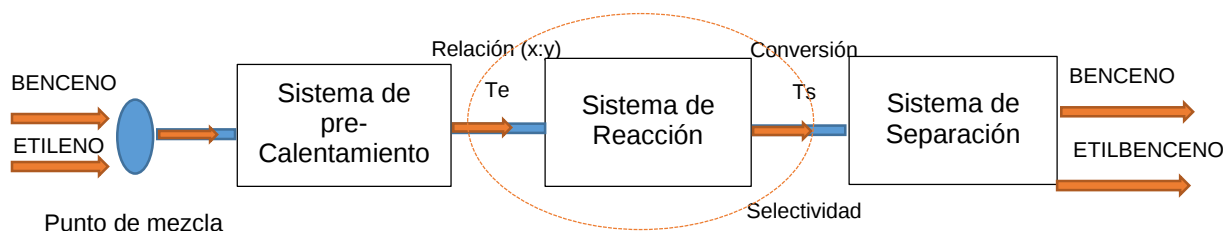


Figura 29. Sistema de reacción sin reciclo.

Gracias a esta medida fue posible encontrar las condiciones preliminares en donde el proceso tiene lugar, así como la validación de la tecnología y los datos bibliográficos como decisión de criterio. En la Figura 30 se puede apreciar la convergencia del reactor con los valores de entrada en las cinéticas de reacción expuestos.

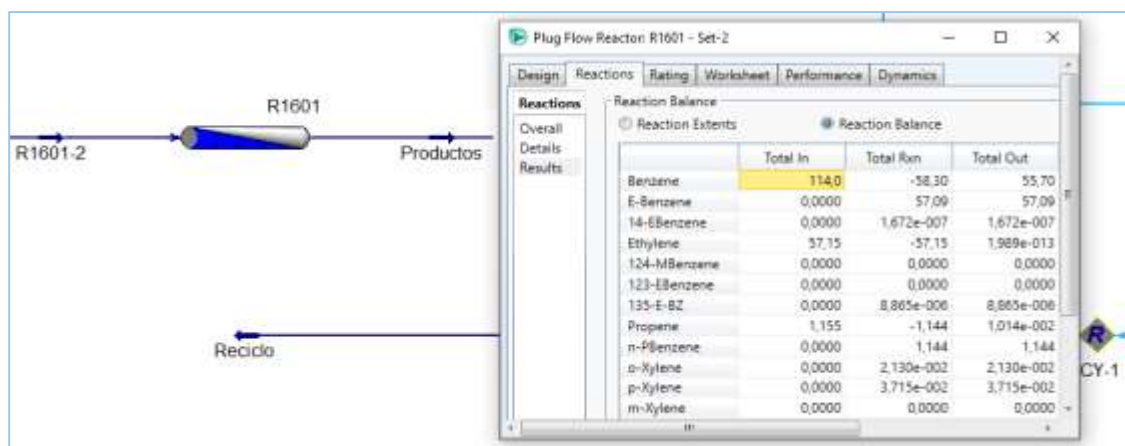


Figura 30. Convergencia del reactor sin reciclo.

- **Presión a la entrada del Reactor R1601.**

En la Figura 31 se obtienen los resultados a diferentes presiones como parámetro operacional, tales resultados son; porcentajes de conversión y selectividad fracciones molares del efluente del reactor.

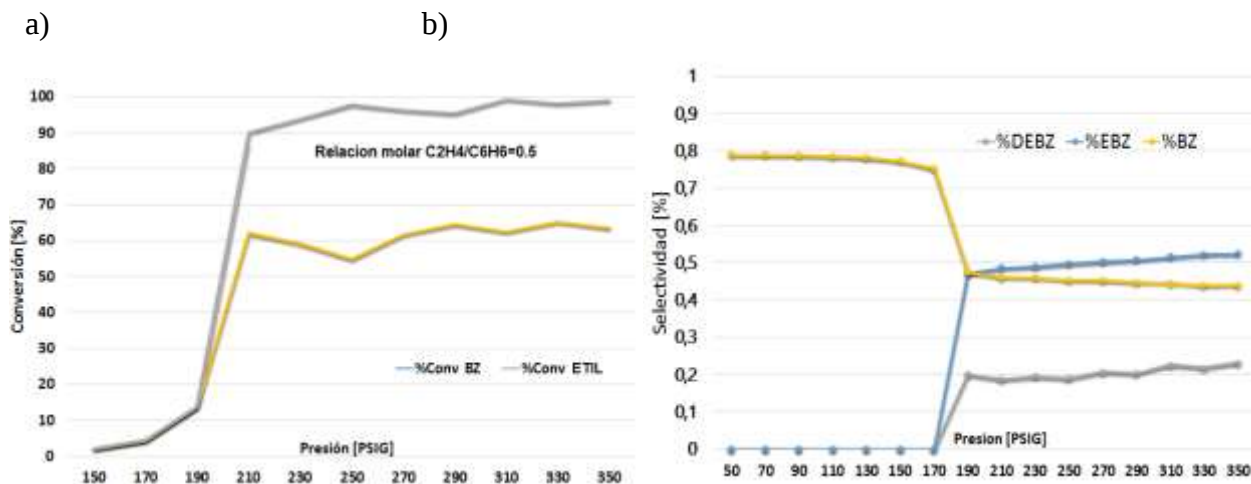


Figura 31. Variación de la presión en el sistema de reacción: a) conversión a diferentes presiones y b) selectividad efluente del R1601

Según los resultados mostrados en la Figura 31, tanto en el literal a como en el b se predice que la reacción tiene lugar a altas presiones, favoreciendo la reacción a 210 psig según se tenía presente en las tecnologías aplicadas y referencias en el estado del arte (Sardina, 1986). Las gráficas también predicen que al aumentar gradualmente la presión la selectividad se dirige a la producción de dietilbenceno. Es por tanto conveniente seleccionar para el proceso teniendo en cuenta los resultados obtenidos y a las condiciones de predisposición de las materias primas una presión límite de 270 psig debido al hecho que aguas arriba la carga de la operación esta reacondicionada a esta presión y se alcanza una conversión total de etileno como reactivo limite y una conversión de benceno del 61,56%. El aumento de la presión más allá de este valor no supone

un aumento considerable en la conversión de benceno (ver Figura 31 a) pero si la selectividad a la producción de dietilbenceno.

- **Temperatura de entrada al Reactor R1601.**

En la Figura 32 se presentan los resultados de conversión a diferentes temperaturas como parámetro operacional.

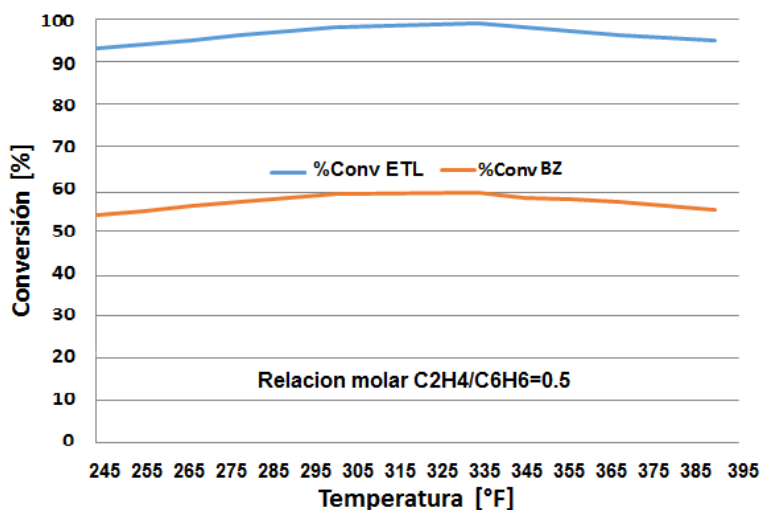


Figura 32. Conversión a diferentes temperaturas.

En la Figura 32 los resultados reflejan que a mayor temperatura hay menor conversión, esto es propio del proceso o tecnología en fase líquida (UOP Lummus Crest) la cual maneja temperaturas entre 300 y 450 °F y altas presiones (Whittle, 1987), lo cual resulta conveniente. Operar a estas temperaturas presenta ventajas en cuanto a la preservación, manipulación y control de la vida útil del catalizador. Además, este proceso evita los inconvenientes del proceso tradicional en el cual los catalizadores son ácidos minerales fuertes o ácidos de Lewis, los cuales son tóxicos y corrosivos, lo que hace peligrosa su manipulación y el transporte (Perego, 2002), Esto es relevante teniendo en cuenta que los equipos disponibles no tienen las características metalúrgicas para

soportar ácidos fuertes según la revisión hecha del datasheet. Con base a lo anterior la temperatura propuesta sin reciclo es de 330 °F como temperatura precursora para el análisis, alcanzando una conversión total de etileno y una conversión del 61% de benceno.

- **Carga al Reactor R1601.**

En la Figura 33 se muestran los resultados a diferentes relaciones de cargas al reactor como parámetro operacional, y se miden las fracciones molares al efluente del reactor.

