EBENZ S.L

PLANTA DE PRODUCCIÓ D'ETILBENZÈ

PROJECTE DE FI DE GRAU

Enginyeria Química

escola d'enginyeria

UAB Universitat Autònoma de Barcelona

Arnau Andrés Molina

Gemma Calero Casadesús

Alex Castañé Portales

Alvaro Chacón Garcia

Hanane Ghaddari

Ilias Hamido Mohamed

Tutor: Josep Anton Torà

Juny 2023

EBENZ S.L

PLANTA DE PRODUCCIÓ D'ETILBENZÈ

PROJECTE DE FI DE GRAU

Enginyeria Química

escola d'enginyeria

UAB Universitat Autònoma de Barcelona

CAPÍTOL 1

ESPECIFICACIONS

Taula de Continguts

1 Especificacions 3

1.1 Definició del projecte 3
1.1.1 Bases del projecte 3
1.1.2 Abast del projecte 4
1.1.3 Localització 4
1.1.3.1 Paràmetres d'edificació de la planta i plànol de la parcel·la 5
1.1.3.2 Serveis disponibles de la planta 6
1.1.3.3 Comunicació i accessibilitat 7
1.1.3.4 Característiques del medi físic 9
1.1.4 Abreviacions 11

1.2 Procés de produccio de l'etilbenzè 12
1.2.1 Mètodes d'obtenció d'etilbenzè 13
1.2.1.1 Reacció d'alquilació catalitzada per AlCl3 en fase líquida 14
1.2.1.2 Reacció d'alquilació catalitzada per zeolites en fase vapor 17
1.2.1.3 Reacció d'alquilació catalitzada per zeolites en fase líquida 18
1.2.1.4 Reacció d'alquilació catalitzada per zeolites en fase mixta líquid/vapor 20
1.2.1.5 Procés de producció d'etilbenzè per separació de xilens 21
1.2.2 Selecció del procès i del catalitzador 21
1.2.3 Caracterització del catalitzador 23
1.2.3.1 Principals tipus de zeolites sintètiques 24
1.2.3.2 Regeneració i desactivació del catalitzador 25
1.2.4 Característiques dels compostos implicats en el procés 26
1.2.4.1 Reactius principals 26
1.2.4.2 Productes 28
1.2.4.3 Subproductes i altres compostos 29

1.3 Diagrama de blocs i explicació detallada del procés 33
1.3.1 Diagrama de blocs 33
1.3.2 Diagrama de flux de procés i balanç de matèria 34
1.3.3 Comprovació del balanç de matèria 40
1.3.4 Descripció detallada del procés 40

1.4 Especificacions i necessitats de serveis de planta 43
1.4.1 Aigua de xarxa 43
1.4.2 Aigua contra incendis 43
1.4.3 Aigua descalcificada 44
1.4.4 Aigua de refrigeració 45
1.4.5 Electricitat, estació transformadora i grup electrogen 46
1.4.6 Oli tèrmic 47
1.4.7 Aire comprimit 48

1.4.8 Nitrogen 49

1.5 Planificació temporal 50

1.6 Bibliografia 52

1 Especificacions

En aquesta secció introductòria es presenten les especificacions que definiran la planta del projecte presentat (EBenz) i, on s'engloben aspectes com les condicions físiques, climàtiques i d'infraestructures de la localització de la planta, així com també les bases del projecte i el seu abast.

1.1 Definició del projecte

L'objectiu d'aquest projecta radica en el disseny d'una planta de producció en continu d'Etilbenzè fruit de l'alquilació del Benzè en presència d'Etilè.

A aquesta planta se li assignat el nom de EBenz S.L. y s'ha dut a terme un estudi de la seva viabilitat econòmica, social, operativa, mediambiental i funcional tenint en compte aspectes tals com la normativa sectorial i urbanística de la localització de la planta, en el polígon industrial 'Gasos Nobles' del terme municipal de Tarragona a Catalunya.

1.1.1 Bases del projecte

Tot sabent que l'objectiu del projecte detallat en la present memòria és l'estudi i la realització d'una planta química en continu i en fase vapor d'Etilbenzè en presència d'un catalitzador; cal esmentar les especificacions requerides alhora de dissenyar dita planta. Aquestes, queden recollides a continuació:

- ◊ Capacitat de producció: 350.000 tones a l'any d'Etilbenzè en estat líquid. No s'especifica cap puresa concreta del producte, tot i així els valors típics oscil·len al voltant d'un 99.5% de puresa.

- ◊ Presentació del producte: Producte en fase líquid i enllestit per enviament en bulk en tankers de 32 tones.

- ◊ Funcionament de la Planta: Es compta amb un total de 350 dies a l'any de producció en la planta. S'efectuarà una aturada de la producció per labors de manteniment i regeneració del catalitzador al llarg de les vacances d'estiu.

- ◊ Localització geogràfica: La planta s'ubica en una parcel·la al Polígon Industrial de 'Gasos Nobles', al terme municipal de Tarragona. El disseny, construcció i edificació han de complir el límits establerts per la normativa sectorial i urbanística, així com garantir un bon funcionament i gestió dels recursos, fent referència per tant a les vies de transport a utilitzar, l'impacte en l'entorn i en el medi, el reaprofitament dels recursos i subproductes provinents del propi procés de la planta, sempre que es pugui, o bé, exportant aquests components a altres localitzacions per al seu tractament.

1.1.2 Abast del projecte

El projecte de la planta de producció d'EBenz haurà de contemplar, com a mínim, les següents àrees per poder assumir que està finalitzat:

- ◊ Disseny de les unitats d'emmagatzematge de matèries primeres i de l'estació de càrrega i descàrrega dels compostos requerits i produïts a la producció.
- ◊ Disseny i especificació de tots els equips de procés i reacció per a la producció i purificació del producte, tot tenint en compte la qualitat del producte
- ◊ Disseny, enumeració i programació del sistema de control, instrumentació i automatismes necessari perquè la monitorització de la planta funcioni correctament
- ◊ Disseny, enumeració i especificació de canonades, vàlvules i accessoris
- ◊ Disseny d'emmagatzematge del producte acabat
- ◊ Inclusió d'àrees de serveis necessari per a donar abast a tota la planta
- ◊ Distribució d'oficines, laboratoris i vestuaris
- ◊ Distribució d'àrees auxiliars (Pàrquings, control d'accessos, contra incendis, gestió d'aigües i gasos)
- ◊ Avaluació econòmica del projecte, competència al mercat i reflexió sobre rendibilitat i viabilitat.
- ◊ Avaluació del impacte mediambiental (Efluents gasos, líquids i residus sòlids) i disseny del tractament de contaminants per reduir-los a valors per sota dels límits permesos per a cadascun
- ◊ Elaboració del protocol a seguir a la posta en marxa de la planta
- ◊ Dimensionament de la totalitat de la planta i distribució del procés en diagrames i plànols.

1.1.3 Localització

La localització de la planta, la qual es l'objecte del projecte es troba ubicat al terme municipal de Tarragona, capital de la província de Tarragona, a Catalunya, Espanya. El Polígon industrial en qüestió és l'anomenat 'Gasos Nobles' ubicat al costat del Polígon Químic de Tarragona. La planta es troba ubicada en una parcel·la que es troba delimitada pel carrer de l'heli i de l'argó, l'avinguda del neó i la del criptó.

Tarragona (CP: 43001), és la capital de la comarca Tarragonesa i, per extensió, també la capital de la província a la qual pertany. Aquesta localització facilita les comunicacions externes amb les plantes que allí resideixen, degut a la disposició dels diferents tipus de medis de transport que rodegen el polígon i del ràpid abast, cosa que impactarà molt en alguns aspectes com el medi ambient, la seguretat, els costos i, sobretot, la comoditat que suposa per produccions així [1].

La localitat limita amb les següents de oest a est: Reus, Constantí, Pallaresos, Catllar, La Riera i Altafulla[1]. Compta amb una població de 141.542 habitants amb diversos nuclis urbans que s'extendeixen al llarg de 63 km^2 tenint, per tant, una densitat de població de 2087 habitants/km^2. La parcel·la dista aproximadament a uns 100 km de Barcelona i a 3 km del centre de Tarragona[1].

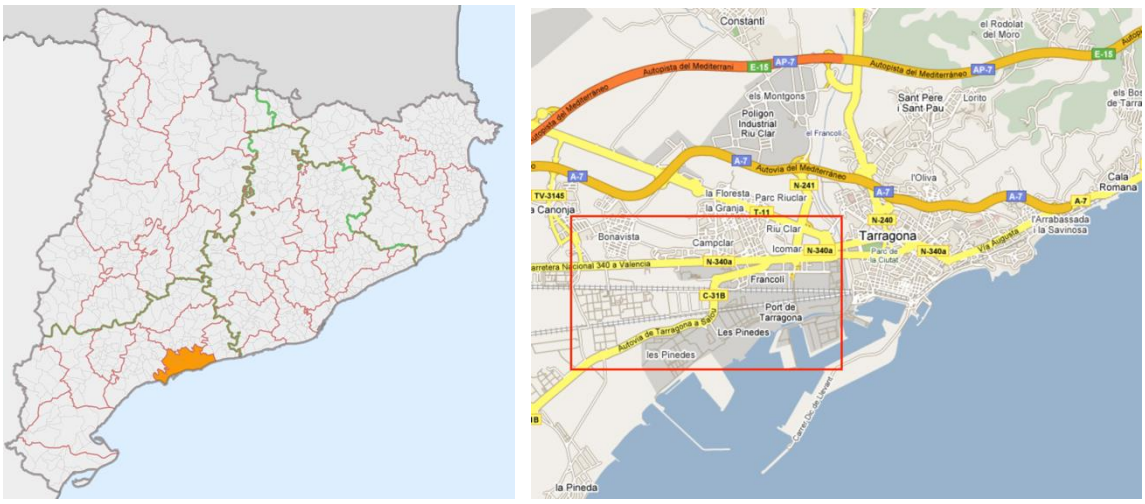


Figura 1.1: *Àrea del Tarragonès i entorn de la planta*

1.1.3.1 Paràmetres d'edificació de la planta i plànol de la parcel·la

La parcel·la on es preveu edificar la planta de producció de etilbenzè de la nostra companyia, EBenz, té una superfície de 53235 m^2 tal i com mostra la **Figura 1.2**.

