

INTEGRACIÓN DE MODELADO MOLECULAR Y SIMULACIÓN DE PROCESOS APLICADOS A LA INGENIERÍA QUÍMICA

Patricia Flores Reyes¹, Paula Valeria Gonzalez Garcia¹, Santiago Monsalve-Silva², Gregor Hassel Rangel Almendarez¹, José Antonio Reyes Aguilera¹, Julio Cesar Armas Perez¹.

¹ Universidad de Guanajuato, Departamento de Ingeniería Química, Electrónica y Biomédica. División de Ciencias e Ingenierías.

² Universidad de La Sabana, Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Licenciatura en Ciencias Naturales, Facultad de Ingeniería. Grupo de Investigación GEMA: Energía, Materiales y Ambiente.

Autor de correspondencia: jc.arms@ugto.mx



Introducción

La síntesis de Cumeno se da en la reacción de propileno y benceno, sin embargo, el cumeno reacciona con el propileno y forma p-diisopropil benceno, un producto no deseado. Este proceso ilustra algunas características y principios de optimización en ingeniería química. A baja temperatura se favorece la reacción de benceno y propileno, dado que la reacción no indeseada tiene una energía alta de activación. Así mismo, se mejora con un exceso de benceno. En consecuencia, las principales variables son: el tamaño del reactor y la recirculación del benceno. Los objetivos del proyecto son:

Objetivo General

Emplear herramientas numéricas, para la optimización de procesos en Ingeniería Química.

Objetivos Específicos

- Desarrollar un pequeño simulador de procesos, con algunos equipos básicos que sirvan como material didáctico para entender el funcionamiento y ensamblaje de diferentes operaciones unitarias en un proceso de Ingeniería Química.
- Implementar la simulación molecular como una herramienta para el cálculo de ciertas propiedades termodinámicas en las cuales no se tengan datos experimentales.

Metodología

Con las composiciones y flujo molares, de entrada y salida otorgadas por el Turton (2003):

- Se verificó del balance de materia y energía.
- Se realizó una simulación en el programa Aspen V.10 con las especificaciones de cada equipo.
- Se desarrollaron una serie de códigos en Python 3 de cada equipo.
- Se empleó la simulación DM en Gromacs para el campo de fuerza OPLS obteniendo propiedades termodinámicas.

Tabla 1. Balance de materia de la producción de cumeno con codigos.

Número de flujo	F1A	F1B	F2	F3	F4	F5A	F5B	F6	F7
Temperatura (°C)	350	90	90	90	57	179	179	178	222
Presión (bar)	30.25	30.25	1.75	1.75	1.75	1.75	1.90	1.90	2.10
Fracción de vapor	1	0	1	0	0	0	0	0	0
Entalpía (kcal/mol)	22.44	3.33	3.87	3.67	7.59	0.06	0.02	0.06	0.01
Densidad (kg/m ³)	55.06	798.51	3.45	828.59	841.59	715.33	715.33	716.45	694.61
Peso molecular promedio	94.31	94.31	59.56	97.76	78.53	119.83	119.83	119.84	151.75
Caudales (kmol/h)									
Benceno	108.96	108.96	7.81	101.15	100.27	0.81	0.81	0.81	-
Propileno	8.86	8.86	6.21	2.66	-	-	-	-	-
Propano	8.06	8.06	5.36	2.70	-	-	-	-	-
Cumeno	94.39	94.39	0.76	93.63	1.01	92.61	92.61	91.76	0.92
p-DIPB	2.79	2.79	0.00	2.79	-	-	-	0.03	2.76
Total (kmol/h)	223.06	223.06	20.13	202.93	101.28	93.42	93.42	91.79	3.68

Tabla 2. Balance de materia de la producción de cumeno, obtenidos de ASPEN.