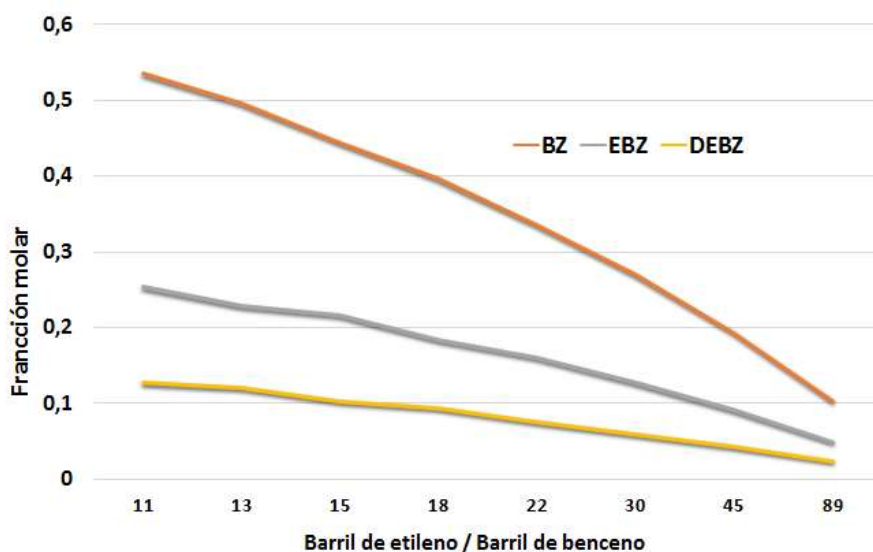


Figura 33. Relación carga etileno fija variando cantidad de benceno.

Los valores reportados hacen alusión a la proporción de 185,65 Bbl-h de etileno (fijas) y Bbl-h de benceno (variable), se predice una proporción directa entre el aumento del benceno y el aumento de la fracción de etilbenceno al efluente del reactor, estos datos reportados se ajustan a las predicciones bajo el principio de benceno en exceso (ver Figura 7) se obtuvo una conversión total de etileno a 14,58 Bbl-h de Benceno, correspondiente al valor 13 del eje x, dicho punto corresponde a los 350 BPD de benceno disponibles para la producción de etilbenceno, lo que es

aceptable en nuestro caso de estudio. En la Figura 34 se puede apreciar este efecto más claramente poniendo en evidencia la influencia de las relaciones molares en las relaciones de carga.

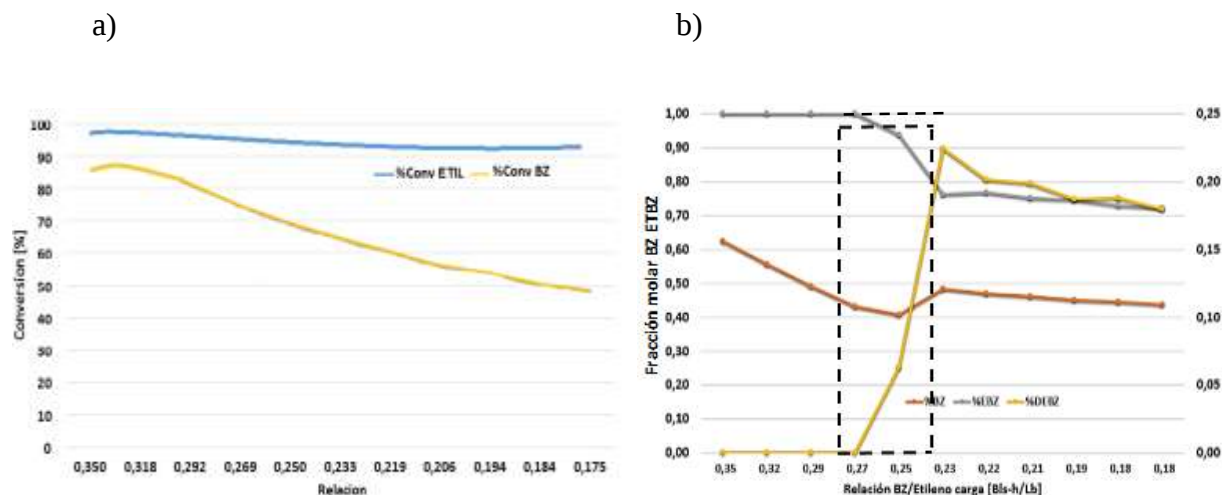


Figura 34. Relación carga variando cantidad de etileno – benceno fijo. a) % Conversión R1601 a diferentes relaciones Benceno/etileno b) fracción molar al efluente del reactor variando el etileno.

La Figura 34 muestra las diferentes relaciones en las que se varió la carga a la entrada del reactor R1601 y su reporte al efluente del reactor todas estas relaciones suponen una mayor proporción de benceno que etileno las cuales varían de 0,175 equivalente a 350 BPD de benceno/ 5474,53 BPD etileno, hasta 0,35 correspondiente a 350 BPD/5333,33 BPD de etileno. Este estudio se realizó bajo el postulado de confirmar la dinámica de la selectividad a manera de controlar la obtención del producto deseado. La abundancia de etileno indica una mayor producción de dietilbencenos (fracción eje izquierdo Figura 34 b), aunque en menor proporción que la producción de etilbenceno (fracción eje derecho Figura 34 a) siguiendo el patrón establecido en la Ruta 2 (ver Figura 7). Cabe resaltar que en la relación 0,27 a 0,23 se evidencia un aumento progresivo de dietilbencenos, esto es debido a que se obtiene etilbenceno durante un tiempo de residencia considerable y es el precursor para la generación de dietilbenceno más la presencia de etileno en

abundancia favorece las condiciones en el desplazamiento de la selectividad. El valor óptimo elegido es el punto 0,29 correspondiente a 350 BPD/ 6400 BPD de etileno, puesto es la cantidad disponible de benceno y conlleva a resultados aceptables.

- Reciclo al Reactor R1601.

En la Figura 35 se obtienen los resultados a diferentes cargas de reciclo y se reporta la influencia de las diferentes cargas sobre las fracciones molares al efluente del reactor.

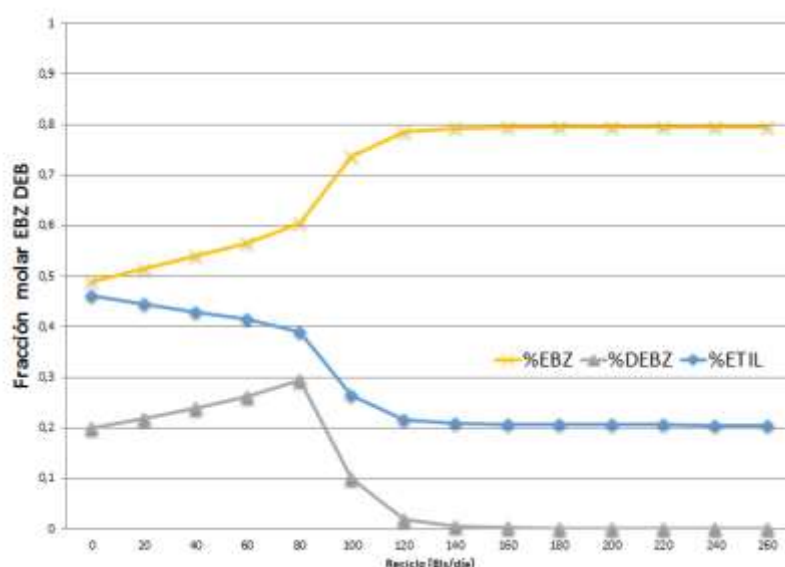


Figura 35. Variación del reciclo como carga al reactor.

En esta gráfica es posible evidenciar el aumento de la eficiencia en la conversión aplicando diferente reciclo como carga al reactor. Con el fin de ilustrar el estado estacionario se toma como medida cierta cantidad de carga con una relación mayor de benceno cuyo punto de partida está después del punto de mezcla (ver Figura 28). A la carga se le adicionaron valores de reciclo de benceno materia prima en exceso sin convertir, etilbenceno y dietilbenceno. Es notable observar una efectividad de reciclo después de 80 Bls/día hasta los 160 Bls/día como valor óptimo de

reciclo, se observa una significativa disminución de dietilbencenos formados antes de esta carga, un aumento progresivo de etilbenceno y, en consecuencia, una disminución de benceno en el efluente del reactor. Esto es debido al hecho de que la dirección de la selectividad a la que hay lugar y las reacciones de transalquilación que se logran gracias al reciclo efectuado al reactor, en la tecnología UOP Lummus es posible obtener mayores eficiencias de conversión en fase líquida gracias a los reciclos efectuados y se consigue obtener los procesos de alquilación y transalquilación en el mismo reactor bajo condiciones específicas, en consecuencia la conversión es baja pero compensada con estas medidas (G.J.T.P.T. Barger, 1998). En la Figura 36 se observa el efecto de la variación de la temperatura sobre el reciclo. Como medida se reportan los valores en fracciones molares al efluente del reactor.