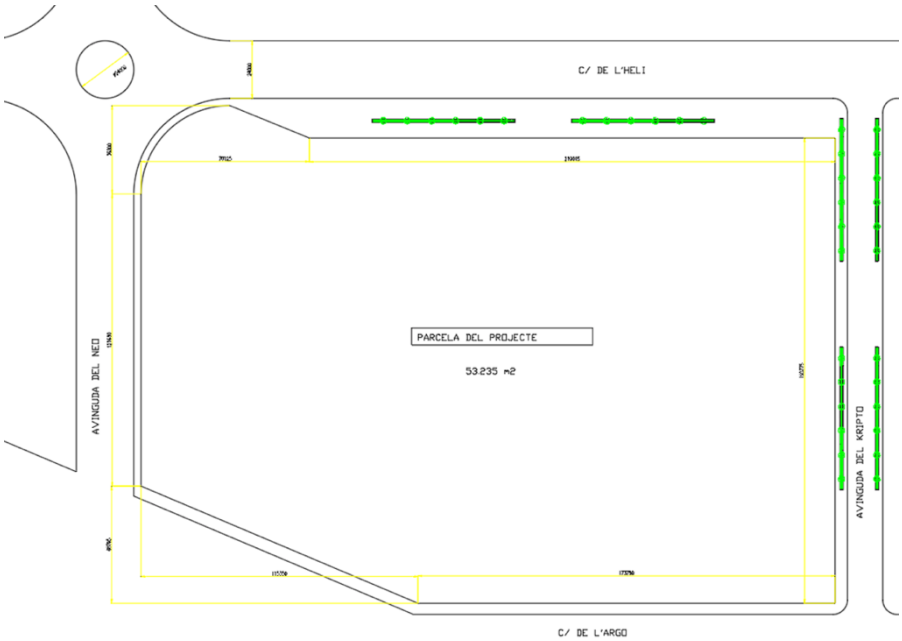


Figura 1.2: *Plànol de la parcel·la*

Per tal de respectar la normativa urbanística del polígon industrial s'han de respectar una sèrie de paràmetres d'edificació. Aquestes restriccions obligatòries es presenten a la Taula 1.1. adjunta a continuació:

Taula 1.1: *Paràmetres d'edificació de la planta*

Edificabilitat	1.5 m^2 sostre/m^2 sòl
Ocupació màxima de la parcel·la	75%
Ocupació mínima de la parcel·la	20% de la superfície d'ocupació màxima
Reculades	5 m a vials i veïns
Alçada màxima	16 m i 3 plantes excepte en producció tot justificant la necessitat pel procés
Alçada mínima	4 m i 1 planta
Aparcaments	1 plaça/150 m^2 construïts
Distància entre edificis	1/3 de l'edifici més alt amb un mínim de 5 m

Tal i com la **Taula 1.1.** mostra, l'ocupació màxima és d'un 75% de la superfície total de la parcel·la obtenint, per tant, un valor 39926.25 m^2. D'altra banda, l'ocupació mínim és un percentatge directe de l'ocupació màxima, concretament un 20%, per tant el valor se la superfície mínima és de 7985.25 m^2.

Per últim, la superfície final construïda ha estat de 36595 m^2, estant dintre del rang de valors permesos. També, s'han obtingut 244 places d'aparcament per la planta tenint en compte la proporció d'una plaça per cada 150 m^2 construïts. El nombre de treballadors i treballadores requerit pel bon funcionament del projecte és de 150.

1.1.3.2 Serveis disponibles de la planta

Per a poder realitzar totes les funcionalitats del procés productius així com les activitats auxiliars al procés productiu es requereixen una sèrie de serveis. Es postulen com a serveis essencials i d'ús comú els presentats a la **Taula 1.2.** presentada a continuació. En les normatives sectorials pertinents a la zona del polígon industrial 'Gasos Nobles', s'especifiquen tant distàncies com quantitats requerides de cadascun dels serveis, necessaris per tal d'establir aquesta planta.

Taula 1.2: *Serveis disponibles de la planta*

Energia elèctrica	Connexió des de la línia de 20 kV a peu de parcel·la, cal preveure una estació transformadora (Espai delimitat al Plànol)
Gas Natural	Connexió a peu de parcel·la a mitja pressió (1.5 kg/cm^2)
Clavegueram	Xarxa unitària al centre del carrer a una profunditat de 3.5 m ($D_{col\cdot lector}$:800 mm)
Aigua d'incendis	La màxima pressió és de 4 kg/cm^2, cal dissenyar una estació de bombament i reserva d'aigua
Aigua de Xarxa	Escomesa a peu de parcel·la a 4 kg/cm^2 amb un diàmetre de 200 mm
Terreny	Resistència del terreny a 2 kg/cm^2 a 1.5 m de profunditat sobre graves

1.1.3.3 Comunicació i accessibilitat

Aquesta secció és un aspecte crucial a l'hora de decidir on situar la planta, ja que la comunicació amb els proveïdors de matèries primeres, així com el transport i la comercialització del producte acabat, són factors importants que afecten tant l'economia com al temps, dues coses vitals per a una empresa. Encara que la bona comunicació és important, l'accés és fonamental perquè la indústria faciliti el procés i la distribució. A més, no és aconsellable emmagatzemar grans quantitats de substàncies químiques en aquesta mena d'indústria, ja sigui a causa de l'espai necessari o per evitar accidents greus. Com a resultat, la planta ha de tenir processos d'entrada i sortida gairebé diaris, que depenen de la seva ubicació i connexions.

A continuació es presenten les principals infraestructures de transport properes a la planta, que es troba a la Polígon Industrial Gasos Nobles de Tarragona. Aquesta zona ha sofert molts canvis en les últimes dècades a causa de les indústries petroquímiques que hi operen, fent-la ja orientada a les instal·lacions de producció. Cal assenyalar que Tarragona es troba a 8 km de Reus, la segona ciutat més significativa de la província, i a 100 km de Barcelona.

1.1.3.3.1 Transport terrestre

Començant pel transport automobilístic, és important tenir en compte que Tarragona té l'autopista AP-7 passant pel seu terme municipal, la qual és la principal via d'entrada i sortida. Aquesta autopista té una longitud de 1.109 km i connecta tota la costa mediterrània des de la frontera francesa fins al riu Guadiaro, facilitant la comunicació entre les ciutats d'Espanya i ajudant al trànsit d'Europa. És important destacar que l'autopista AP-7 uneix Tarragona amb l'àrea metropolitana de Barcelona, que es troben a tan sols 100 km de distància i on resideixen moltes empreses del sector industrial [2]. Com a alternativa gratuïta, es pot utilitzar l'autovia mediterrània A-7.

Pel que fa a la connexió amb l'interior d'Espanya, al nord-est de Tarragona hi ha accés a l'autopista AP-2, una de les sis autovies radials del país i l'única de Catalunya, amb origen a Madrid, la qual permet una comunicació directa amb la capital a 550 km de distància. A més, també hi ha l'autovia A-2, que crea una línia directa amb Lleida [3].

Tarragona té accés a diverses carreteres nacionals, entre elles la N-340, la carretera més llarga d'Espanya, que uneix Cadis amb Barcelona per la zona costera i passa per 10 províncies diferents, incloent València. Pel que fa al temps de desplaçament, es pot trigar aproximadament entre 1 i 2 hores des del polígon fins a Barcelona, mentre que amb vehicle propi es pot arribar al centre de Tarragona en 5 minuts i al de Reus en 10 minuts des del Polígon. També es poden destacar algunes carreteres comarcals com la C-14, la C44 i la C-32, que tenen connexió directa amb Tarragona i Reus, així com carreteres nacionals de menys rellevància com la N-420 i la N-240. Tot el comentat en aquest paràgraf i en els anteriors es pot observar en la Figura 1.2.

Els treballadors de la zona tenen accés a línies d'autobús diürnes i nocturnes que comuniquen els pobles del voltant. També hi ha diverses línies de tren que uneixen Tarragona amb Barcelona, pertanyents a la xarxa de rodalies catalanes, que ofereixen una bona comunicació terrestre.

Aquesta connexió també és important per al transport de mercaderies, ja que el port de Tarragona està directament connectat amb les línies que van a Saragossa-Madrid, València i Barcelona.