Número de flujo	F1A	F1B	F2	F3	F4	F5A	F5B	F6	F7
Temperatura (°C)	350	90	90	90	64	175	175	177	233
Presión (bar)	30.25	30.25	1.75	1.75	1.75	1.75	3.43	1.90	1.90
Fracción de vapor	1	0	1	0	0	0	0	0	0
Entalpía (kcal/mol)	22.1420	3.1353	3.8573	3.4506	11.5872	-1.3552	-1.3462	-0.6457	-13.1466
Densidad (kg/m ³)	55.0650	778.9212	3.4521	791.1776	817.3547	720.1247	719.9903	716.8780	679.9294
PM promedio	94.3127	94.3127	59.5605	97.8926	77.1267	121.1745	121.1745	120.0242	160.0729
Caudales (kmol/h)									
Benceno	108.9600	108.9600	8.0767	100.8833	100.3172	0.5661	0.5661	0.5661	0.0000
Propileno	8.8600	8.8600	6.4168	2.4432	2.4432	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propano	8.0600	8.0600	5.5469	2.5131	2.5131	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Cumeno	94.3900	94.3900	0.7884	93.6016	1.6164	91.9852	91.9852	91.8419	0.1433
p-DIPB	2.7900	2.7900	0.0028	2.7872	0.0002	2.7870	2.7870	0.1919	2.5951
Total (kmol/h)	223.0600	223.0600	20.8316	202.2284	106.8900	95.3384	95.3384	92.6000	2.7384

Tabla 3. Especificaciones de los intercambiadores de calor.

Flujos	F1A	C1	C2	R1	R2					
Caudal (Kg/h)	210136.92	261300	14624.7988	85860	29991.6754	87500	22015.81	3560	226904046	3250
Q(MJ/h)	16400	5390	5490	7100	5520					
U(W/m ² K)	58.61	302.5	450	95.27	284.72					
Área (m ²)	533	151	24	405	64					
Número tubos	463	540	647	475	497					
Número pasos	2	2	2	2	2					
Largo de los Tubos (m)	28.84	9.36	0.93	21.38	3.22					
BWG	18	20	18	18	18					
Diámetro Interno (m)	0.02291	0.01656	0.02291	0.02291	0.02291					
Diámetro interno de la Coraza(m)	0.7874	0.7874	0.9398	0.889	0.9398					
DMTL (K)	150.68	35.24	140.88	51.11	84.16					

Conclusiones

- La simulación molecular permite la comprensión de fenómenos o sistemas complejos. Siendo así una forma de realizar y construir conocimiento, ya que se puede tener una alta confiabilidad de resultados.
- Los resultados obtenidos con los programas en Python 3 del proceso de producción cumeno fueron altamente similares a los que se obtienen al simular el proceso en ASPEN Plus, indicando así la fiabilidad de los códigos elaborados.
- La simulación de procesos permite construir conocimiento en el área de Ingeniería Química y así mismo permite identificar las variables de optimización.

Referencias

1. Turton R., Bailie R. C., Whiting W. B. & Shaeiwitz J. A. (2009). Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. Upper Saddle River, N.J.: Prentice Hall, Third Edition.
2. Pérez Sánchez, A., Ranero González, E., Pérez Sánchez, E. J., & Líaño Abascal, N. (2020). Simulación del proceso de producción del cumeno mediante el simulador ChemCAD. Revista de Ciencia y Tecnología, 33, 38–46. <https://doi.org/10.36995/rct.2020.33.006>
3. Mahapatra, N. (2010). Design and simulation of cumene plant using Aspen Plus. (Bachelor of Technology in Chemical Engineering), National Institute of Technology Rourkela, India.
4. Crespo Ramos, Cristina (2017). Diseño y control de un proceso de producción de cumeno. Proyecto Fin de Carrera / Trabajo Fin de Grado, E.T.S.I. Industriales (UPM), Madrid.
5. Meneses Fernández Josafat. (2014). Material didáctico para la enseñanza sobre Intercambiadores de calor de tubos y coraza. Tesis para obtener el título de ingeniero Químico. UNAM (Facultad de Ingeniero). Mexico,DF.
6. E. J. Henley & J. D. Seader. (1990). Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. Barcelona, España: Reverté.
7. Leach, Andrew R. (1996). Molecular modelling principles and applications. 2da Ed. Prentice Hall.
8. The GROMACS. (2001). Development teams at the Royal Institute of Technology and Uppsala University, Sweden.
9. OPLS/CMIA. (2021). Parameter Generator for Organic Ligands. LigParGen. <http://zarbi.chem.yale.edu/ligpargen/>
10. Robert H. Perry. (2008). Perry's chemical engineers' handbook. New York: McGraw-Hill.
11. William L. Luyben. (1996). Process modeling, simulation, and control for chemical engineers. New York: William L. Luyben. 2nd ed.
12. William L. Luyben. (2010). Design and Control of the Cumene Process. Ind. Eng. Chem., 49, 719–734.
13. Hydrocarbon Processing, 68(10), p65–68, 1989. (Yaws, C. L. and Yang, H. C.)
14. W. V. Steele, R. D. Chirico, A. B. Cowell, S. E. Knipmeyer, and A. Nguyen. (2002). Thermodynamic Properties and Ideal-Gas Enthalpies of Formation for 1,4-Diisopropylbenzene, 1,2,4,5-Tetraisopropylbenzene, Cyclohexanone Oxime, Dimethyl Malonate, Glutaric Acid, and Pimelic Acid. J. Chem. Eng. 47, 725–739.
15. Warren, M. (2007). Operaciones Unitarias en ingeniería Química (7.a ed.). MCGRAW HILL EDUCATION.