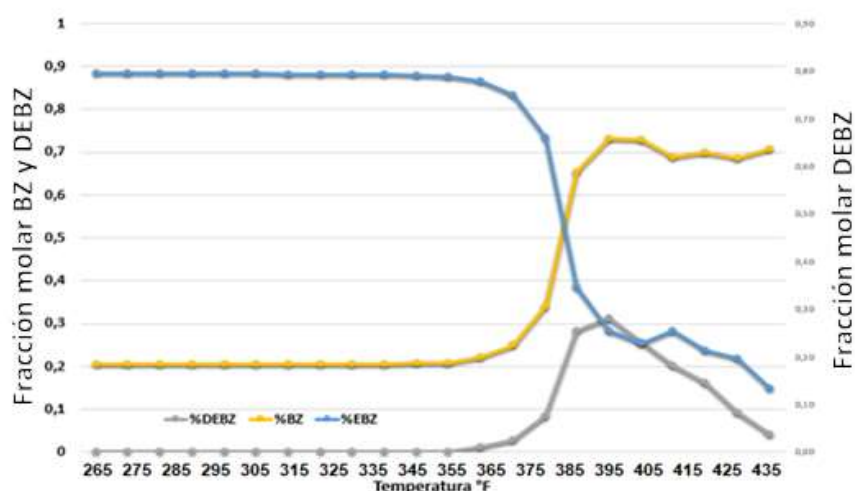


Figura 36. Efluente R1601 con reciclo y variando temperatura de la carga

La temperatura se varió con una carga al reactor de 350 BPD de benceno un reciclo de 160 BPD de benceno, etilbenceno, dietilbenceno, 6400 BPD de etileno a una presión de 270 psig. Las diferentes temperaturas y su consecuente registros de fracciones molares al efluente del reactor se

registraron en la Figura 36 se concluye que las temperaturas óptimas están entre 265 °F y 355 °F. Después de estos valores el efecto de la temperatura genera una disminución considerable en la producción de etilbenceno y, en consecuencia, una dirección de la selectividad hacia la producción de dietilbencenos y polietilbencenos. Por lo tanto, la temperatura elegida en el caso de estudio de 330 °F. Por último, para el análisis del reactor R1601 se ajustó los valores de etileno como reactivo límite ante los valores de reciclo y carga del reactor mediante el análisis de sensibilidad.

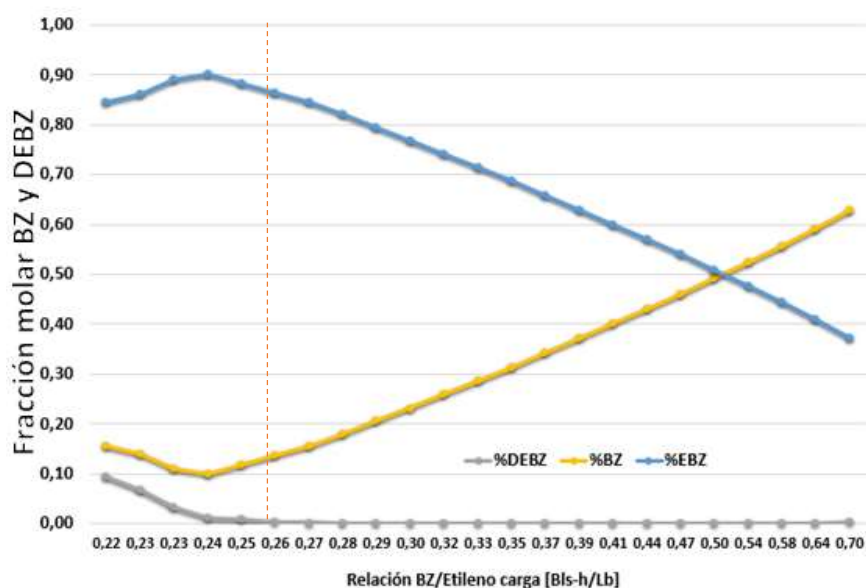


Figura 37. Reciclo con variación de etileno de carga.

En esta gráfica se observa que el valor óptimo de carga de etileno ante el reciclo optimo efectuado es de 7.680 BPD, cuyo valor es representado con el punto 0,24 del eje x alcanzando un proporción molar de etilbenceno del 90% con un reciclo de 160 BPD de benceno y una carga de 350 BPD. Al disminuir los valores de etileno de carga en relación al valor de benceno de carga la tendencia es desfavorable, se observa una disminución en la producción de etilbenceno y en

consecuencia una menor conversión de benceno. En la Figura 38 se muestra el esquema del sistema entrada y salida, con los parámetros operacionales hallados en el sistema de reacción.

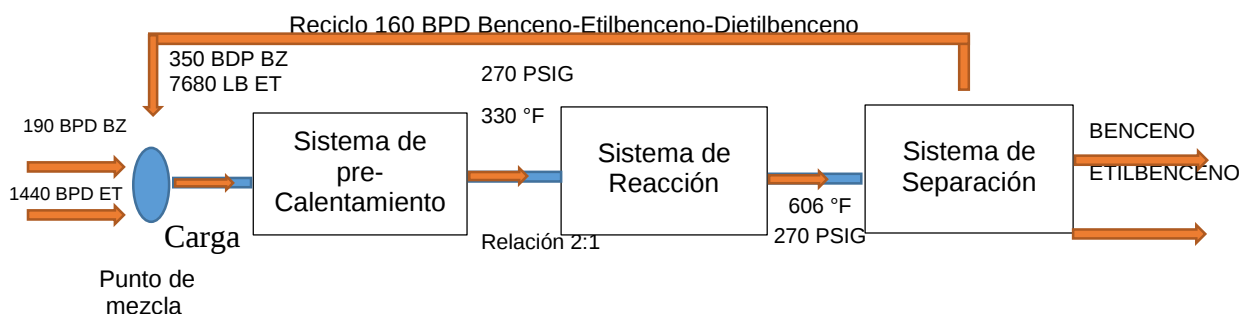


Figura 38. Sistema entrada – salida con valores y criterios de entrada.

La Figura 38 sirve para ilustrar el cierre de los valores encontrados en el sistema entrada-salida y los cuales servirán en el caso de estudio,

6.2.2 Sistema de separación.

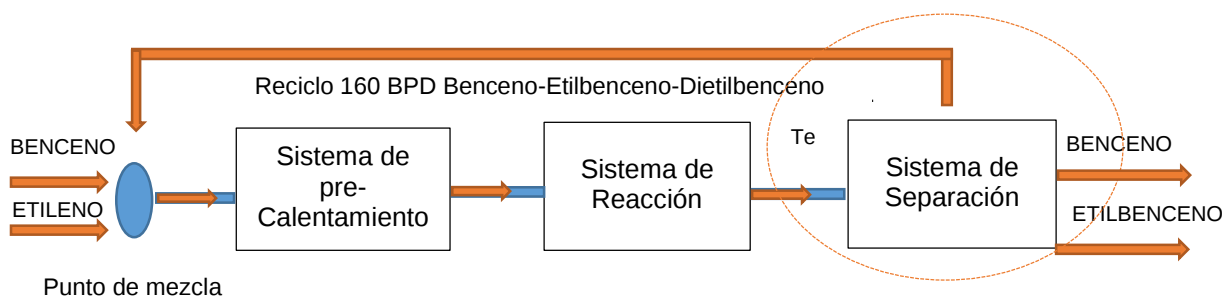


Figura 39. Sistema entrada-salida, zona de reacción.

El sistema de separación para nuestro caso de estudio consiste básicamente en el tambor separador D1601 Figura 39, en esta sección se ventea sustancias como metano, propano, propileno, se despoja agua de formación como producto de fondo con el tambor se controla la presión y el

efluente del tambor se separa. Una parte se recicla según el reajuste del reactor, y la otra parte se alimenta a la torre estabilizadora T1601, En el nuevo sistema de separación en la producción de etilbenceno, saldrá como producto de fondo de la torre, una mezcla etilbenceno – benceno rico en etilbenceno y posteriormente será separada en la unidad U1500 obteniéndose dos corrientes una de benceno en la torre T1501 regresada a la unidad U1600 como carga y una de etilbenceno en la corriente de xilenos torre T1503.

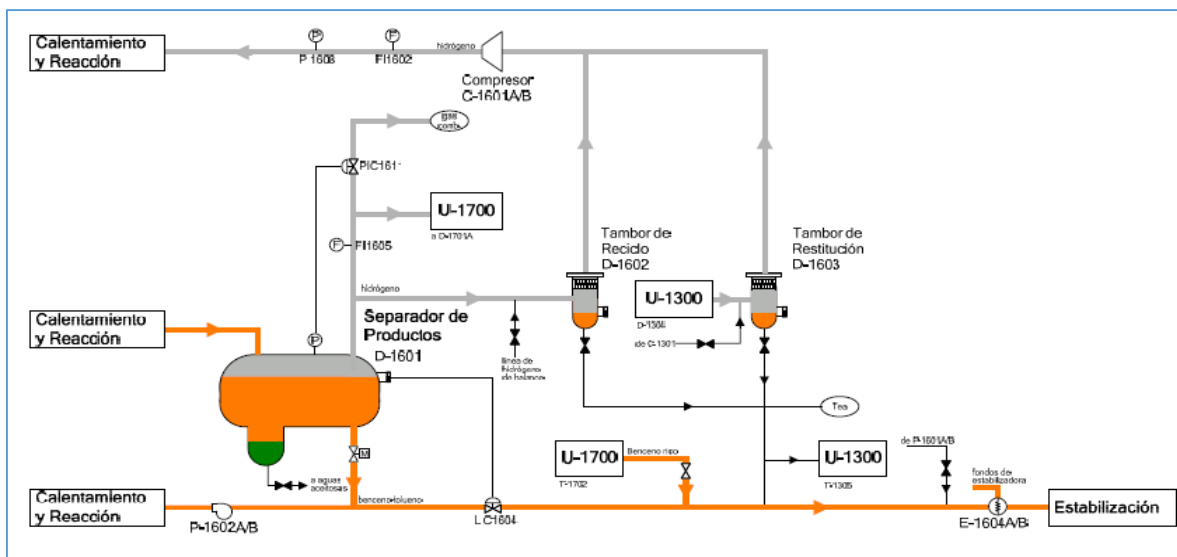


Figura 40. Diagrama de procesos Tambor Separador D1601.