Figura 1.3. *Connexions terrestres a Tarragona*

1.1.3.3.2 Transport marítim

El polígon químic de Tarragona, on s'ubica la planta d'EBenz, es troba molt a prop del Port de Tarragona, un dels més grans de la costa mediterrània i un port clau a Espanya i Europa, amb servei directe a 46 països. Compta amb una plataforma específica per a vaixells carregats de cru de petroli i els seus derivats i està preparat per manipular quantitats considerables de productes químics necessaris i generats. El Port de Tarragona és el port químic de referència al sud d'Europa, amb més de 32 milions de tones moviment anualment, dels quals el 6,8% està relacionat amb productes químics importats i exportats [4]. Utilitzar aquest port garanteix una varietat de rutes marítimes i la capacitat de vendre productes tant a nivell nacional com internacional. El transport pot no ser el més ràpid, però suporta l'expansió efectiva de l'empresa a l'estranger. Les dades sobre les mercaderies transportades al Port de Tarragona es troben recollides a la **Taula 1.3.**

D'altra banda i, com a segona opció, es té el Port de Barcelona. El Port de Barcelona és el més gran de Catalunya, situat a 100 km de Tarragona, ben conegut a nivell global, amb àrees adaptades per a càrregues específiques, comercials i industrials i una ubicació òptima per dirigir els rebuts que arriben des de diversos ports i rutes marítimes cap als diferents polígons industrials europeus.

Taula 1.3: *Recull de mercaderies per tipología del Port de Tarragona* [3]

Evolución de los tráficos (en toneladas)			
	2017	2018	2019
Gráneles líquidos	22.035.857	19.849.475	21.210.546
Gráneles sólidos	9.505.432	9.988.264	9.718.750
Mercancía general convencional	1.487.982	1.612.644	1.324.310
Mercancía general en contenedores	591.681	556.216	454.389
Avituallamiento	75.563	79.685	76.676
Pesca	3.670	3.626	2.933
Tráfico local	0	0	14.472
Total tráfico marítimo	33.700.185	32.089.911	32.802.076
Tráfico terrestre	328.050	315.444	380.844
Totales	**34.028.235**	**32.405.355**	**33.182.920**

1.1.3.3.3 Transport aeri

El transport aeri és una opció per connectar internacionalment el moviment de mercaderies i passatgers, però és el menys utilitzat a nivell nacional a causa del seu cost i limitacions en la quantitat de matèries que pot transportar en un sol vol. L'aeroport més proper a la planta química és el de Reus, que tot i no ser un dels més utilitzats per al trànsit de productes, ajuda a estar connectats amb la resta d'Espanya i capitals europees. L'aeroport de Barcelona és una altra opció important, ja que té un gran volum de mercaderies transportades anualment i ofereix moltes rutes internacionals. Les companyies de transport de càrrega més importants són Emirates Sky Cargo, FedEx Express, MNG Airlines, Swiftair i UPS Airlines [5].

1.1.3.4 Característiques del medi físic

En aquest apartat es realitza un estudi de les característiques geogràfiques i climatològiques del territori per prendre decisions durant el procés de disseny i construcció de la planta. Es destaca la importància de conèixer el terreny per evitar inconvenients i complir amb la normativa de Construcció Sismo-resistent. La localització de Tarragona a la costa mediterrània, a 33 metres d'altitud, proporciona condicions que seran detallades en els apartats següents.

1.1.3.4.1 Climatologia

En aquest apartat es fa referència al clima de Tarragona, el qual correspon a la climatologia pròpia mediterrània. Aquest clima es caracteritza per tenir hiverns suaus i estius calorosos, però no excessivament calorosos, fet que fa que sigui una zona molt poblada i atractiva per viure i treballar.

1.1.3.4.1.1 Temperatura

La temporada de calor a Tarragona dura uns tres mesos, amb temperatures diàries mitjanes superiors als 26ºC. La temporada freda dura uns quatre mesos i la temperatura màxima mitjana no sol arribar als 17ºC. Les temperatures mitjanes oscil·len entre els 10ºC a l'hivern i els 25ºC a l'estiu, amb temperatures de tardor a 19ºC i de primavera a 16ºC. En general, la temperatura no supera els 30ºC ni baixa dels 5ºC a Tarragona [1].

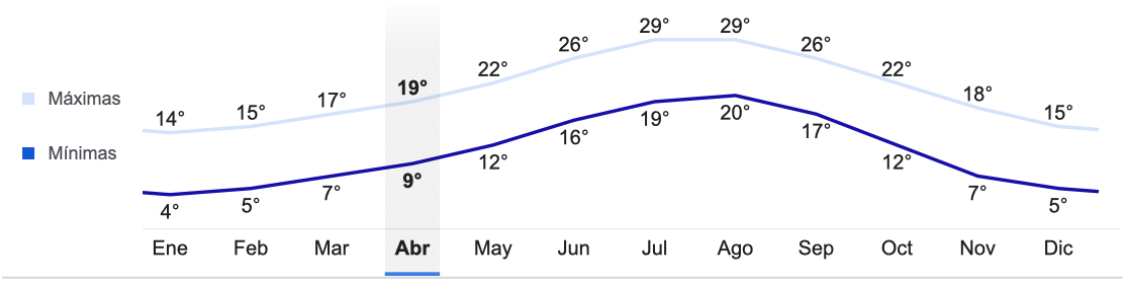


Figura 1.4: *Temperatures anuals (ºC) a Tarragona [1]*

1.1.3.4.1.2 Precipitacions

Les pluges són irregulars, amb la primavera i tardor registrant el major nombre de precipitacions. La pluja d'aigua és el tipus de precipitació més comú, mentre que la neu és poc freqüent. La temporada forta de precipitacions és de setembre a octubre i la més baixa en juny i juliol. La mediana anual de precipitacions a Tarragona és de 42,57mm. Les precipitacions més baixes es presenten al mes de juliol amb valors de 15,9mm. D'altra banda, les precipitacions més altes registrades anualment en aquest municipi es troben al mes de setembre, amb valors de 74,9 mm.

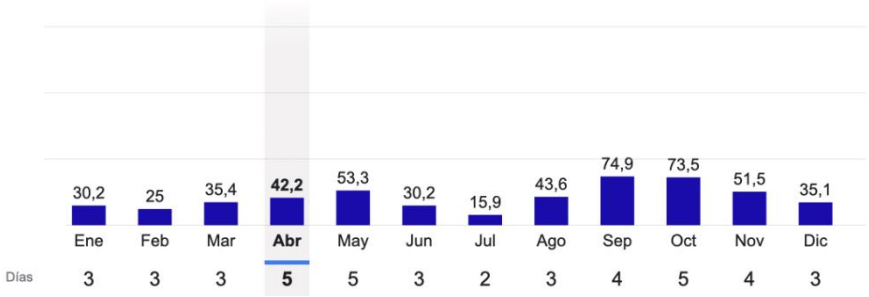


Figura 1.5: *Precipitacions anuals (mm) a Tarragona* [1]

1.1.3.4.1.3 Humitat

Aquesta característica al terreny, ve determinada en part, pel fenomen de precipitacions exposat recentment. Depenent quan i com cauen les fortes pluges, la temporada d'humitat presenta la seva extensió. Al territori de Tarragona, la humitat varia de formes extremes, fent així que el període més humit duri aproximadament 4 mesos compresos entre juny i octubre, temps en el que l'ambient de comoditat és xafogós, opressiu i insuportable, majoritàriament al mes d'agost. Per contra, al febrer, es situen els dies amb condicions humides més baixes. Generalment, la humitat mitjana a Tarragona oscil·la al voltant del 68% [1].

1.1.3.4.2 Geologia

A la zona de Tarragona, es poden apreciar dues àrees separades pel riu Francolí. En el sector occidental, la topografia és prou uniforme, en canvi en el sector oriental, el territori es presenta més irregular i elevat. Tot i això, el municipi en general no supera en cap punt altituds de 200 metres.

En relació a la litologia, de forma general i resumida, aquest territori, al llarg dels anys ha anat format capes al terreny que corresponen al següent, en la zona superficial hi ha una matriu creada per graves, sorres i lutites i seguidament apareix una nova capa més ampla, de lutites, gresos i conglomerats. Si es continua baixant pels plecs, apareixen les calcàries, margues i dolomies, pel que queda conformat un territori compacte, ric en nutrients i resistent [6].

1.1.3.4.3 Hidrologia

Com bé es coneix, l'aigua territorial està distribuïda en dos grans grups, per una banda la subterrània, aquella que no veiem però circula sota els nostres peus, i per l'altra banda la superficial, les costes i rius presents en la zona.

L'aigua subterrània corresponent al municipi de Tarragona, està comptabilitzada amb la del Baix Francolí i els estudis de la mateixa corroboren que és prou perjudicial si no se li aplica cap tractament, ja que apareixen alts valors de substàncies químiques com nitrats, plaguicides, ja que també és una zona prou explotada per l'activitat agrària y també s'han detectat vessaments industrials. La zona litoral on s'ubica la planta, també té risc d'intrusió salina amb valors superiors a 1100 mg/L, pel que s'ha de dur un control ja que existeix risc d'inundacions i derivats més greus.

Les aigües superficials s'organitzen per conques hidrogràfiques i el municipi de Tarragona correspon a tres d'elles: La conca del Francolí, la conca de la punta de la Mora, sent aquesta la que ocupa major superfície, i la conca de Gaià. A més, el Camp de Tarragona, actualment disposa de dos embassaments suportant una mitjana d'uns 23 h$m3/any$ i abasteix els regs del territori i les necessitats de les poblacions dels voltants [7].

1.1.3.4.4 Sismologia

D'acord amb l'Institut de Estadística de Catalunya, Catalunya difícilment supera el valor 3 de la escala de Ritcher. Els terratrèmols menors a 3 a l'escala de Ritcher son generalment imperceptibles. Llavors, la sismologia tampoc serà un factor significatiu a tenir en compte durant la construcció de les instal·lacions i edificis [8].