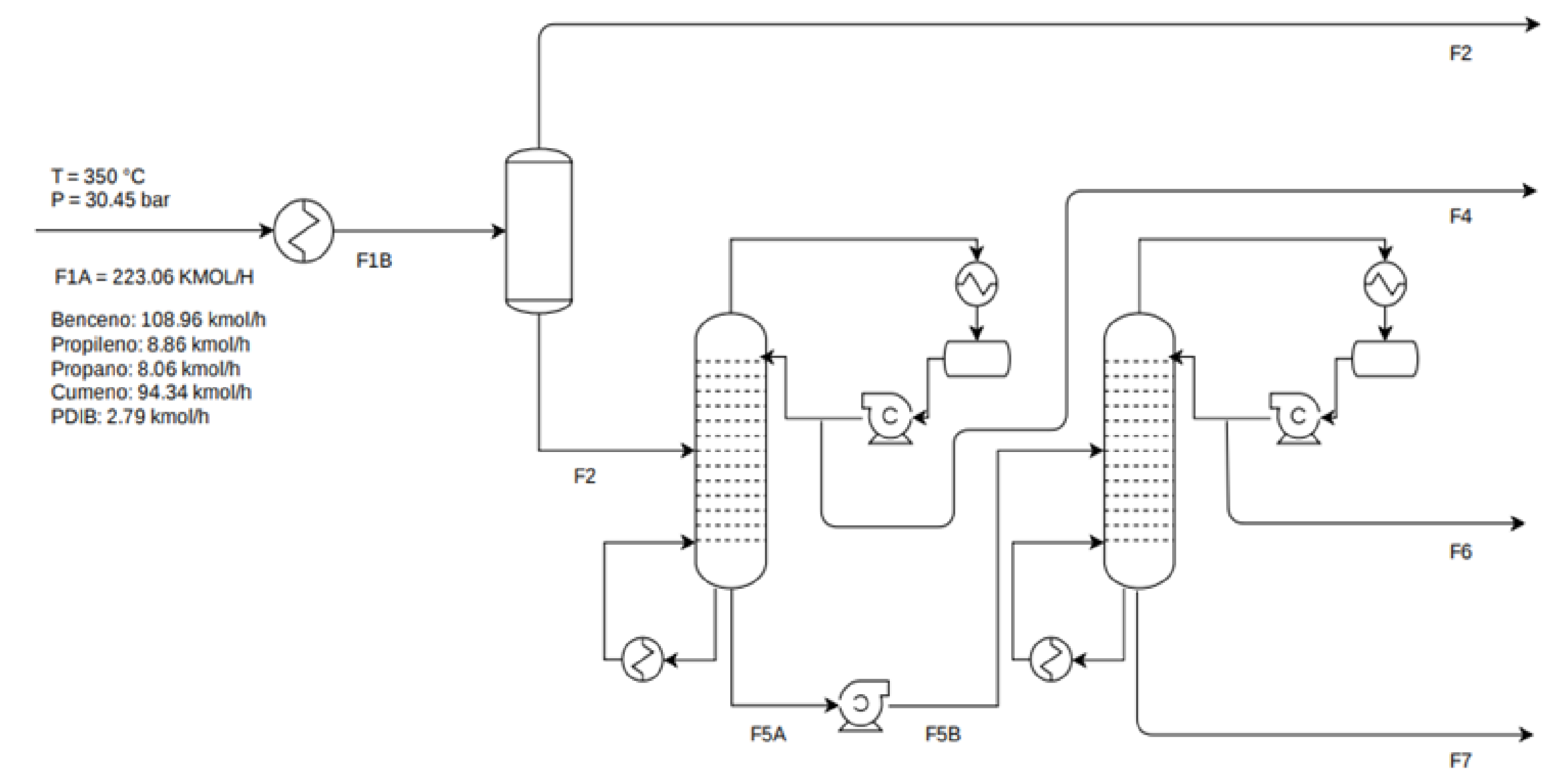


Figura 1. Diagrama de Flujo de la separación-purificación en la síntesis de Cumeno.