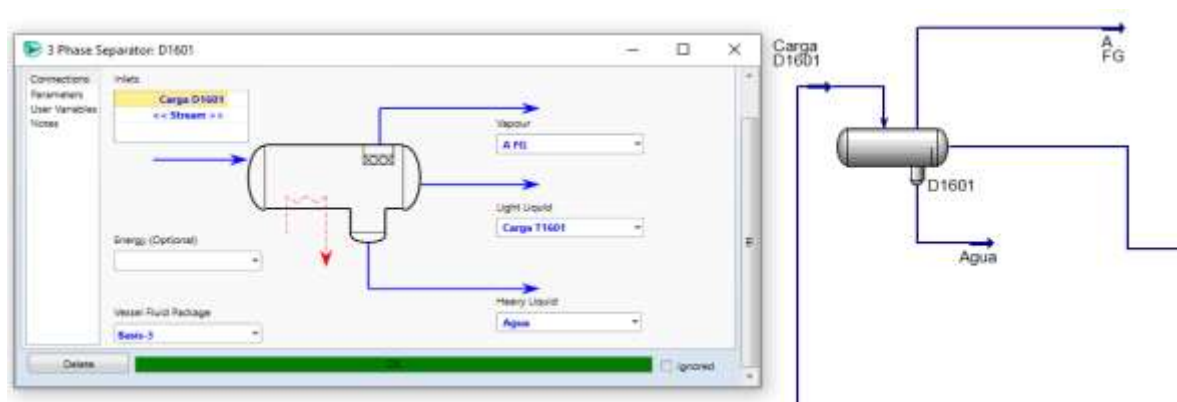


Figura 41. Convergencia del Tambor Separador D1601.

En la Figura 41 se muestran la convergencia del tambor separador D1601 que junto con la Tabla 14 se muestran los valores obtenidos para la remoción de hidrocarburos ligeros.

Tabla 14.

Valores reportados del tambor flash D1601.

	Carga	Carga T1601	Corriente	Agua
	D1601		Fuga	
	Fracción Molar [%]			
Benceno	0,49229713	0,49229713	0,66241624	0,49229713
E-Benceno	0,34642694	0,34642694	0,16628386	0,34642694
Dietilbenceno	4,72E-08	4,72E-08	9,33E-09	4,72E-08
Etileno	3,95E-13	3,95E-13	1,28E-11	3,95E-13
Trimetilbenceno	0	0	0	0
123-etilbenceno	0	0	0	0
135-etilbenceno	1,10E-06	1,10E-06	1,31E-07	1,10E-06
Propene	7,34E-03	7,34E-03	0,10441932	7,34E-03
Polietilbenceno	2,71E-03	2,71E-03	8,48E-04	2,71E-03
O-xileno	4,37E-02	4,37E-02	1,73E-02	4,37E-02
P-xileno	0,1057429	0,1057429	4,79E-02	0,1057429
M-xileno	1,74E-03	1,74E-03	7,77E-04	1,74E-03

Aunque se reportan valores de aromáticos en la corriente de fuga y agua, son valores totalmente despreciables cercanos al cero si se analiza la corriente como flujo másico, el reporte es debido a que en el caso real siempre hay arrastre y se registran muy pequeñas proporciones del producto deseado y materias primas. En la Figura 42 se muestra la torre manual GRB y en la Figura 43 se muestra la convergencia de la torre.

Los valores de fondo y cima se reportan en la Tabla 15, a consideración de ser una torre estabilizadora cuyo propósito es separar productos livianos, se obtiene una corriente pobre de cima y una corriente rica de fondo con el producto deseado y se hará el proceso de refinación en la unidad U1500.

Tabla 15.

Valores obtenidos en la torre T1601.

Compuesto	Cima	Fondo
Fracción Molar [%]		
Propene	0,9999	4,97E-16
Dietilbenceno	0	0
Benceno	0	0,49229713
Etilbencene	2,31E-05	0,34642694
Polietilbenceno	1,72E-15	5,42E-03
O-xileno	3,50E-09	8,74E-02
M-xileno	5,79E-09	3,47E-03
P-xileno	4,51E-07	0,011338
Tolueno	0	0
Etileno	0	0
Trietilbenceno	9,46E-31	2,19E-06

Por ultimo debido a que la separación de benceno, etilbenceno se da en la unidad U1500 se simulo este complejo manteniendo los parámetros de carga reportador por la GRB; dicha carga posee etilbenceno la cual sale como solventes en la corriente de xilenos, esto se da en la torre T1503 y el benceno se obtiene en la T1501 como se ilustra en la validación del modelo.

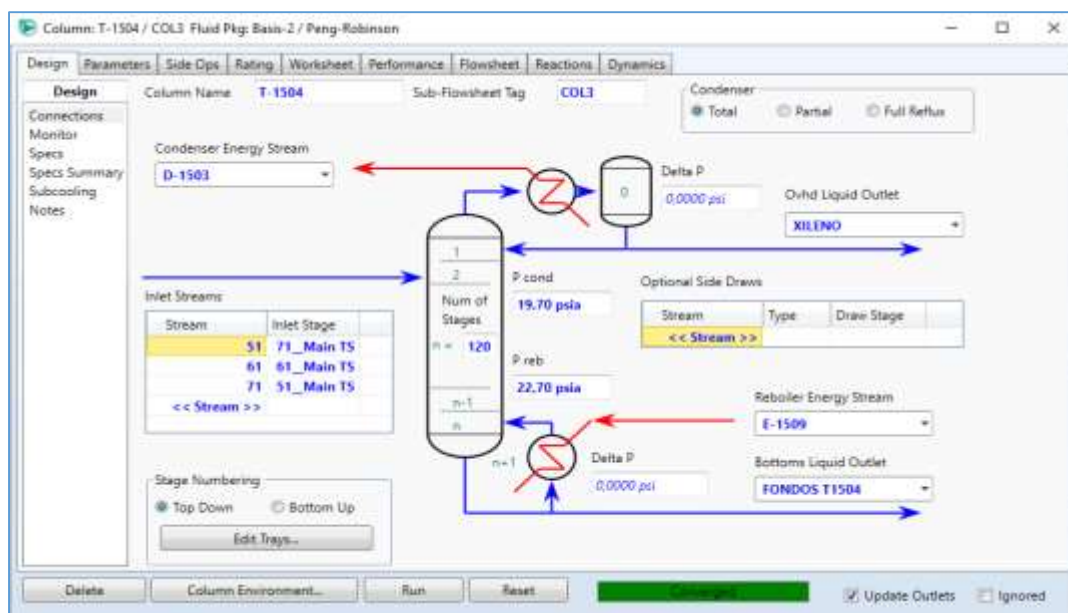


Figura 44. Convergencia de la Torre T1503.

En la Figura 44 se muestra la convergencia de la torre T1503 junto con la Tabla 16 se reflejan los resultados obtenidos frente a los parámetros de carga de la producción normal.

Tabla 16.

Producción de cima Torre T1503

	Ahora	Antes
Fracción Molar [%]		
Benceno	4,57E-16	6,61E-18
N-Bbenceno	3,31E-33	9,99E-31
Cumeno	4,90E-10	1,54E-10
Etilbenceno	0,29992256	0,14071854
Propilbenceno	2,23E-11	6,80E-12
O-xileno	7,99E-02	0,11455859
M-xileno	0,3385586	0,3385586
P-xileno	0,14819583	0,27270698
Tolueno	0,13345729	0,13345729

	Ahora	Antes
	Fracción Molar [%]	
Etano	0	0
Trietilbenceno	9,02E-31	0

Es notable observar un incremento del doble en la obtención de etilbenceno como diluyente en la línea de xilenos, a comparación con la carga habitual o anterior a la propuesta de la producción de etilbenceno, los resultados arrojan una producción de aproximadamente 320 BPD de etilbenceno. La recuperación u obtención de benceno de la mezcla de salida de la unidad se da en la torre T1501 analizada en la validación del modelo. Por último, se analiza la separación en la torre T1504, encargada de la separación de o-xilenos de los aromáticos pesados como polietilbencenos.

Tabla 17.

Producción Torre T1504

	Cima	Fondos
	Fracción Molar [%]	
Benceno	6,1536E-31	8,36E-31
N-Bbenceno	6,5309E-16	7,84E-04
Cumeno	8,0886E-06	8,74E-04
Etilbenceno	0,00071315	7,30E-09
Propilbenceno	9,3477E-05	0,98343846
O-xileno	0,95471812	1,49E-02
M-xileno	0,03336549	5,46E-06
P-xileno	0,01110168	1,53E-06
Tolueno	1,6969E-17	8,21E-31
Etano	0	0
Trietilbenceno	2,8841E-28	4,88E-06

La Figura 45 junto con la Tabla 17 muestran la convergencia de la torre T1504 y los valores de producción respectivamente, corroborando el funcionamiento de esta unidad destiladora en la obtención de o-xilenos.