1.1.4 Abreviacions

A continuació, el que es mostra en la taula, es la lletra que identifica els diferents equips que conformen la planta de producció. Això és útil per tal d'identificar cadascun dels equips dintre els P&ID en el moment de la seva lectura.

Taula 1.4: *Nomenclatura dels Equips*

Equips	Nomenclatura
Tanc d'Emmagatzematge	T
Bescanviador de Calor	E
Calderí	RB
Condensador	C
Reactor	R
Columna de Destil·lació	CD
Bombes	P

També, s'ha fet un llistat dels components que juguen un paper dintre del procés productiu amb les seves respectives abreviatures per facilitar la seva escriptura al llarg de tota la memòria. A més, en els següents apartats es detallaran tots en quan a les seves propietats i usos dins la planta.

Taula 1.5: *Nomenclatura dels Fluids*

Fluid	Nomenclatura
Etilè	C1
Benzè	C2
Età	C3
Metà	C4
Toluè	C5
Propilè	C6
Etilbenzè	C7
Dietilbenzè	C8

1.2 Procés de produccio de l'etilbenzè

L'etilbenzè és utilitzat ,gairebé en la seva totalitat (més del 99% de la producció), com a intermig per la fabricació del monòmer de l'estirè. La producció d'estiré consumeix al voltant del 50% de la producció mundial de benzè. La resta de la producció d'etilbenzè (menys del 1%) s'utilitza com a dissolvent de pintures o com a intermig per la producció de acetofenona.

Comercialment, gairebé tot l'etilbenzè és produït mitjançant l'alquilació del benzè amb l'etilè. Les tecnologies més recents utilitzen zeolites sintètiques instal·lades en reactors de llit fix per catalitzar la reacció de alquilació tant en fase líquida com en fase vapor variant el tipus de zeolita instal·lada, l'estructura i les condicions de reacció. També es pot realitzar el procés d'obtenció d'etilbenzè catalitzat per zeolites en fase mixta líquid-vapor. A més, una quantitat considerable d'etilbenzè es produïa per l'alquilació amb clorur d'alumini com a catalitzador en fase líquida, tot i que els problemes operacionals que comportava aquest mètode, les polítiques ambientals cada cop més estrictes i les millores en els processos amb zeolites sintètiques han sigut incentius per a que algunes plantes que utilitzaven aquest mètode adaptessin la tecnologia amb zeolites. Per últim, el procés de producció d'etilbenzè mitjançant la separació de corrents de xilè (aproximadament un 1% de la producció mundial d'etilbenzè) mitjançant superfraccionament.

L'etilbenzè es forma a partir d'una reacció d'alquilació del benzè amb l'etilè (r_1). Aquesta reacció és fortament exotèrmica (ΔH = – 114 kJ/mol).

$$\underset{\text{benzè}}{C_6H_6} + \underset{\text{etilè}}{C_2H_4} \rightarrow \underset{\text{etilbenzè}}{C_6H_5C_2H_5} \quad (r_1)$$

Figura 1.6: *Reacció d'alquilació de benzè amb etilè.*

A més, l'excès d'etilè pot reaccionar amb l'etilbenzè format, formant-se així dietilbenzè (r_2). A més, si el dietilbenzè torna a reaccionar amb l'etilè restan pot donar lloc a la formació de polietilbenzens (producte no desitjat). Per tant, per minimitzar aquestes reaccions adicionals es manté una concentració de benzè superior a la de l'etilè amb una relació molar de 7.5:1 respectivament.

$$\underset{\text{Etilbenzè}}{C_6H_5C_2H_5} + \underset{\text{Etilè}}{C_2H_4} \rightarrow \underset{\text{Dietilbenzè}}{C_6H_4(C_2H_5)_2} \quad (r_2)$$

Com s'ha esmentat anteriorment, el dietilbenzè (DEB) es un producte no desitjat ja que pot causar problemes en el procés de producció d'estirè (principal aplicació de l'etilbenzè) si el corrent d'etilbenzè contè polietilbenzens (PEBs). Per tant, per augmentar la producció d'etilbenzè i reduir la quantitat de dietilbenzè, aquest es separa del producte desitjat i es recircula a un reactor de transalquilació on es duu a terme una reacció mitjançant la qual aplicant un excès de benzè al corrent de dietilbenzè en determinades condicions s'obté la següent relació d'equilibri (r_3) (veure U.S. Patent 3,751,504).

$$\underset{\text{Dietilbenzè}}{C_6H_4(C_2H_5)_2} + \underset{\text{Benzè}}{C_6H_6} \leftrightarrow \underset{\text{Etilbenzè}}{2C_6H_5C_2H_5} \quad (r_3)$$

Tot i així, hi ha altres tipus d'impureses generades durant el procés en forma de subproductes no desitjats en el corrent d'etilbenzè els quals conseqüentment poden afectar a la puresa de l'estirè. Aquests contaminants tenen un punt d'ebullició entre l'etilbenzè i l'estirè. Com per exemple el xilè, el qual no es pot separar fàcilment de l'etilbenzè i, que conseqüentment afectaria la puresa del producte final. Entre els isòmers del xilè, l'orto-xilè és el menys desitjat d'obtenir ja que és gairebé impossible de separar de l'estirè i acaba com a impuresa en el producte final. És per això que s'han implementat noves tècniques relacionades amb el catalitzador del procés per tal d'obtenir una major selectivitat del producte i una major puresa del mateix, a més de reduir la quantitat de subproductes no desitjats (veure U.S. Patent 5,689,025).

A més, el corrent de benzè que s'introdueix al procés conté impureses com el toluè en petites quantitats. El toluè reacciona amb l'etilè per formar etilbenzè i propilè (r_4) [9].

$$\underset{\text{Toluè}}{C_6H_5CH_3} + \underset{\text{Etilè}}{2C_2H_4} \rightarrow \underset{\text{Etilbenzè}}{C_6H_5C_2H_5} + \underset{\text{Propilè}}{C_3H_6} \quad (r_4)$$

1.2.1 Mètodes d'obtenció d'etilbenzè

Les principals opcions disponibles per la producció d'etilbenzè industrialment consisteixen en l'alquilació del benzè amb etilè, la qual pot dur-se a terme en fase líquida utilitzant àcids de Lewis com a catalitzador ($AlCl_3$), o bé utilitzant com a catalitzador zeolites sintètiques en fase vapor,

fase líquida o fase mixta líquida-vapor. Per últim, minoritàriament es produeix etilbenzè mitjançant la separació de corrents de xilè.

1.2.1.1 Reacció d'alquilació catalitzada per $AlCl_3$ en fase líquida

La reacció d'alquilació en fase líquida que utilitza com a catalitzador el clorur d'alumini per la producció d'etilbenzè va iniciar la seva producció industrial durant la dècada de 1930, i va mantenir certa popularitat fins que van sorgir altres tecnologies amb el mateix catalitzador o bé catalitzades per zeolites sintètiques. Actualment, segueixen existint plantes que utilitzen aquest procés per produir etilbenzè, tot i que la majoria de plantes utilitzen la tecnologia Monsanto/Lummus, la qual és considerada com la tecnologia més avançada en els processos de clorur d'alumini. Tot i així, Lummus va descontinuar la llicència al voltant de 1990 degut a l'implementació de tecnologia en fase líquida catalitzada amb zeolites.

Com s'ha esmentat anteriorment, la reacció d'alquilació de benzè amb etilè és fortament exotèrmica. Amb presència de clorur d'alumini la reacció és molt ràpida i gairebé produeix rendiments estequiomètrics d'etilbenzè. S'han utilitzat una gran varietat d'àcids de Lewis com a catalitzadors, com per exemple $AlBr_3$, $FeCl_3$ i BF_3. No obstant, el clorur d'alumini és la millor opció degut a que els processos que l'utilitzen com a catalitzador també utilitzen generalment clorur d'etil o clorur d'hidrogen com a promotor, els quals redueixen la quantitat de clorur d'alumini (Catalitzador) necessari per dur a terme el procés.

