

CONDICIONES DE OPERACIÓN DE UN PROCESO DE REACCIÓN-SEPARACIÓN PARA LA PRODUCCIÓN DE ETANOL

Mario Alberto González Lara (1), José Carlos Cárdenas Guerra (2)

1 [Programa de Licenciatura en Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato] | Dirección de correo electrónico: [mario_mexican@hotmail.es]

2 [Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato] | Dirección de correo electrónico: [carlogs@yahoo.com]

Resumen

La influencia de variables de operación (presión y relación de reflujo) es analizada, empleando ASPEN PLUS. El objetivo es determinar condiciones de operación donde existan regiones de operabilidad para la obtención de altas conversiones. La presión ejerce un efecto importante sobre el diseño del proceso, y un exceso en la relación de reflujo incrementa el consumo energético del mismo.

Abstract

The influence of operating variables (pressure and reflux ratio) is analyzed using ASPEN PLUS. The objective is to determine operating conditions where there are regions of operability for obtaining high conversions. The pressure has a significant effect on the process design, and an excess reflux ratio increases energy consumption.

Palabras Clave

Destilación reactiva; Equilibrio químico; Intensificación de procesos

INTRODUCCIÓN

Actualmente, el desarrollo de tecnología proviene de fuentes renovables de energía así como diversas vías de fermentación son las líneas de investigación de mayor interés en la industria de etanol. Sin embargo, la obtención de este producto a través de una síntesis directa ofrece características termodinámicas que permitiría la aplicación de la destilación reactiva para su uso como aditivo en las gasolinas.

¿Qué es la destilación reactiva?

La destilación reactiva es un proceso que conceptualmente integra las operaciones unitarias de reacción química y destilación en un mismo equipo físico representando uno de los ejemplos más sobresalientes de la Intensificación de Procesos [1, 2].

El beneficio económico más importante de la destilación reactiva es la reducción de inversión de capital y de costos de operación, al ser eliminada una unidad de proceso. Además, gracias a este proceso de separación reactiva es posible manipular la reacción química por medio de las condiciones de la destilación, es decir, el equilibrio químico puede ser desplazado a través de la extracción selectiva de uno de los productos deseados, mejorando de esta forma su selectividad. También, retirar uno de los productos reduce la velocidad de formación de reacciones laterales con el fin de suprimir productos indeseados. Asimismo, la destilación reactiva podría eliminar aquellas separaciones impuestas por la presencia de azeótropos, y el calor generado por una reacción exotérmica puede aprovecharse como fuente de vaporización, lo que conlleva a una disminución de la carga térmica en el rehervidor.

La destilación reactiva ha sido considerada como una nueva alternativa para diversas aplicaciones a nivel industrial [3, 4]. Tal es el caso del conocido proceso para la producción de acetato de metilo diseñado por la compañía química Eastman. La producción de éteres como MTBE, TAME y ETBE

(empleados como aditivos en las gasolinas) son auténticos prototipos exitosos de esta tecnología. En el marco de tecnologías de químicos finos, Tavan y Hosseini [5] estudiaron el inconveniente de un esquema intensificado de energía y el rompimiento del azeótropo de la mezcla etanol-agua. El proceso de destilación reactiva consistió de dos corrientes de alimentación, la primera es la mezcla azeotrópica y la segunda corresponde a etileno 100% puro. Dentro del proceso, agua y etileno reaccionaron reversiblemente entre sí para producir etilenglicol, un disolvente que modifica las volatilidades relativas de los componentes involucrados en el sistema no ideal. Los resultados mostraron que altas purezas de etilenglicol y alcohol etílico son obtenidos simultáneamente a través de esta configuración novedosa; por consiguiente, la purificación de etanol y la producción de etilenglicol se pueden llevar a cabo en un proceso integrado de alta eficiencia.

Bajo esta perspectiva, el objetivo del presente trabajo es analizar condiciones de operación en el proceso de producción de etanol usando destilación reactiva. Con base a un diseño conceptual del proceso se llevan a cabo simulaciones rigurosas a través de la plataforma de ASPEN PLUS. Para ello, la influencia de parámetros de operación tales como la presión y la relación de reflujo es evaluada.

MATERIALES Y MÉTODOS

De acuerdo con Sánchez-Daza y col. [6], el *diseño fundamental* de una columna de destilación reactiva (Imagen 1) para la producción de etanol incluye: 9 etapas de equilibrio, una zona reactiva y solo una zona de separación (sección de agotamiento); además, la ocurrencia del equilibrio químico en la zona reactiva juega un papel importante en el diseño de la columna. Para esto, la alimentación modela una mezcla líquida de 65% mol de etileno y 35% mol de agua. Las no idealidades de las fases líquido y vapor son estimadas utilizando el modelo termodinámico NRTL-RK. Las especificaciones de diseño de tal configuración se muestran en la Tabla 1. Para validar este diseño fue necesario llevar a cabo la simulación del proceso, mediante ASPEN PLUS, empleando un modelo de etapa en equilibrio con

reacciones químicas homogéneas. Esto significa que, los fenómenos de transporte de calor y masa no son considerados.