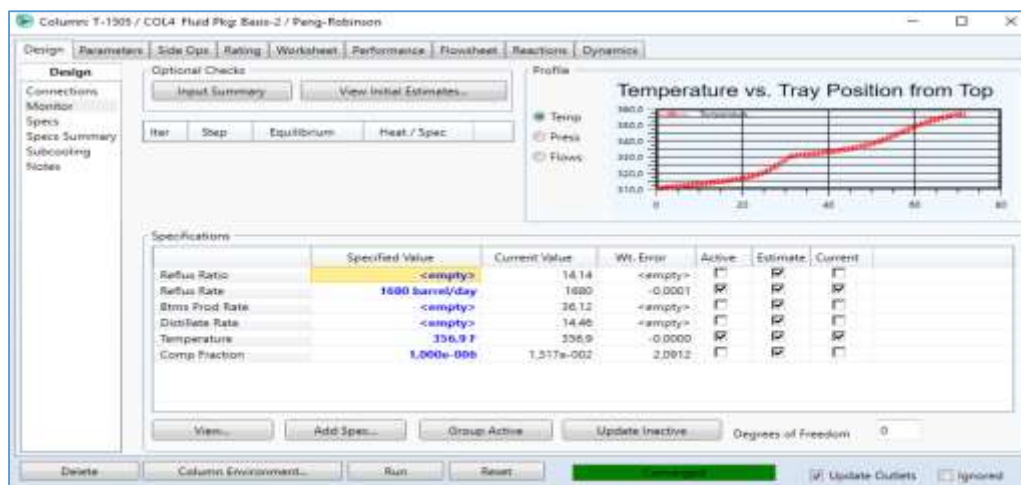


Figura 45. Convergencia de la Torre T1505

6.2.3 Sistema de precalentamiento.

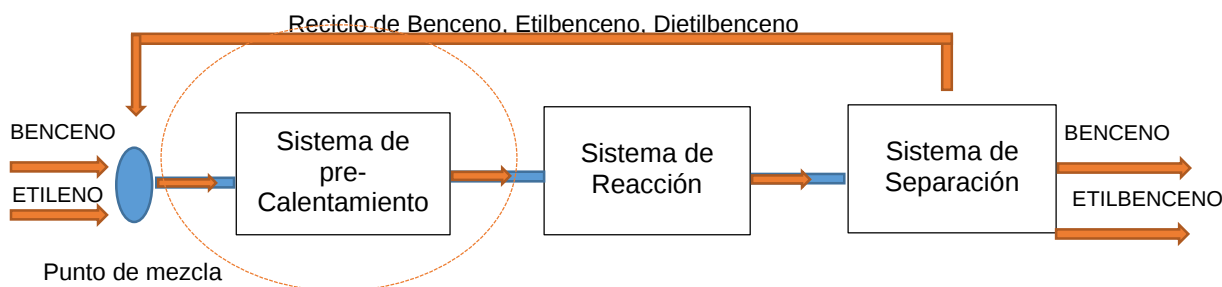


Figura 46. Sistema entrada-salida, zona de precalentamiento.

Por último, se dejó el sistema de precalentamiento puesto la filosofía como tal ya posee un sistema de integración energética, el cual aprovecha la temperatura del efluente del reactor para

intercambiar la energía producto de las reacciones exotérmicas, en los intercambiadores E1601, E1602 y E1606 (círculo azul), además de la temperatura de fondo de la torre en el intercambiador E1604 (círculo rojo) Figura 47.

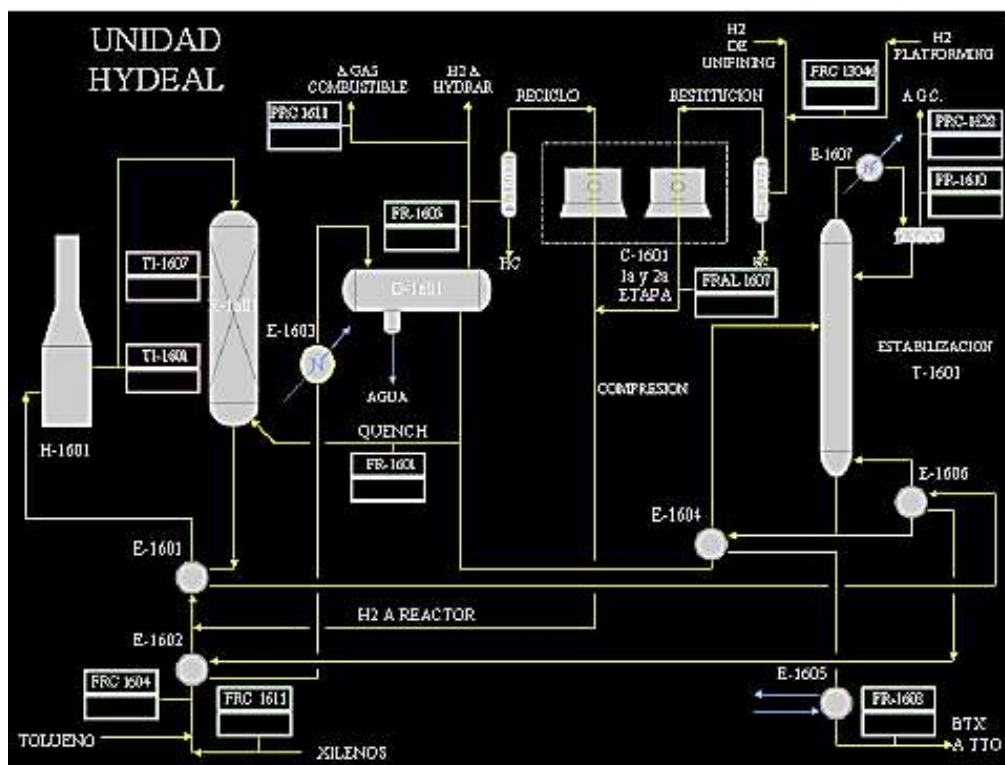


Figura 47. Diagrama de la unidad 1600 Integrado [GRB].

Debido a esto el único equipo que suministra el calor o sobre el cual se rige principalmente el control de temperatura es en el horno.

- Horno H1601.

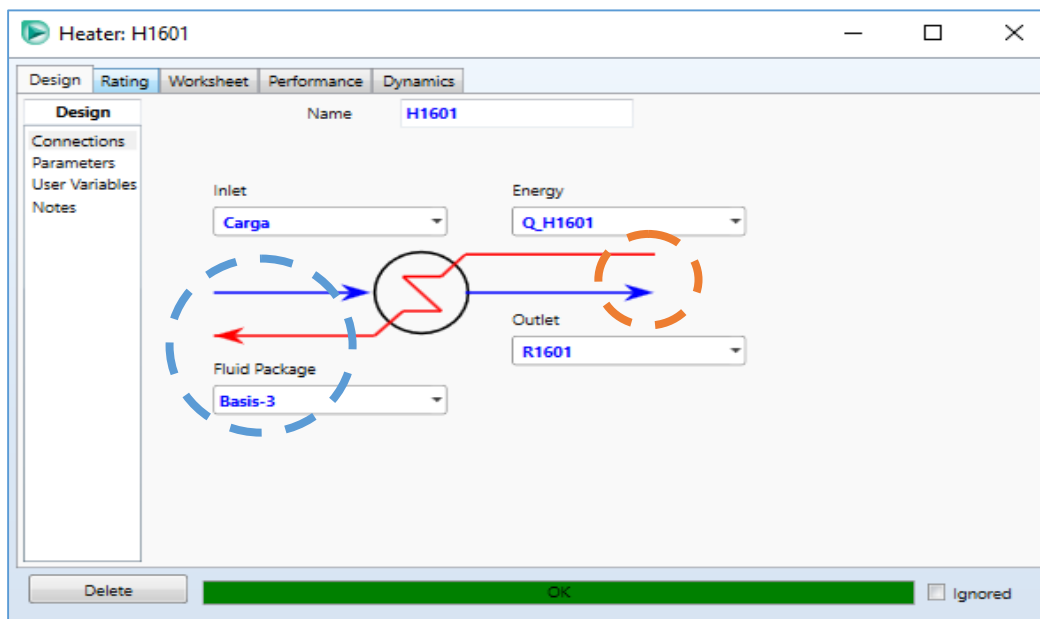


Figura 48. Convergencia del Horno H1601.

En la figura 48 se muestra la convergencia del horno H1601 para los efectos del trabajo se representa en un intercambiador de calor, la Tabla 18 se expresan los valores de los servicios industriales del horno y del sistema de enfriamiento E1603, E1605 y E1607.

Tabla 18.

Resultados obtenidos Horno H1601 e intercambiadores servicios industriales.

	ΔT [°F]	Duty [BTU/h]	tipo flujo	flujo [lb/h]
HORNO H1601	90,60	561952,04	GAS	3,53
E1603	368,58	2288321,71	AGUA	706077,59
E1605	174,94	314353,91	AGUA	604077,59
E1607	120,56	276437,98	AGUA	524507,32

Por último, se muestra de manera global el ambiente de simulación de la planta en Aspen HYSYS en la Figura 49, cuyo proceso completo se describe a continuación.