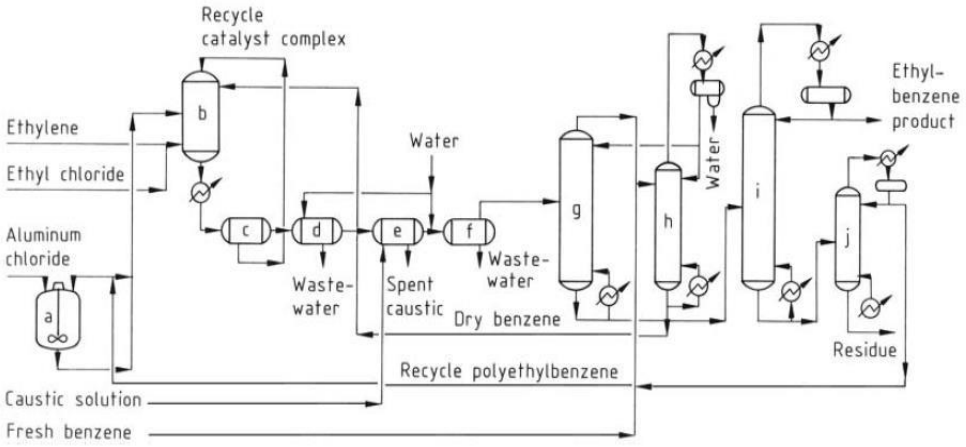


Figura 1.7: *Procés de producció d'etilbenzè utilitzant AlCl3 com a catalitzador. a) Tanc de mescla del catalitzador; b) Reactor d'alquilació; c) Tanc de decantació; d) Separador d'àcids; e) Separador de productes bàsics; f) Separador d'aigua; g) Columna de recuperació de benzè; h) Columna de deshidratació del benzè; i) Columna de recuperació de l'etilbenzè; j) Columna de separació de polietilbenzens.*[10]

A la **Figura 1.7** s'observa el procés de producció d'etilbenzè en fase líquida amb un catalitzador de $AlCl_3$ que utilitzaven les primeres plantes de producció. En aquest procés, la relació molar benzè/etilè que s'alimenta al procés al voltant de 3:1, així s'obté una conversió de l'etilè del 100%. Si aquesta relació fos menor, podrien ocórrer reaccions secundàries que formen productes no desitjats. Durant aquest procés es produeix una pèrdua de rendiment deguda a la formació de

residus. Per tal d'evitar això es recircula el corrent amb subproductes no desitjats (polietilbenzens) generats en les reaccions secundaries al reactor d'alquilació, on es duu a terme la reacció de transalquilació. En aquest primer procés s'utilitza un únic reactor per dur a terme la reacció d'alquilació del benzè i de transalquilació dels polietilbenzens gràcies a que la reacció ocorre a prop de l'equilibri termodinàmic.

La temperatura de reacció està generalment limitada a 130 ºC, ja que a una temperatura superior el catalitzador es desactiva amb rapidesa i afavoreix la formació de productes no desitjats. A més, s'aplica una pressió suficientment alta com per mantenir els reactius en la fase líquida. Degut a que la mescla reactiva és elevadament corrosiva, la corrosió que genera a les canonades i els equips resulta que cada cop sigui més costós operar la planta degut als costos de manteniment que suposa. Així doncs, per minimitzar la corrosió i allargar la vida útil de les instal·lacions en aquest tipus de planta s'utilitzen recobriments de vidre o materials ceràmics als reactors, mentre que les canonades són d'aliatges resistents a la corrosió.[10]

Aquest primer procés va ser amb el qual es va iniciar la producció d'etilbenzè en fase líquida amb clorur d'alumini com a catalitzador. Durant el pas del temps, altres processos que aportaven variacions en l'operació varen resultar ser millors que el procés inicial i per tant es varen consolidar.

En aquest procés, l'efluent líquid del reactor es refreda abans de ser portat al decantador (c), on la fase pesada que conté el catalitzador es separa de la fase orgànica líquida, per poder recircular la fase que conté majoritàriament el catalitzador cap al reactor. El corrent més lleuger segueix en el procés cap a les unitats (d i e), on aquest serà rentat amb aigua i sosa per eliminar el clorur d'alumini i el promotor dissolts. La fase aquosa amb clorur d'alumini diluït que s'obté d'aquests dos rentats es neutralitza i posteriorment es recupera com un corrent saturat de clorur d'alumini i fang d'hidròxid d'alumini.

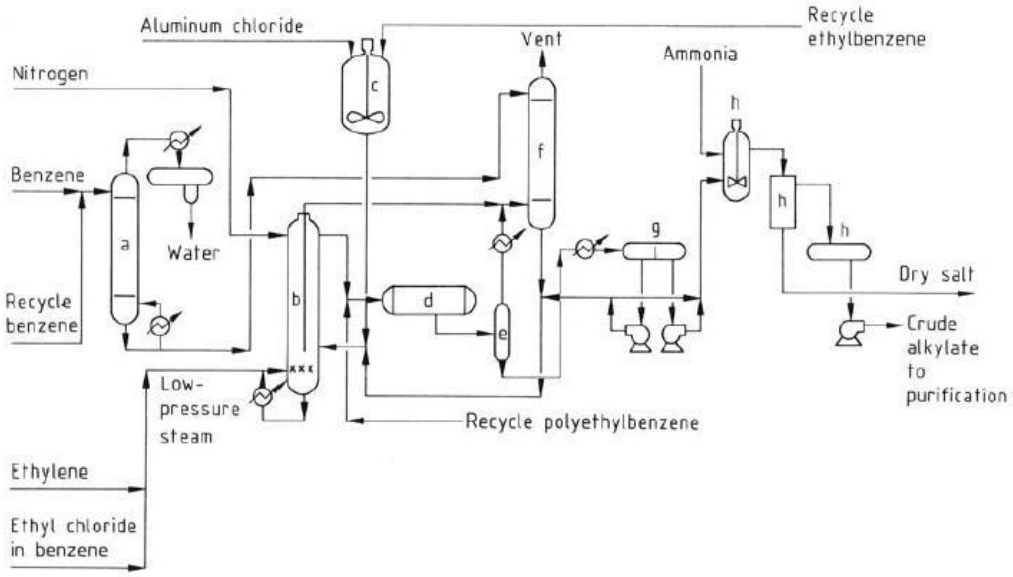


Figura 1.8: *Procés de producció d'etilbenzè per alquilació en fase líquida (procés Monsanto). a) Columna d'assecatge del benzè; b) Reactor d'alquilació; c) Tanc de pretractament del catalitzador; d) Reactor de transalquilació; e) Separador vapor-líquid; f) Sistema de separació dels gasos d'escapament (Scrubber); g) Decantador; h) Equip de neutralització* [10]

Pels productors d'etilbenzè, l'eliminació del catalitzador dissolt en el corrent orgànic sempre ha suposat un repte, fins que la companyia petroquímica CdF Chimie va descobrir que es podia aconseguir una recuperació completa del catalitzador fent que el corrent orgànic entri en contacte amb amoníac primer en lloc de sosa càustica (NaOH), com es pot observar en el nou procés de producció d'etilbenzè a la **Figura 1.8.**

El procés Monsanto (Veure **Figura 1.8.**) presenta un nou mètode d'alquilació en fase líquida amb clorur d'alumini com a catalitzador. Aquest procés va suposar una significativa reducció en l'ús d'aquest catalitzador. La quantitat de catalitzador necessària es va reduir fins la saturació en el corrent d'alimentació, controlant minuciosament l'addició d'etilè i elevant la temperatura de la reacció d'alquilació al voltant dels 160-180ºC, aquesta major temperatura d'operació millora l'activitat del catalitzador amb el benefici addicional de que el calor generat en la reacció pot ser recuperat com vapor de baixa pressió. A més, aquest procés es també capaç d'operar amb un aliment amb baixa concentració d'etilè. Tots aquests factors van ser les causes per les quals la majoria de productors d'etilbenzè van acabar adoptant aquest procés [10].

La purificació de l'etilbenzè es produeix habitualment mitjançant una disposició de tres columnes de destil·lació en sèrie. Com es pot observar a la **Figura 1.8**, el benzè que no reacciona es recupera en la primera columna com vapor del destil·lat a caps. A la segona columna, es produeix la separació de l'etilbenzè del corrent pesat amb components polialquilats. El corrent de cues de la segona columna s'alimenta a una columna final on els polietilbenzens que es van recircular es separen dels residus (compostos d'elevat pes molecular). Aquest efluent de residus, que consisteix principalment en compostos aromàtics policíclics, serà utilitzat com a combustible.

El benzè que s'alimenta al procés i el que es recircula ha de ser tractat abans d'entrar al reactor, degut a que la mescla de reactius a la reacció d'alquilació no pot tolerar quantitats elevades d'aigua, degut a que això pot augmentar la corrosió i disminuir l'activitat del catalitzador. Aquest tractament es duu a terme en la columna de deshidratació del benzè [10].

Mentre que el procés tradicional portava a terme tant la alquilació con la transalquilació en un mateix reactor, en aquest procés es troben dos reactors separats per l'alquilació i la transalquilació. No obstant, al reactor de transalquilació no serà necessari afegir més catalitzador degut a que tant en la alquilació com en la transalquilació s'utilitza el mateix catalitzador, el qual ja es troba dissolt a l'efluent del reactor d'alquilació. L'addició d'una unitat adicional de transalquilació en la producció d'etilbenzè augmenta el rendiment d'etilbenzè al voltant d'un 10%.

Els principals inconvenients d'aquest procés d'alquilació en fase líquida utilitzant àcids de Lewis com a catalitzadors, com per exemple el clorur d'alumini, són les limitacons ambientals econòmiques degut al catalitzador que s'utilitza. Això es degut a que, tenint en compte que la previsió a futur és que les preocupacions ambientals de la societat seguiran augmentant, és un factor que penalitza aquest procés i cal tenir en compte. Tot i que s'hagin realitzat propostes per optimitzar el procés i augmentar-ne la productivitat, els problemes de corrosió asociats a l'utilització d'aquest catalitzador comporten una contribució important en els costos d'inversió d'equips, ja que es necesiten recobriments de vidre o materials ceràmics, canonades i instrumentació adient per l'operació amb un corrent corrosiu, fet que incrementa també els costos de manteniment.