Para el desarrollo de los códigos en Python 3 de cada equipo se emplearon diferentes métodos y estos arrojan resultados con gran concordancia a los obtenidos con la simulación de Aspen.

Intercambiadores de calor:

- Se empleo el método Kern para obtener el número y largo de los tubos que cumpliera con los requerimientos del área para cada intercambiador.

Tanque Flash:

- Se implemento el método para un flash isotérmico con el modelo termodinámico ideal para obtener las composiciones del vapor y líquido.

Torres de Destilación:

Se acoplo el método de McCabe-Thiele para determinar el numero de platos ideales para obtener la recuperación de cumeno indicada en el proceso esto con ayuda el modelo termodinámico ideal.

Resultados

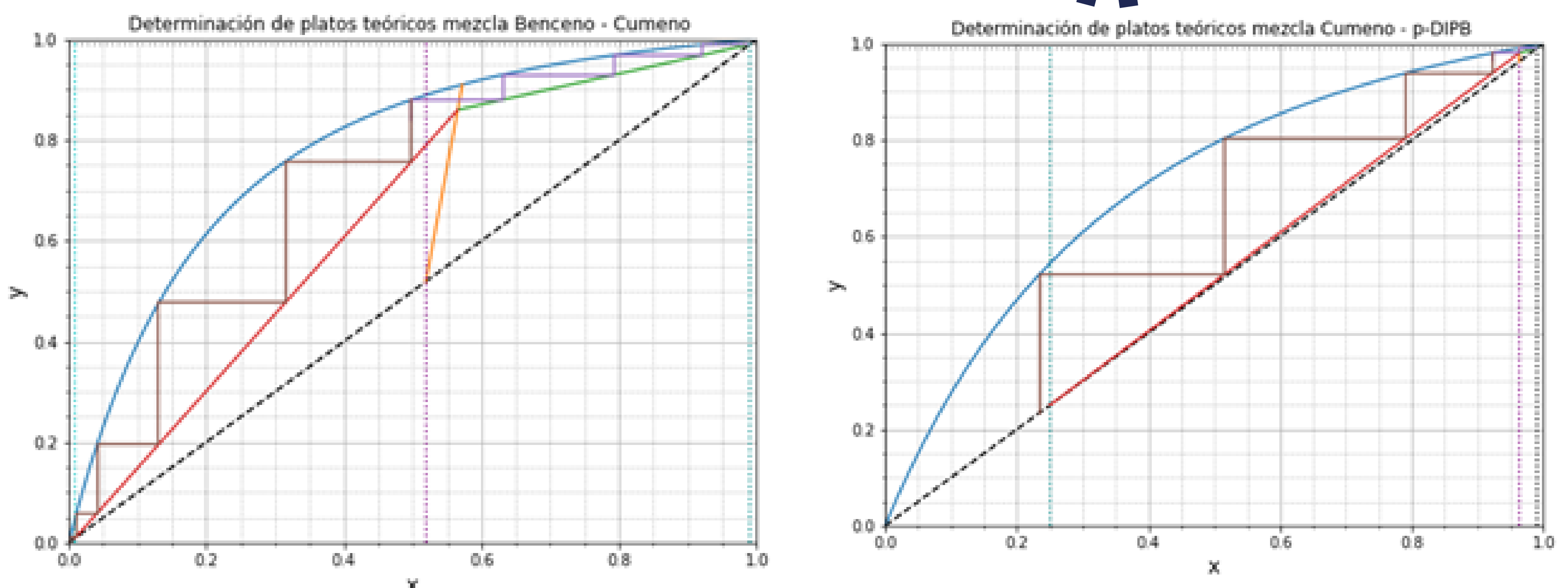


Figura 2 y 3. Determinación de platos teóricos mezcla Cumeno y p-DIPB. (Derecha), Determinación de platos teóricos mezcla Benceno y Cumeno (Izquierda).

Tabla 4. Algunas propiedades termodinámicas calculadas con DM.