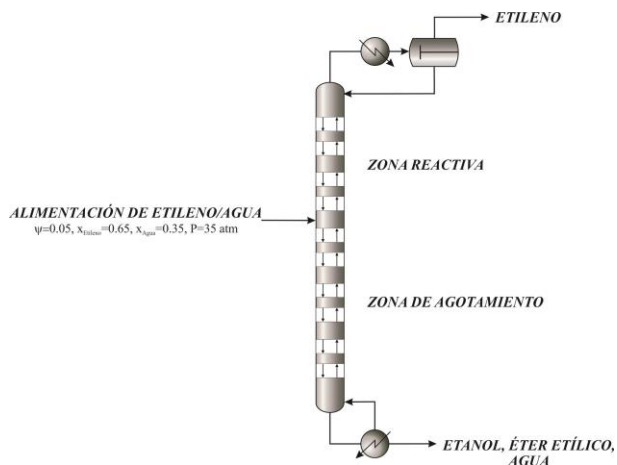


Imagen 1: Diseño fundamental de la columna de destilación reactiva para la producción de etanol.

Tabla 1: Especificaciones de diseño de la columna de destilación reactiva para la obtención de etanol

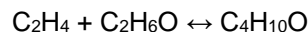
Parámetros de diseño y operación	
1. Etapas de la zona reactiva	2-4
2. Etapas de la zona de agotamiento	5-8
3. Etapa de alimentación de la mezcla etileno/agua	4
4. Condición de la alimentación (fracción vapor)	0.05
5. Flujo de fondos (kmol/h)	39.34
6. Relación de reflujo (molar)	11
7. Carga térmica del rehervidor (kW)	96.15

Caso de estudio

La producción de etanol (C_2H_6O), vía síntesis directa, es realizada por la reacción en fase vapor del etileno (C_2H_4) y agua a alta presión (49-79 atm) y entre 250 y 300°C empleando catalizadores ácidos como H_3PO_3/SiO_2 ; además, la reacción es exotérmica:



Cuando la relación etileno/agua en la alimentación es aproximadamente equimolar, la conversión de etileno fluctúa entre 7 y 22%. A presiones mayores, el etileno se polimeriza a butenos u olefinas de mayor peso molecular que, a su vez, pueden convertirse en alcoholes superiores al etanol por hidratación. A temperaturas inferiores de 250°C, se genera el éter etílico ($C_4H_{10}O$):



Cabe señalar que para todas las simulaciones realizadas, la presión de operación fue establecida en 35 atm, la cual hace posible la coexistencia de las fases líquido y vapor para el sistema reactivo. Asimismo, la implementación de un condensador parcial fue necesaria ya que recurrimos a la suposición de que el etileno es un componente supercrítico bajo esta presión de operación. Es importante mencionar que la línea punteada de color azul, dentro de las Imágenes 2 y 3, representa de estado estacionario de referencia.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Con el propósito de localizar regiones de operabilidad en el proceso de reacción-separación, dos variables de operación (variables manipulables o de entrada) como la presión y la relación de reflujo son examinadas, ya que son parámetros determinantes en la operación del proceso. Al mismo tiempo, estas regiones son desarrolladas por diagramas de bifurcación, de tal forma que se rastrea el estado estacionario del modelo cuando el valor de un parámetro denominado de "bifurcación" se incrementa o disminuye. En este sentido, nuestras variables de entrada son sinónimos de parámetros de bifurcación o de operación.

La influencia de la presión

Para tal situación, la conversión de etileno es la variable de salida (variable medible) que determina la región de operabilidad. Así, la Imagen 2 presenta una región entre los valores de 22.8 y 35.3 atm. Los estados estacionarios con alta

conversión para el etileno son localizados en valores menores de 30 atm.

La presión afecta al equilibrio químico y a la velocidad de reacción (principalmente, la temperatura de la zona reactiva). Conforme aumenta la presión en el proceso de destilación reactiva, la temperatura de la zona reactiva incrementa. Sin embargo, debemos tener cuidado ya que si la temperatura de reacción incrementa esto trae consigo un descenso en la conversión. Esto ocasiona que el equilibrio químico se desplace en retroceso (descomposición del producto).