1.2.1.2 Reacció d'alquilació catalitzada per zeolites en fase vapor

En el procés de producció d'etilbenzè utilitzant com a catalitzador la zeolita sintètica ZSM-5 en un reactor de llit fix en fase vapor va ser desenvolupat en la dècada de 1970 per Mobil-Badger. Degut a les seves excel·lents propietats catalítiques (estructura porosa i naturalesa àcida) i la seva estabilitat tèrmica, aquesta zeolita s'utilitza àmpliament al sector petroquímic i és adequada per l'alquilació del benzè amb etilè. El procés d'alquilació catalitzat per zeolites en fase vapor serveix particularment per corrents d'etilè diluits, concretament els gasos d'escapament procedents del craqueig catalític fluiditzat (FCC), cosa que va fer que aquest procés sigués comunment utiltizat en aquells casos en els que s'utilitza com aliment un corrent d'etilè diluit. Fins que no es varen desenvolupar noves tecnologies utilitzant zeolites en fase líquida (al voltant de 1990) el procés catalitzat utilitzant zeolites en fase vapor va ser la tecnologia dominant a les plantes de producció d'etilbenzè. Principalment degut al fet que evitava l'obtenció de residus aquosos produïts a les plantes de clorur d'alumini. Aquesta tecnologia encara s'utilitza principalment en plantes amb corrents d'alimentació d'etilè diluït.

El catalitzador que es troba al llit fix (ZSM-5) duu a terme la mateixa reacció d'alquilació que en la resta de processos. No obstant això, les molècules d'etilè son adsorbides en els llocs àcids de Brønsted, a l'interior del catalitzador, el qual activa la molècula d'etilè i permet l'enllaç amb molècules de benzè per tal que succeeixi la reacció. Per tant, el rang de subproductes no desitjats (com per exemple polietilbenzens) formats pel procés Mobil-Badger és d'alguna manera diferent al procés catalitzat per clorur d'alumini en fase líquida esmentat anteiorment [10].

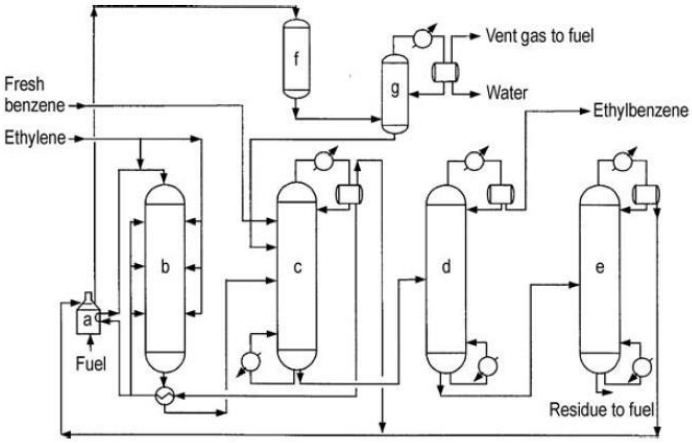


Figura 1.9: *Procés de producció d'etilbenzè catalitzat per zeolites en fase vapor (Mobil-Badger de tercera generació). a) Intercanviador de calor de l'aliment del reactor; b) Reactor d'alquilació; c) Columna de benzè; d) Columna d'etilbenzè; e) Columna de polietilbenzè; f) Reactor de transalquilació; g) Estabilitzador* [10]

A la **Figura 1.9** es pot observar un diagrama de procés de produció d'etilbenzè catalitzat per zeolites en fase vapor. El reactor d'alquilació opera en un rang entre 350-450ºC i 1-3 MPa. A aquesta temperatura més del 99% de l'entrada neta de calor al procés i el calor provinent de la reacció exotèrmica pot ser recuperat com vapor d'aigua. Com s'ha esmentat anteriorment, el reactor opera amb un excés significant de benzè respecte l'etilè pels motius ja exposats prèviament. El catalitzador es desactiva lentament com a resultat de la formació de coc (enverinament del catalitzador), per tant ha de ser regenerat periòdicament.

La vida útil del catalitzador depèn principalment del disseny de la planta, les condicions d'operació i el tipus de zeolita sintètica. En aquest cas es realitza una regeneració in situ del catalitzador, la qual triga en realitzar-se al voltant de 36 hores i es realitza cada 18-24 mesos d'operació [10]. L'efluent del reactor del diagrama de procés de la **Figura 1.9** passa a la secció de purificació com a vapor. El benzè d'aquest corrent es separa per caps de la primera columna i subseqüentment es recircula als reactors. El producte final (etilbenzè) s'obtè per caps de la segona columna, el producte de cues és enviat a una última columna on els dietilbenzens i polietilbenzens que poden ser recirculats al reactor de transalquilació són separats dels residus pesats, els quals s'utilitzen com a combustible.

Un cop separats, es recirculen al reactor de transalquilació també en fase vapor, on en presència d'un excès de benzè i un procés catalitzat per zeolites en condicions d'operació de major temperatura i menor pressió respecte el reactor d'alquilació, s'obté etilbenzè. La capacitat de poder dur a terme la transalquilació per compostos com el dietilbenzè (DEB) i polietilbenzens (PEBs) contribueix a disminuir la producció de residu del procés, a la vegada que augmenta la productivitat del mateix.

La primera i la segona generació del procés eren similars a la que es mostra a la **Figura 1.9.**, que és la tercera generació. La major diferència radica en que el DEB i PEBs es recirculaven al reactor d'alquilació, ja que en aquestes versions només havia reactor d'alquilació. Per aquest motiu el procés era meys eficient en relació al disseny de tercera generació.

Respecte aquest procés, un dels principals inconvenients és que als costos d'operació s'afegeix l'elevat consum d'energia de les columnes de destil·lació de benzè degut a la elevada relació molar benzè/etilè i a les elevades temperatures de reacció, un dels paràmetres característics d'aquest procés en fase vapor.

1.2.1.3 Reacció d'alquilació catalitzada per zeolites en fase líquida

El procés d'alquilació catalizat per zeolites en fase líquida va començar a sorgir en la dècada de 1990 en el qual inicialment es va començar a utilitzar un catalitzador basat en zeolita tipus Y ultra estable, i més recentment zeolita tipus beta. La primera planta que va utilitzar aquest procés va ser operada per Nippon SM en Oita (Japó) sota llicència de ABB Lummus Global i Unocal. En 1999, ja havia un total de 12 plantes que utilitzaven aquest procés per produir etilbenzè. Per aquest tipus de zeolites es recomana la regeneració ex situ degut als llargs cicles de regeneració necessaris per aquests catalitzadors.

Taula 1.6: *Processos d'alquilació de benzè en fase líquida* [11]

Process (year of industrial application)		Lummus/Unocal/UOP (1989)	Mobil-Raythen EBMax (1995)	Lummus/UOP EBOne (1996)	Sinopec (2000)
Alkylation	Ethylation agent	Pure ethylene	Pure/dilute ethylene	Pure ethylene	Pure ethylene
	Catalyst	Y	EM3300	EBZ-500, EBZ-800TL	AEB-2, AEB-6
Transalkylation	Catalyst	Y	EM3700	EBZ-100	AEB-1
	Phase	Liquid	Liquid	Liquid	Liquid

Tot i que existeixen diferències entre les diferents tecnologies que utilitzen aquest procès, les últimes generacions han suposat una disminució dels costos d'inversió i una millora en la qualitat d'etilbenzè produït respecte les tecnologies prèvies utilitzant etilè de grau polimèric (veure **Taula 1.6.**). Així, la tecnologia que produeix etilbenzè catalitzada per zeolites en fase vapor té llicència de Mobil-Badger principalment per un corrent d'aliment d'etilè diluit, com el que s'utilitza a EBenz.

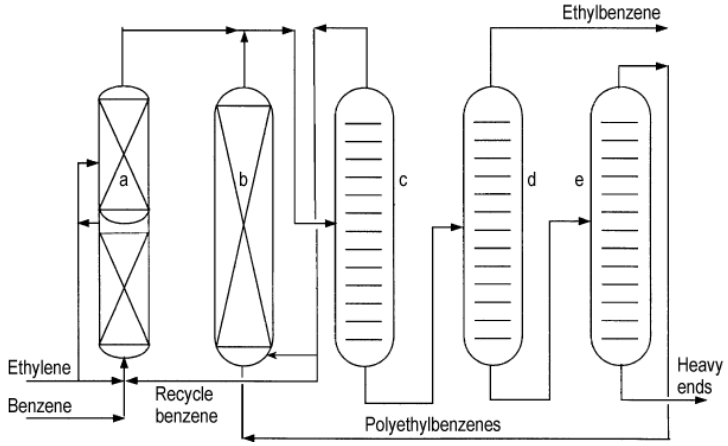


Figura 1.10: *Procés Lummus/Unocal/UOP de producció d'etilbenzè. a) Reactor d'alquilació; b) Reactor de transalquilació; c) Columna de benzè; d) Columna d'etilbenzè; e) Columna de PEB* [10]

A la **Figura 1.10**, corresponent al primer disseny del procès, l'alquilació es realitzava en fase líquida, mentre que la transalquilació ocorria en fase gasosa amb un catalitzador basat en la zeolita de tipus ZSM-5 i, més endavant, aquesta transalquilació s'ha modificat per produïr-se també en fase líquida amb un nou catalitzador.