Propiedades de DM	Codigos	Aspen Plus v.10	
Mezcla (propano-propileno-cumeno-benceno-DIPB)			
T=363K			
P=1.75bar			
Densidad (Kg/m ³)	816.028	828.59	791.18
Entalpía (Kcal/mol)	7.78	3.67	3.45
p-Diisopropil benceno con DM			
T=451.65 K			
Densidad (Kg/m ³)	694.5		
T=493.15K			
Densidad (Kg/m ³)	877.906		

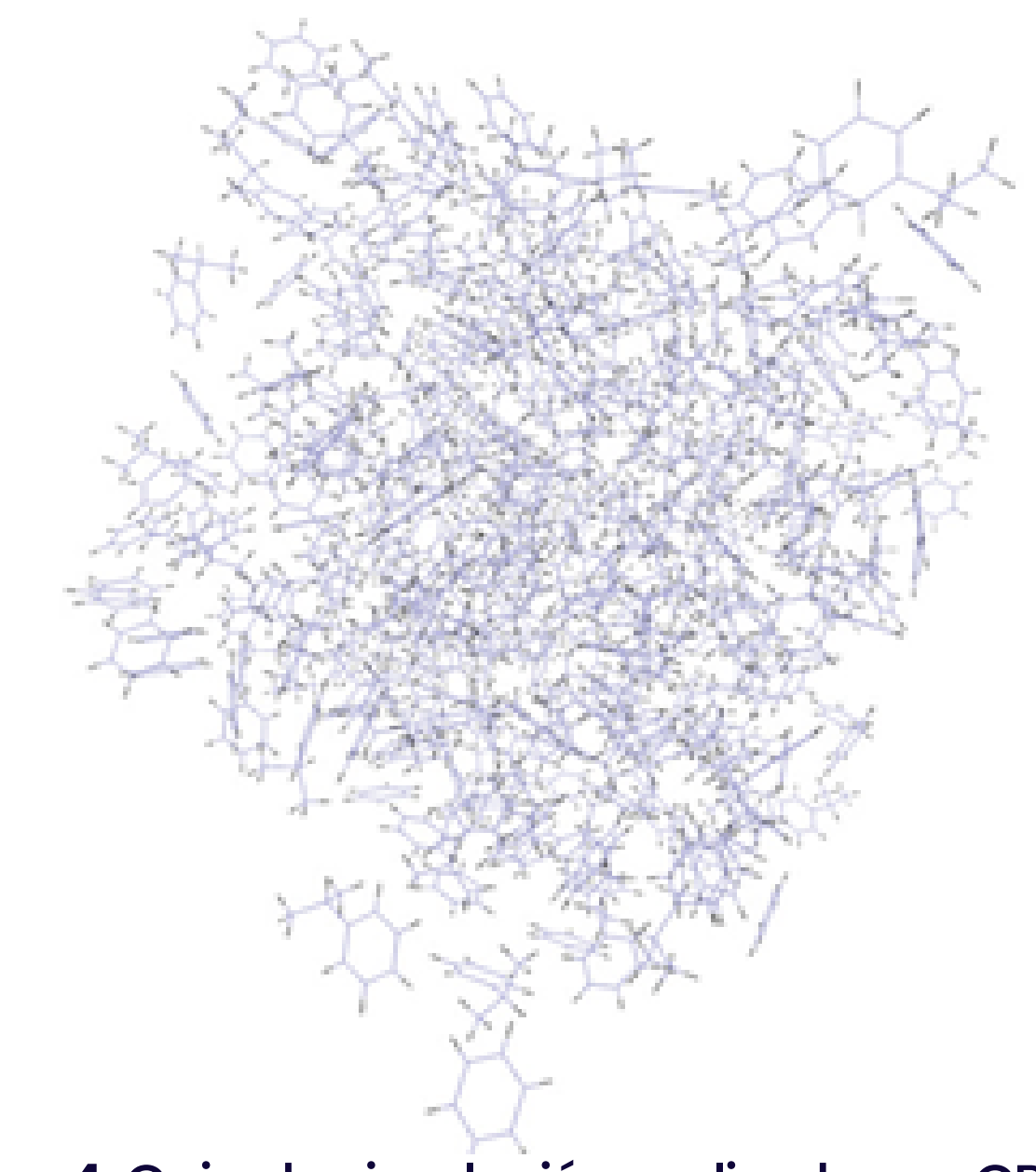


Figura 4. Caja de simulación realizada por GROMACS.