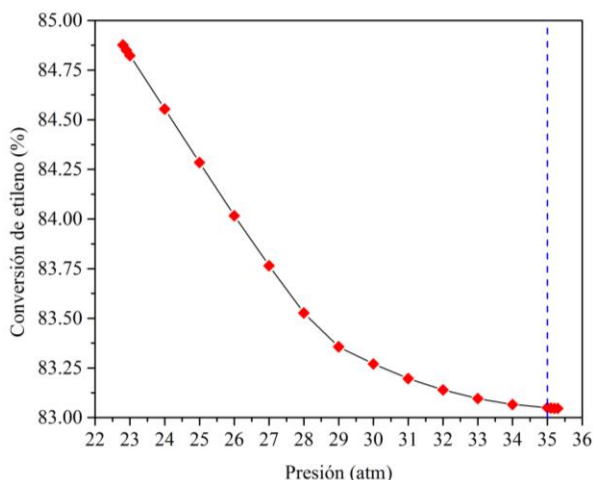


Imagen 2: Diagrama de bifurcación para la conversión de etileno con la variación de la presión.

La influencia de la relación de reflujo

Como se mencionó anteriormente, la conversión de etileno es la variable de salida. La región de operabilidad es localizada entre los valores de relación de reflujo de 8 y 100 (Imagen 3). Los estados estacionarios de alta conversión para etileno son localizados a valores en la relación de reflujo mayores que 30. Esto aumenta la separación de los productos a partir de sus reactivos. No obstante, un exceso en la relación de reflujo incrementa el consumo energético para condensar parcialmente el flujo de vapor. Asimismo, una velocidad de reflujo demasiado grande ocasionará que la columna de destilación reactiva rebase su punto de inundación y por lo

tanto puede causar una conversión incompleta. Por ello, es deseable operar el proceso en valores menores de relación de reflujo.

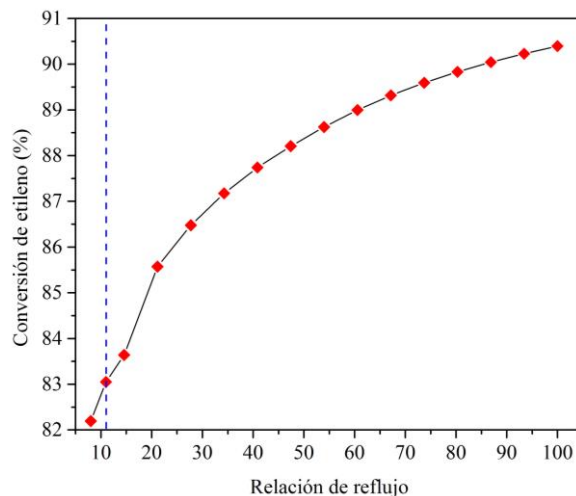


Imagen 3: Diagrama de bifurcación para la conversión de etileno con la variación de la relación de reflujo.

CONCLUSIONES

Un proceso de destilación reactiva para la producción de etanol se ha estudiado. Por medio de simulación rigurosa del proceso se analizaron los efectos de diferentes condiciones de operación que influyen en la localización de zonas de operabilidad a través de diagramas de bifurcación.

La disminución en la presión de operación repercute en un descenso de la velocidad de reacción, es decir, una menor temperatura en la zona reactiva favorece una mayor conversión de etileno.

La relación de reflujo para este diseño debe ser la óptima o la más económica, para el cual el costo total sea mínimo. Cualquier relación de reflujo entre el mínimo y el infinito proporcionará la separación deseada; lógicamente, el número correspondiente de etapas de equilibrio necesarias variará desde lo infinito hasta el número mínimo. De manera similar, el incremento de etapas reactivas será necesario para alcanzar la composición de salida, esto es, la producción de un alcohol de alta pureza.

Es posible, recircular el destilado vapor sin la necesidad de purificar su contenido, debido a que

la presencia de etanol es insignificante. El éter etílico al ser recirculado contribuye a desplazar el equilibrio de su reacción de producción en sentido inverso, favoreciendo la conversión a etanol.

REFERENCIAS

- [1] Stankiewicz, A., Moulijn, J.A. (2000). Process intensification: Transforming chemical engineering. *Chemical Engineering Progress*, 96(1), 22-34.
- [2] Taylor, R., Krishna, R. (2000). Modelling reactive distillation. *Chemical Engineering Science*, 55(22), 5183-5229.
- [3] Sharma, M.M., Mahajani, S.M. (2003). Industrial applications of reactive distillation. En K. Sundmacher & A. Kienle (Eds.), *Reactive distillation: Status and future directions* (pp. 3-29). Weinheim: Wiley-VCH.
- [4] Ng, F.T.T. (2006). Recent advances in catalytic distillation. En S. Lee (Ed.), *Encyclopedia of chemical processing* (pp. 2599-2611). New York: Taylor & Francis Group.
- [5] Tavan, Y., Hosseini, S.H. (2013). A novel integrated process to break the ethanol/water azeotrope using reactive distillation – Part I: Parametric study. *Separation and Purification Technology*, 118, 455-462.
- [6] Sánchez-Daza, O., Pérez-Cisneros, E.S., Bek-Pedersen, E., Gani, R. (2003). Graphical and stage-to-stage methods for reactive distillation column design. *AIChE Journal*, 49(11), 2822-2841.