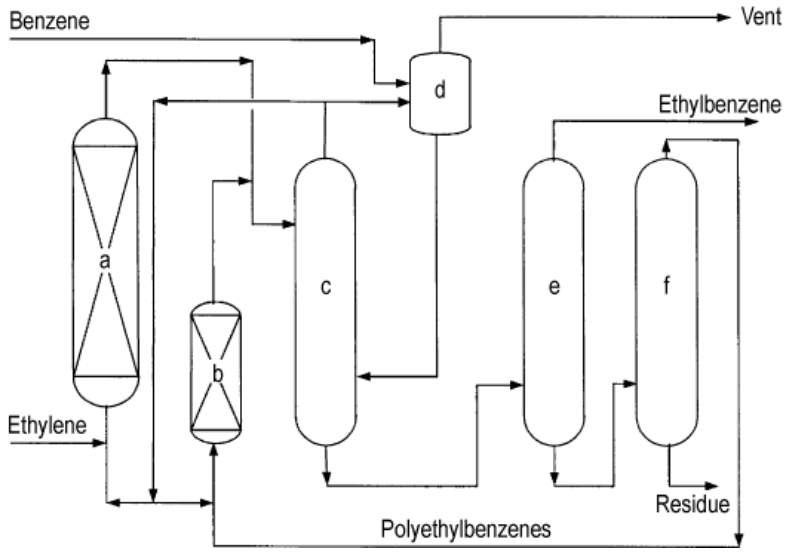


Figura 1.11: *Procés EBMax de producció d'etilbenzè. a) Reactor d'alquilació; b) Reactor de transalquilació; c) Columna de benzè; d) Columna de venteig; e) Columna d'etilbenzè,f) Columna de PEB* [10]

Els diagrames de procés dels dos processos són molt similars, com es pot observar a les **Figures 1.10 i 1.11**, l'etilè s'alimenta al reactor d'alquilació de llit fix amb múltiples etapes la qual també s'introdueix benzè en excès, on la relació molar de benzè/etilè oscil·la de 4-6:1. L'excès de benzè és destil·lat per caps de l'efluent i és recirculat. El corrent de cues de la columna de benzè entra a la columna d'etilbenzè, on es separa el etilbenzè com a producte per caps de la columna d'etilbenzè, mentre que per cues d'aquesta columna surt el corrent que s'alimenta a la columna de politilbenzè (PEB), on es separen els PEBs del residu. El corrent de caps d'aquesta columna es recircula al reactor de transalquilació, on es combina amb un excès de benzè provinent del corrent de caps de la columna de benzè per obtindre etilbenzè.

L'efluent del reactor de transalquilació es torna a fer circular per les columnes. Les temperatures de reacció es mantenen per sota de la temperatura crítica del benzè (289 ºC), generalment en un rang entre els 240 ºC i 270 ºC. A més, les pressions han de ser suficientment altes per mantindre els reactius en fase líquida, al voltant dels 4 MPa. Els rendiments totals de conversió d'etilbenzè amb aquestes noves tecnologies són superiors al 99% i l'etilè que s'alimenta sol tenir una puresa de grau polimèric.

Aquest tipus d'alquilació en fase líquida suposa una sèrie d'avantatges respecte l'alquilació en fase vapor, com per exemple un millor control tèrmic, temperatures de reacció més baixes, menor quantitat de reaccions secundàries, una menor formació de subproductes no desitjats i una major vida útil dels catalitzadors, a més de que la relació molar d'alimentació de benzè a etilè és menor respecte el procés en fase vapor. Això provoca que s'hagi de recircular una menor quantitat de benzè en excès [10].

1.2.1.4 Reacció d'alquilació catalitzada per zeolites en fase mixta líquid/vapor

Els processos d'alquilació en fase mixta es varen oferir per primera vegada en 1994 de la mà de CDTech, en colaboració amb ABB Lummus Global and Chemical Research and Licensing, Co. La principal diferència d'aquest procès és el reactor d'alquilació, ja que combina l'alquilació del benzè i la destil·lació en un reactor.

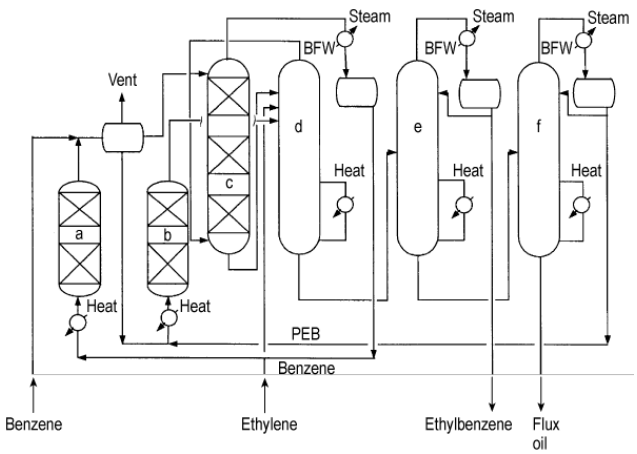


Figura 1.12: *Procés de producció d'etilbenzè CDTech. a) Reactor final; b) Reactor de transalquilació; c) Reactor d'alquilació; d) Columna de recuperació de benzè; e) Columna de recuperació d'etilbenzè; d) Columna de PEBs* [10]

Degut a la seva capacitat de tractar l'aliment d'etilè en fase vapor, el procés ha sigut utilitzat per corrents diluits d'etilè, com per exemple els gasos procedents del craqueig catalític (FCC). Tot i així, també s'ha aplicat per un aliment d'etilè de grau polimèric. A la **Figura 1.12.** es pot observar el diagrama d'aquest procès. Un reactor d'alquilació i una columna de benzè actuen en conjunt com una columna de destil·lació (c). El corrent de caps d'aquesta columna, que principalment contè benzè i etilè que no ha reaccionat, s'alimenta a un reactor final (a), que també és catalitzat per zeolites. El corrent de cues de la columna (c) s'alimenta a una columna de recuperació d'etilbenzè (e). En aquesta columna, el corrent de caps correspon a l'etilbenzè com a producte final, mentre que el corrent de cues s'alimenta a una columna de PEBs, on es separa per caps els PEBs que poden ser recirculats a un reactor de transalquilació en fase líquida amb un excès de benzè per obtindre etilbenzè, el qual es torna a fer circular pel conjunt de columnes del procès. Finalment, per cues surt el residu. El rang de temperatures oscil·la entre els 150 ºC als 195 ºC a la secció d'alquilació i al voltant dels 300 ºC a la secció de separació, operant amb pressions que oscil·len entre 1,6 MPa i 2,1 MPa.

Inicialment es varen utilitzar zeolites de tipus Y com a catalitzador, però més endavant es van substiuir per un catalitzador basat en zeolites de tipus β. Els corrents de benzè i etilè flueixen en contracorrent al reactor, ja que el benzè líquid entra al reactor per la part superior, mentre que l'etilè en fase gasosa entra al reactor per la part inferior d'aquesta. A mesura que l'etilè gasós es dissol en el benzè, es va produint l'alquilació del benzè per formar etilbenzè. L'etilè gasós que s'utilitza en aquesta reacció proporciona una força impulsora que fa que l'etilè es dissolgui en major mesura amb el benzè, augmentant així la velocitat de reacció d'alquilació.

La principal avantatge que presenta aquest procés són similars a les del procés en fase líquida. No obstant, cal considerar que augmenta la complexitat del procés pel que fa a l'implementació d'un reactor on es duu a terme la reacció d'alquilació i a mès també actua com a columna de benzè [12].

1.2.1.5 Procés de producció d'etilbenzè per separació de xilens

Menys de l'1% de la producció mundial d'etilbenzè és obtinguda mitjançant la recuperació de corrents mixtes de xilè. Aquesta suposa una alternativa a la producció d'etilbenzè mitjançant la reacció d'alquilació de benzè amb etilè. Durant la dècada de 1960, es van construir diferents instal·lacions per tot el món en les que s'utilitzava aquest procès per la producció d'etilbenzè, el qual consistia en recuperar l'etilbenzè mitjançant el fraccionament de xilens produïts en unitats de reformat catalític en refineries. La separació generalment requeria de tres columnes de destil·lació en sèrie, cadascuna amb més de 100 etapes (superfraccionament).

Aquest procès de producció s'ha interrumpit en gran mesura degut a factors econòmics, ja que els costos d'energia i d'inversió eren massa elevats, així com l'aparició de processos de producció més econòmics com els esmentats prèviament, cosa que va afavorir la desaparició d'aquest tipus d'instal·lacions [10].

1.2.2 Selecció del procès i del catalitzador

Els processos bàsics en la producció industrial d'etilbenzè són el pretractament de la matèria prima, les unitats d'alquilació/transalquilació i el procés de separació dels productes a l'unitat de fraccionament. Per exemple, les plantes que utilitzen com a catalitzador l'AlCl3 presenten equips

dedicats a la manipulació del catalitzador (preparació, separació i eliminació de les restes del mateix dissoltes a l'efluent del reactor). Així, la diferència més clara entre els processos presentats anteriorment és que utilitzen diferents catalitzadors, cosa que fa que calguin uns equips o operacions determinades per dur a terme el procés. Així, el procés que utilitza el clorur d'alumini presentará unitats adicionals relacionades amb la manipulació del catalitzador, cosa que el procés catalitzat per zeolites no necessita.

Tot i presentar diferències en el catalitzador utilitzat, cal destacar que el procés de producció d'etilbenzè presenta moltes etapes similars independentment del catalitzador utilitzat, com per exemple les reaccions d'alquilació i transalquilació. La reacció d'alquilació es pot dur a terme en un únic reactor o bé en reactors separats. A EBenz, s'utilitza una configuració de tres reactors d'alquilació en sèrie amb refredament del corrent de sortida entre reactors. La configuració amb reactors separats és l'alternativa més comú a l'industria degut a la seva configuració operacional i degut a que es tracta d'una reacció exotèrmica, convè dosificar l'aliment de reactiu en tres reactors, en el cas d'EBenz.