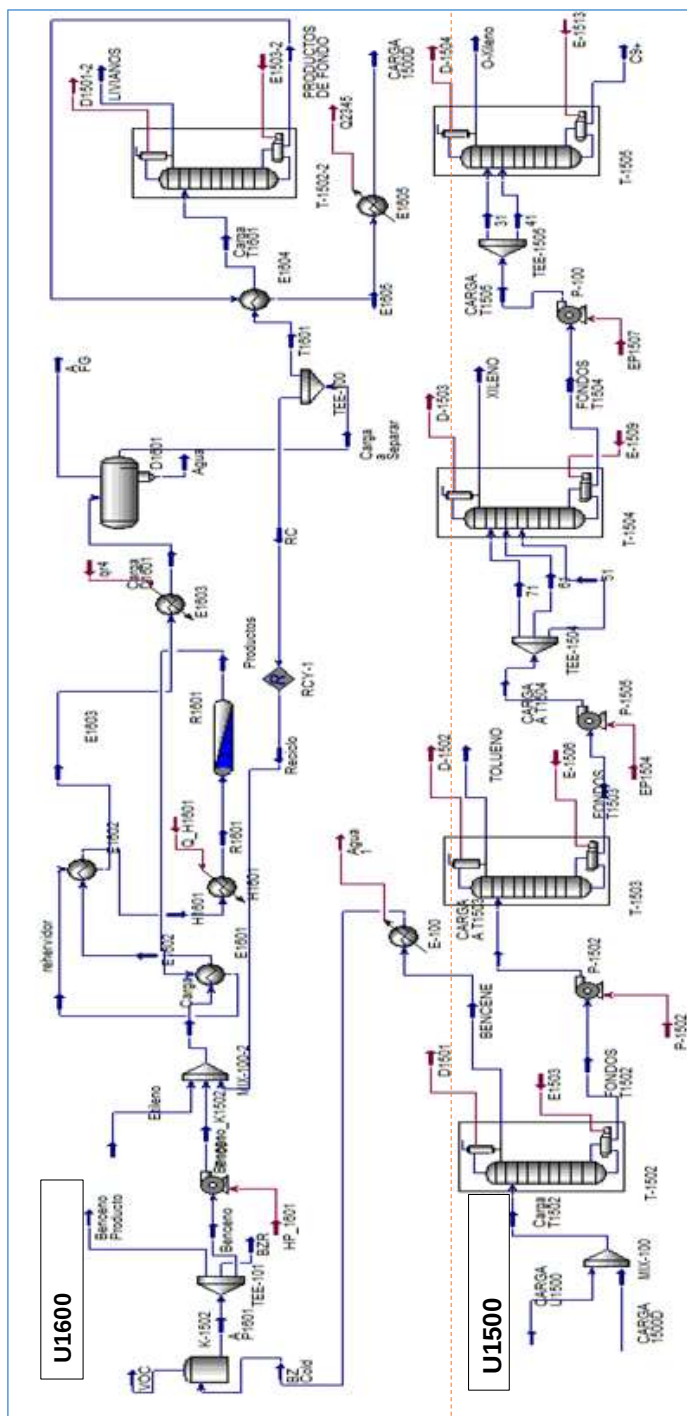


Figura 49. Planta productora ambiente Aspen HYSYS.

Se carga al reactor R1601, 350 BPD de benceno junto con 1445 lb/h de etileno en una relación 2:1 a una presión de 270 Psig, estos son calentados a 330 °F gracias al horno H1601 y los intercambiadores E1601 y E1602 quienes aprovechan el calor de reacción del efluente del R1601, el efluente del reactor R1601 es una corriente de etilbenceno – benceno rica en etilbenceno, sale a 608 °F y es enfriada por medio del condensador E1603 a 150°F y pasa al tambor separador D1601 del cual se retira agua de condensación y gases a su vez su carga controla la presión del sistema, de la salida del separador se distribuyen dos corrientes una de carga de reciclo de 160 BPD el equivalente a 2551 lb/h y se reincorpora al punto de mezcla para someterse al proceso de calentamiento y posteriormente de vuelta al reactor R1601, la otra corriente divide de 5584 lb/h pasa por el intercambiador E1604 quien aprovecha las corrientes de fondo de la torres estabilizadora T1601 para aumentar la temperatura a 200°F y entrar a dicha torre donde se despojan productos livianos y posteriormente el efluente de la torre se envía a la unidad U1500 para la separación y refinación. Ya en esta unidad la mezcla se recombina con la carga de esta unidad inicialmente pasa por la torre T1502 la cual se encarga de extraer todo el benceno remanente y reincorporarlo a la carga de la unidad U1600, en la torre T1503 se extrae tolueno, el lugar de obtención del etilbenceno es como disolvente en la línea de xilenos producto de cima de la torre 1504 dando como resultado una producción de 320 BDP de etilbenceno diluido y la última torre de este complejo torre 1505 extrae o-xilenos productos de cima y productos de fondos aromáticos pesados.

6.2.4 Principales reformas a efectuar en la unidad U1600. Las principales reformas efectuadas tendrían en el sistema de reacción puesto es aquí donde se reacondiciona toda la producción. Actualmente a la unidad U1600 no posee una línea de inyección de etilbenceno por

lo que es necesario la inserción de tuberías. En la Figura 50 se indican las dimensiones de las líneas que deberán instalarse para suministrar etileno a la unidad U1600. El etileno provendría de la unidad de Polietileno I.

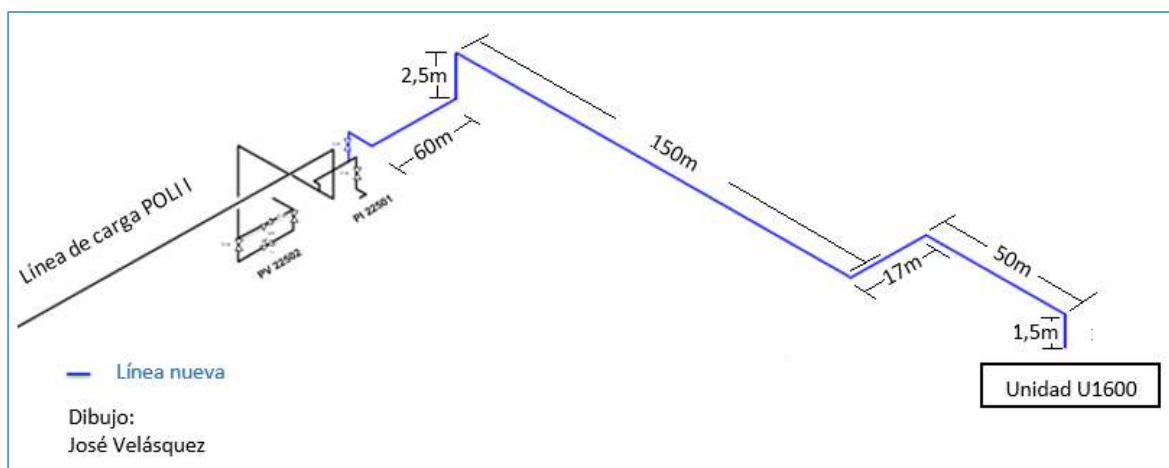


Figura 50. Instalación línea de etileno.

Además de las temperaturas y flujos que son una de las variantes a realizar en el sistema de precalentamiento, otra reforma importante es la implementación del catalizador de zeolita tipo B. Para ello el reactor R1601 de 25 m³ será llenado hasta un 80% como zona activa y sobre este se efectuarán las modificaciones pertinentes de soporte según las especificaciones del fabricante, las cuales incluyen; facilidades de inspección, en las cotizaciones previas por la empresa UOP indican 96 toneladas métricas para suplir la producción de etilbenceno.

Las demás líneas o sistemas obedecen a la misma filosofía de producción de benceno.

6.3 Evaluación económica.

6.3.1 Cantidad producida. Para la evaluación económica es importante definir la cantidad de productos producidos al implementar las opciones planteadas. En la reconversión de la unidad HYDEAL U1600 estaría lista para recibir 350 BDP de benceno proveniente de la unidad U1500 junto con una carga de 1445 lb/h de etileno, produciéndose 320 BPD o 4068 lb/h de etilbenceno en la corriente de xilenos.

6.3.2 Precio del producto. Se revisó en los índices económicos de la refinería los precios de los últimos 5 años de los productos de interés y se ajustaron a una tendencia lineal, con la finalidad de proyectar los precios que tendrán los productos en los años a evaluar, (Ver Figura 51).

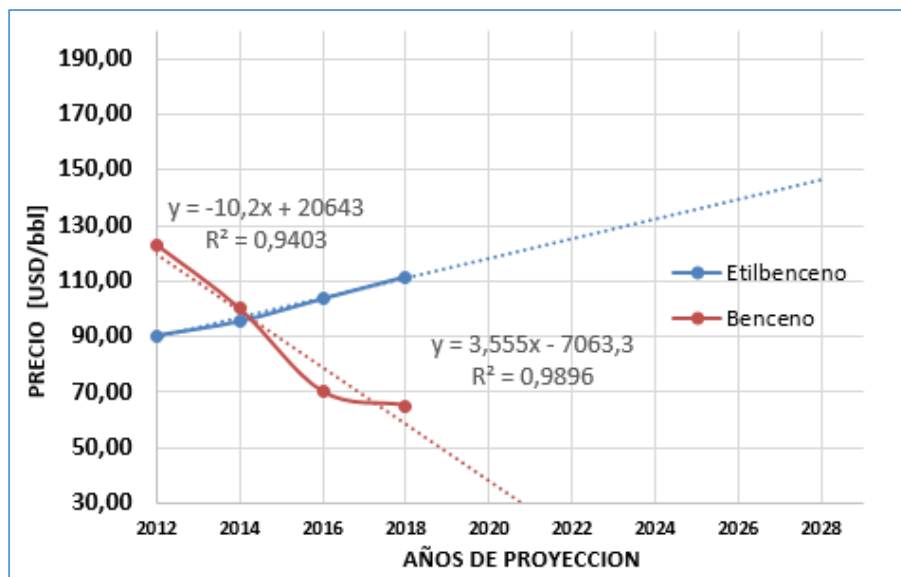


Figura 51. Proyección de precios

Además se empleó el sistema de precios sobre las cargas de la unidad U1500 del departamento de Planeación y Programación de la Producción, (ver Figura 52).

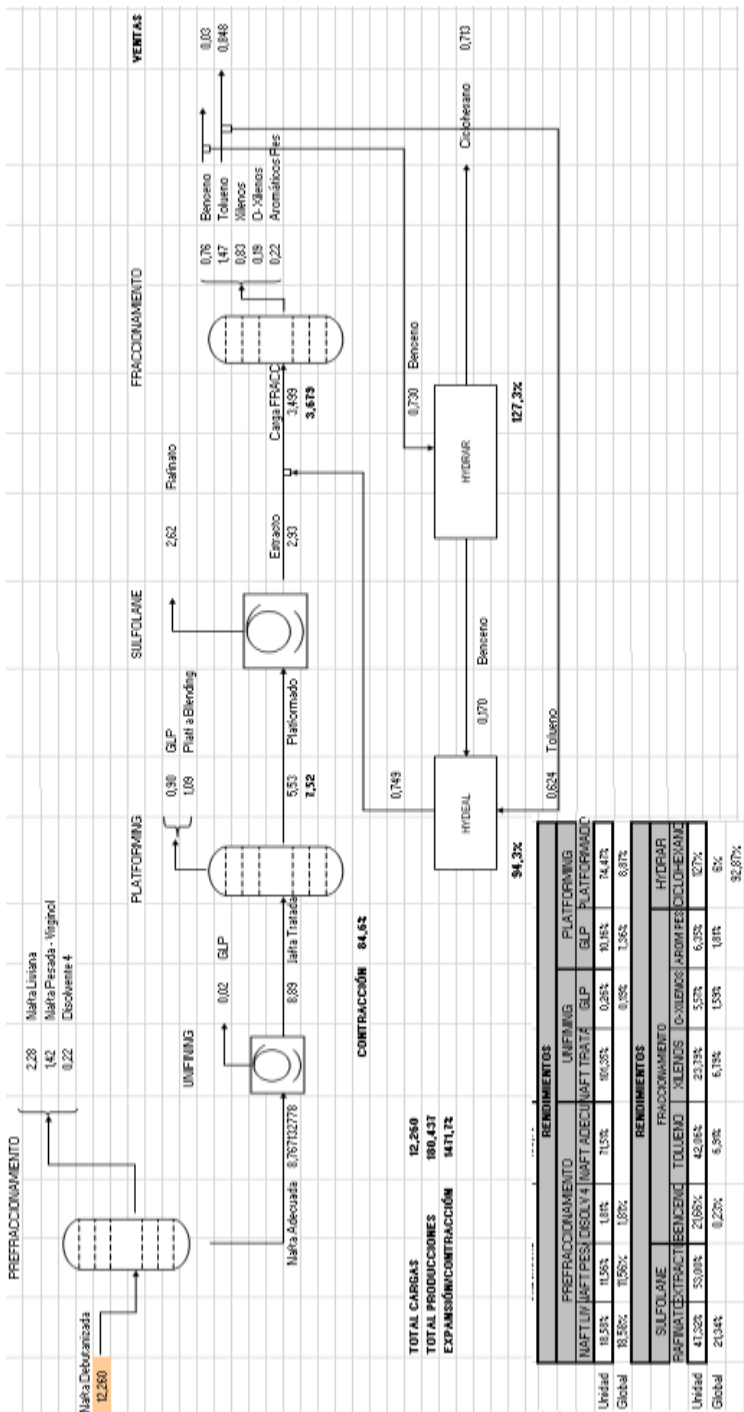


Figura 52. Esquema del departamento de Planeación y Programación de la Producción.

El esquema importa valores de producción promedios mensuales, del balance de materia de las unidades según la Figura 52, dando como resultados los valores que se reportan sobre el margen de utilidades en la Tabla 19 utilizando una base de datos de precios adjunta del departamento y la GRB.

Tabla 19.

Margen de utilidades

	RIS			PROGRAMA			TANQUES		
	KBPD	US\$/B	KUS\$/DIA	KBPD	US\$/B	KUS\$/DIA	KBPD	US\$/B	KUS\$/DIA
CARGAS	192,10	114,79	22050,45	11,45	114,79	1314,69	192,10	114,79	22050,45
Benceno	350,000	114,79	40175,21	0,020	50,00	1,00	0,000	50,00	0,00
Etileno	192,10	114,79	22050,45	11,45	114,79	1314,69	192,10	114,79	22050,45
PRODUCCIONES	0,03	204,84	5,73	0,02	204,84	4,10	-0,01	204,84	-1,60
Benceno	0,028	204,84	5,73	0,020	204,84	4,10	-0,008	204,84	-1,60
SUBPRODUCTOS	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
MARGEN DE HIDROCARBUROS			22044,72		0,00	1310,60		0,00	22052,05
COSTOS VARIABLES	40,42	6,71	26,28	38,26	6,71	25,20	40,42	6,71	26,28
PREFRACCIONAMIENTO	12,26	1,32	16,21	11,45	1,32	15,15	12,26	1,32	16,21
UNIFINING	8,77		0,00	8,18		0,00	8,77		0,00
PLATFORMADO	8,89		0,00	8,10		0,00	8,89		0,00
SULFOLANE	5,53	0,55	3,06	5,50	0,55	3,04	5,53	0,55	3,06
FRACCIONAMIENTO	3,50	1,26	4,40	3,50	1,26	4,40	3,50	1,26	4,40
HYDRAR	0,73	3,57	2,61	0,73	3,57	2,61	0,73	3,57	2,61
HYDEAL	0,75	0,00	0,00	0,79	0,00	0,00	0,75	0,00	0,00
MARGEN BRUTO		114,9	22071,00		116,6	1335,80		114,9	22078,33
COSTOS FIJOS SIN DEPREC									
DEPRECIACION									
MARGEN NETO (FLUJO DE CAJA)		114,9	22071,00		116,6	1335,80		114,9	22078,33

En la Tabla 20 se muestran los valores proyectados necesarios para el análisis económico, es de destacar que el etilbenceno tiene un crecimiento considerable, puesto que es materia prima para la elaboración de disolventes y compuestos poliméricos que elevan su valor. Adicionalmente, se presentó la proyección con los valores de venta del benceno resaltando su déficit en el mercado (ver Figura 51).

Tabla 20.

Precios de venta proyectados del producto de interés para el tiempo de estudio.

Precio [USD/bbl]	
Año	Etilbenceno
2020	117,8
2022	124,91
2024	132,02

6.3.3 Inversión económica.

- Inversión total.

En la Tabla 21 se presenta la inversión de capital para la adecuación del reactor, los bancos de tubería, la instalación de la instrumentación de medición y control con un TMR de 3,000.00 pesos colombianos/dólar estadounidense.

Tabla 21.

Inversión necesaria para la adecuación del Reactor R1601

ACTIVIDADES		COSTO	
		MCOP	USD
R1601	Catalizador	500	166,666.00
	Compra, mantenimiento y regeneración por año		
	96 TM zeolita tipo B, para un volumen del		
	reactor de 25 m ³		
	Mantenimiento general		
	• Interno: facilidades de inspección, retiro y	300,99	100,333.00
	lavado de malla, reparaciones menores.		
	• Externo: reparación boquillas, limpieza y		
	pintura.		

ACTIVIDADES		COSTO	
		MCOP	USD
Banco tubería	Compra 300 m tubería acero al carbón de 3 in de diámetro, instalación (juntas), alivio térmico, pintura, para el suministro de etileno en la Unidad U1600.	228,81	76,271.18
Accesorios	• Válvula de seguridad. • Cuadro control: flujo (materias primas). • Medidor de diferencial de presión	150	50,000.00
TOTAL		1179	393,270.18

- **Costos de operación.**

Para los costos de operación (Tabla 22) se tiene como consumo el agua de enfriamiento de los intercambiadores E1605 y E1607, se debe tener en cuenta el gas de combustible usado en el horno H1603. Por su parte, el aumento en el consumo de vapor se calculó a partir del modelamiento en HYSYS de la torre T1601.

Tabla 22.

Costos de operación

INSUMO	CANTIDAD	COP/año	USD/año
COSTOS			
SERVICIOS INDUSTRIALES			
Gas combustible	3908 Klb/año	69'724,541.06	23,241.51
Agua	2000 gal/año	30,102.00	10,000
Vapor	3908 Klb/año	53'957,828.57	17,985.71

6.3.4 Valor presente neto (VPN) y tasa interna de retorno (TIR). Para analizar la viabilidad financiera se elaboró una matriz de flujo de caja entre entrada y salida de efectivo, asumiendo un periodo de 5 años.

A partir de la matriz de flujo de caja (ver Figura 53), se obtiene que el valor presente neto es de \$ 1.102.288,17 USD, por lo tanto se puede concluir que este devuelve la totalidad de la inversión inicial realizada y que además genera utilidades, demostrando la viabilidad económica del sistema propuesto.

Se observa que la inversión se recupera en el primer año de operación (ver Tabla 23), de tal manera que la tasa interna de retorno (TIR) presenta un valor elevado correspondiente al 68%, lo que indica la alta factibilidad de este caso de estudio.

Tabla 23.

Matriz flujo Reconversión

MATRIZ DE FLUJO								
AÑO	PRODUCTO [bbl]	PRECIO [USD/bbl]	INGRESO [USD]	COSTOS OPERACIONALES [USD]	UTILIDADES ANTES DE IMPUESTOS	IMPUESTOS A LAS UTILIDADES	UTILIDADES DESPUES DE IMPUESTOS	VPN [USD]
2020								
CORRIENTE DE XILENOS (Etilbenceno)	11680	\$ 117,80	\$ 1.375.904,00	\$ 51.226,71	\$ 1.324.677,29	\$ 325.782,13	\$ 998.895,16	\$ 605.624,98
2021								
CORRIENTE DE XILENOS (Etilbenceno)	11680	\$ 121,35	\$ 1.417.368,00	\$ 53.788,05	\$ 1.363.579,95	\$ 342.071,24	\$ 1.021.508,72	\$ 1.021.508,72
2022	11680	\$ 124,91	\$ 1.458.948,80	\$ 56.477,45	\$ 1.402.471,35	\$ 359.174,80	\$ 1.043.296,55	\$ 1.043.296,55
2023	11680	\$ 128,46	\$ 1.500.412,80	\$ 59.301,32	\$ 1.441.111,48	\$ 377.133,54	\$ 1.063.977,94	\$ 1.063.977,94
2024	11680	\$ 132,02	\$ 1.541.993,60	\$ 62.266,39	\$ 1.479.727,21	\$ 395.990,22	\$ 1.083.737,00	\$ 1.083.737,00
2025	11680	\$ 135,57	\$ 1.583.457,60	\$ 65.379,71	\$ 1.518.077,89	\$ 415.789,73	\$ 1.102.288,17	\$ 1.102.288,17
Inversion total		\$ 393.270,18		TAM	0,05			
				TIR	0,68			

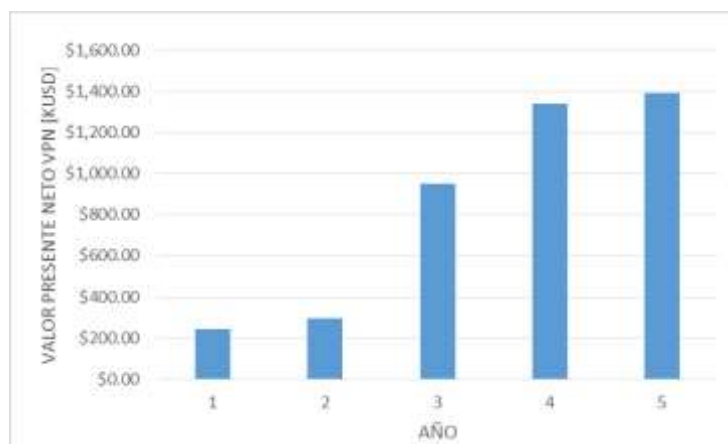


Figura 53. Valor Presente Neto para los años evaluados (2020-2024).

7. Conclusiones

La simulación de la reconversión de la unidad HYDEAL U1600 desarrollada en Aspen HYSYS, demuestra que la filosofía de la planta es adaptable a la producción de etilbenceno a partir de benceno y etileno, las condiciones iniciales del proceso para la carga del reactor R1601 son a 270 Psig y 330 °F con una relación de materia prima benceno – etileno 2:1 y un reciclo de etilbenceno – benceno de 160 BPD.

Para entender mejor el diseño conceptual se propuso a través de un sistema entrada-salida el cual incluye un sistema de precalentamiento, un sistema de reacción y un sistema de separación. Dado que la cinética de la reacción es diferente a la filosofía original, el equipo que prima es el reactor R1601. Con las adecuaciones propuestas, se alcanzaría una conversión del 90%, gracias a las medidas adoptadas sobre el reciclo y la capacidad del reactor, las reacciones de alquilación y transalquilación son posibles en el mismo reactor R1601 aumentando su eficiencia. La elección de la tecnología UOP Lummus/Crest es la que mejor se adapta a las condiciones límites y la patente licenciada en la GRB.

El análisis técnico-económico permitió validar la viabilidad de la iniciativa en términos monetarios, mostrando una tasa interna de retorno del 66%, un VPN positivo y que la recuperación de la inversión se podría lograr el primer año, ofreciendo un margen de ganancias en los cuatro años subsiguientes a la implementación del proyecto.

Referencias Bibliográficas

- Antonio, O. M.: (2012). Desarrollo De Catalizadores Metálicos Soportados Para La Obtención De Gas De Síntesis, Trabajo de Tesis Doctoral, Facultad De Ciencias Exactas. *Departamento De Química, Universidad Nacional De La Plata*.
- Arrol. (s.f.). Planta de Producción de Cumeno. *NYLON 66*.
- B., G. (2007). Acid Catalysts in Industrial Hydrocarbon Chemistry. *Chemical Review*, 107.
- Bellussi G., P. C. (2009). EniTecnologie S.p.A. *Via F. Maritano*.
- Berna Tejero, J. e. (1989). Alkylation of Aromatic Hydrocarbons in a Bed Catalytic Process. *Petroquímica Española*.
- Berzelius, J. (1835). Sur un Force Jusqu'ici Peu Remarquée qui est Probablement Active Dans la Formation des Composés Organiques. *Section on Vegetable Chemistry, Jahres-Bericht*, 14, 237, 1835.
- Bulasara V. K., B. V. (2010). Optimization of crude distillation system using aspen plus:Effect of binary feed selection on grass- root design. *Chemical Engineering*, vol. 88, 121-134.
- Caballero, J. A., & Milan, Y. D. (s.f.). Rigorous Design of Distillation Columns: Integration of Disjunctive Programming and Process Simulators. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.
- Dente, M. B. (2004). A comprehensive program for visbreaking simulation: product amounts and their properties prediction. *Computers & Chemical Engineering*, 1125–1134.
- Ecopetrol S.A. (2012). *Manual de operaciones planta Aromáticos* (Vol. 2). Barrancabermeja.

- G.J.T.P.T. Barger, R. H. (1998). US Patent,. *UOP*, 4,774,377.
- Haag, J. S. (1997). Handbook of Heterogeneous Catalysis. *G. Ertl, H. Knoezinger, J. Weitkamp (Eds.), VCH*, 21-23.
- Hoelderich, K. T. (1999). General 181 (1999) 399. *Appl. Catal. A*.
- Innes, R. e. (1990). Liquid Phase Alkylation or Transalkylation Process Using Zeolite Beta. 4,891,458.
- Gallegos J. (1998). Actividad y Regeneracion Catalitica en la Alquilacion del Tolueno, tesis magistral para optar por el título en Maestria en Ciencias con Especialidad en Ingenieria Ceramica. *Facultad de Ciencias Quimicas, Universidad Autonoma de Nuevo Leon*.
- Garcia José, & San Pedro, M. (Julio de 2010). Diseño y Validación de un Modelo de Evaluación por Competencias en la Universidad, Tesis Doctoral, para optar al título en Doctorado de Calidad y Procesos de Innovación. *Facultad de Ciencias, Departamento de Pedagogía Aplicada, Universidad Autónoma de Barcelona*.
- M. Gadalla, D. K. (2013). A New Optimisation Based Retrofit Approach for Revamping an Egyptian Crude Oil Distillation Unit. *Energy Procedia*, 455-464.
- M. VEGA, J. M. (2012). Análisis de la destilación primaria de petróleo. Torre Tipo II,» Montevideo.
- M.A.Goula, A. A. (1996). *Catal.* 161.
- M.C.J.Bradford, M. V. (1999). *Catal. Rev-Sci.Eng.* 41.
- Meyers, R. A. (2005). Manual de procesos de producción de petroquímicos. *McGraw-Hill Interamericana Tomo I*.
- Perego, 1. C. (2002). Corrigendum to recent advances in the industrial alkylation of aromatics. *Catal.*, 3–22.

- Pierson, H. O. (1993). Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes Noyes Publications.
- Raja, K. &. (2010). Optimization of crude distillation system using aspen plus:Effect of binary feed selection on grass-root design. *Chemical Engineering Research and Desing*, 121-134.
- Robertson, G. P. (2010). Refining Scheduling of Crude Oil Unloading, Storing, and Processing Considering Production Level Cost. *Computer Aided Chemical Engineering*, 1159-1164.
- S. F. ALI, N. Y. (2013). Profit Maximization of a Crude Distillation Unit,» de Profit Maximization of a Crude Distillation Unit, Kuala Lumpur.
- S.-G. Yoon, J. L. (2007). Appl. Therm. Eng 27. 886–893.
- Saraf D. N., B. K. (2002). Optimization of a Crude Distillation Unit with Constraints. *Chemical & Engineering vol. 41*, 1557-1568.
- Sardina, H. (1986). Dehydrogenation Process for Production of Styrene from EB Comprising Low Temperature Heat Recovery and Modification of the EB-Steam Feed Therewith. *Lummus Crest*, 4,628,136.
- Shi, B. X. (2017). Optimization of a crude distillation unit using a combination of wavelet neural network and line-up competition algorithm. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 1013-1021.
- Stadelhofer, H. G. (1988). Industrial Aromatic Chemistry. *Springer-Verlag*.
- Stromberg, A. (1988). A Handbook. to him.-Tekhnol. specials. universities / Ed. AG Stromberg. *Ed. AG Stromberg. - 2nd ed.,* 496.
- Sundaram, K. e. (1991). Styrene Plant Simulation and Optimization. *Hydrocarbon Processing*, 70, 7-93.
- T.F. Degnan Jr., C. S. (2001). App. Catal. 221-283.

Wang, S.-H. (1993). Styrene, Supplement C,” Process Economics Program Report No. 33C.

West, M. e. (1990). Alkylation Catalyst and Processes for Its Use. *Union Oil of California*.

Whittle, L. F. (1987). Method of Recovering Heat from Low Temperature Effluent. 4,695,664 .

Yesid, G. J. (2016). Modelamiento Detallado de la Planta Viscosreductora como Unidad Destiladora de Crudo en la Refinería de Barrancabermeja, Ecopetrol S.A.

Yi-feng Shi, Y. G.-c.-k. (2001). Chemical EngineeringScience 56. 1403-1410.

Yuliya Chsherbakova, I. D. (2007). Benzene Alkylation With Ethylene Process Mathematical Modeling. *1National Research Tomsk Polytechnic University (TPU)*.