Respecte les unitats de separació/purificació del producte final també són unitats en comú entre diferents processos ja que s'utilitzen columnes per separar el benzè en excès i recircular-lo al reactor d'alquilació i al de transalquilació, seguida d'una columna d'etilbenzè per obtindre el producte desitjat, i una columna de PEBs que s'encarrega de separar els residus més pesats dels PEBs que es recirculen al reactor de transalquilació per formar etilbenzè en presència de benzè en excès, i l'efluent d'aquest reactor es torna a fer passar pel conjunt de columnes.

Com ja s'ha explicat, tot i que els processos tinguin certes similituds, la selecció del tipus de catalitzador és el factor determinant per operar amb una certa tecnologia o altra. En el cas d'EBenz, s'ha optat per descartar la tecnologia que utilitza clorur d'alumini com a catalitzador degut al comportament corrosiu del clorur d'alumini com a catalitzador, caldria preparar l'instal·lacio utilitzant materials i recobriments especials que siguin resistents a la corrosió en les parts que estiguin en contacte amb el catalitzador (reactor, canonades, tancs …), a més d'un major cost de manteniment de l'instal·lació, estacions per tractar i separar les restes de clorur d'al·lumini presents a l'efluent del reactor, com ja s'ha explicat detalladament a l'Apartat 1.2.1.1. Tots aquests factors esmentats anteriorment es tradueixen en un major cost d'inversió i cost d'operació de l'instal·lació.

Per tant, la tecnologia que s'utilitzarà per produir etilbenzè a EBenz estarà catalitzada per zeolites. En aquest cas, com el corrent d'etilè que arriba com aliment a les instal·lacions contè etilè diluït, s'ha escollit el procés catalitzat per zeolites en fase vapor, ja que tot i que el procés catalitzat per zeolites en fase líquida presenta certes avantatges, s'utilitza per un corrent d'etilè alimentat amb una puresa de grau polimèric, fet que requeriria d'una unitat addicional de pretractament de l'aliment per complir amb els requeriments de procès, opció que es va desestimar degut a que la naturalesa del procés catalitzat per zeolites en fase vapor s'ajustava millor als requeriments operacionals d'EBenz sense la necessitat d'implementació de noves unitats, simplement realitzant modificacions al procés mantenint el diagrama general però adaptant-lo a les necessitats de producció d'EBenz.

D'altra banda, l'alternativa del procés catalitzat amb zeolites en fase mixta líquid-vapor s'ha rebutjat degut a la complexitat que suposa al procés l'implementació de l'unitat que comporta

aquesta tecnologia. Per últim, el procés de producció d'etilbenzè mitjançant separació de xilens s'ha desestimat degut a que no satisfeia les necessitats operacionals bàsiques d'EBenz, donat que no es produeix l'etilbenzè mitjançant l'alquilació de benzè amb etilè.

1.2.3 Caracterització del catalitzador

Pel que fa al catalitzador utilitzat en la producció d'etilbenzè d'EBenz, com s'ha raonat anteriorment, s'ha desestimat l'opció d'utilitzar com a catalitzador el clorur d'alumini. Per tant, la selecció del tipus de zeolita que s'ha d'escollir per catalitzar el procès dependrà de les diferents propietats de cadascuna i valorar quin tipus és el que millor s'ajusta a les necessitats de procès que es duu a terme en EBenz.

Els processos que utilitzen les zeolites sintètiques són relativament recents a l'indústria, i la seva implementació s'ha consolidat gràcies a la consciència mediambiental en els processos de producció i al descobriment de nous catalitzadors com els tamissos moleculars d'estructures poroses.

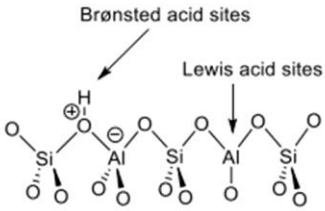
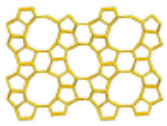
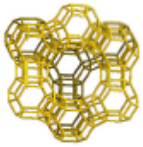
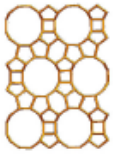
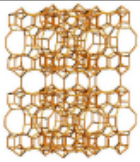


Figura 1.13: *Llocs ácids de Lewis-Brønsted a les molècules de catalitzador de zeolita* [13]

L'acidesa en els catalitzadors basats en zeolites sintètiques és deguda a la teoria de la catàlisi àcida de Lewis-Brønsted, la qual augmenta la quantitat de llocs actius en el catalitzador al polaritzar les molècules i per incrementar així l'activitat d'aquestes. Els àcids de Brønsted dònen protons a la molècula de catalitzador, mentre que els àcids de Lewis promouen l'acceptació d'electrons als llocs actius de la molècula de catalitzador.

Les zeolites són tèrmicament estables fins els 800 ºC, cosa que permet dur a terme reaccions a altes temperatures i, a més, la regeneració tèrmica dels catalitzadors gastats es pot realitzar cremant els residus amb diferents metodologies [12].

Taula 1.7: *Estructura dels principals tipus de zeolites sintètiques per la producció d'etilbenzè* [11]

Zeolite	ZSM-5	Y	Beta	MCM-22
Structure image				
	along (010)	along (111)	along (100)	along (001)
Framework type	MFI	FAU	BEA*	MWW
Ring size (# T-atoms)	10	12 (with cage, 1.3 nm × 0.74 nm)	12	10 (with cage, 1.82 nm × 7.1 nm)
Channel system	3 dimensional	3 dimensional	3 dimensional	2 dimensional
Ethylbenzene process	Vapor-phase	Liquid-phase, CD Tech	Liquid-phase	Liquid-phase

Com es pot observar a la **Taula 1.7.**, les zeolites es poden sintetitzar en una amplia varietat de tamany de porus, també varia el número i la força dels llocs actius de Brønsted. La selectivitat de les zeolites a les reaccions d'alquilació del benzè amb etilè o transalquilació, depèn tant de les característiques àcides dels catalitzadors com de la selectivitat estructural degut a l'estructura porosa específica de cada tipus de zeolita.

Així, a la **Taula 1.7.** es troben els principals tipus de zeolita utilitzades en el procés de producció d'etilbenzè. A més, s'especifica per a quin tipus de procès en concret s'utilitza cadascuna de les zeolites. Així doncs, la zeolita ZSM-5 s'utilitza pel procés de producció d'etilbenzè en fase vapor, mentre que la resta s'utilitzen pel procés de producció d'etilbenzè en fase líquida. La zeolita tipus Y, a més de actuar com a catalitzador en els processos en fase vapor, també actua com a catalitzador en els processos de producció d'etilbenzè en fase mixta líquid-vapor (CDTech).

1.2.3.1 Principals tipus de zeolites sintètiques

La zeolita ZSM-5 té una estructura molecular de tipus MFI amb una estructura porosa composada per 10 anells en forma tridimensional. Aquesta zeolita és la més efectiva per dur a terme l'alquilació del benzè en fase vapor. Es tracta d'una zeolita amb un contingut elevat d'àtoms de sílice, és tèrmicament i hidrotèrmicament estable amb quantitats i concentracions d'àcid ajustables. Degut a la seva estructura porosa única i propietats àcides, la zeolita ZSM-5 s'uilitza àmpliament en processos petroquímics com el craqueig catalític fluiditzat (FCC), la conversió de metanol a propilè, entre d'altres.

La zeolita Y és un tamís molecular amb estructura molecular de tipus FAU amb una estructura de porus tridimensional de 12 anells. Degut a la seva estructura nanocristalina amb un gran volum de porus i major número de llocs àcids, es tracta d'un catalitzador amb major activitat i estabilitat. Aquest s'utilitza tant en processos en fase líquida com en fase mixta líquid-vapor. Tot i que la relació molar benzè/etilè és elevada (al voltant de 7:1), la zeolita Y és competitiva degut a la seva estabilitat tèrmica i llarga vida útil.

La zeolita β té una estructura molecular de tipus BEA amb una estructura porosa tridimensional composada de 12 anells. Aquesta té una composición rica en sílice i llocs actius de fácil accès als porus que están connectats mitjançant mitjançant canals helicoïdals estrets. En aquest cas, la relació molar benzè/etilè és reduïda fins al voltant de 4/1, i la vida útil del catalitzador s'estén fins als 2 anys. Així mateix, la zeolita β presenta una major selectivitat d'etilbenzè i una major conversió d'etilè respecte la zeolita Y.

La zeolita MCM-22 és una de les zeolites compreses en una sèrie de zeolites formades a partir de l'apliament de varies capes bàsiques amb estructura MWW. Aquesta zeolita mostra una activitat comparable a la zeolita Y, però menor a la zeolita β. La principal avantatge d'aquest tipus de zeolites és que la selectivitat d'etilbenzè és superior respecte les altres zeolites. Per tant, es formaria una menor quantitat de PEBs. Això comporta que l'aplicació del catalitzador en el procés sigui viable degut a la baixa relació molar de benzè/etilè a l'aliment (3-4/1), cosa que paral·lelament redueix el consum s'energia. Aquest catalitzador és bastant estable i la seva vida útil és superior als 3 anys [11].

En resum, la zeolita ZSM-5, amb la seva estructura porosa i mida de porus és adequada per processos en fase vapor, mentre que per processos en fase líquida la seva resistència a la difusió de transferència de massa és massa elevada. És per això que s'utilitzen zeolites amb un tamany de porus més grans com les zeolites de tipus Y, β i MCM-22. En el procés catalitzat per zeolites en fase líquida l'ús de les zeolites MCM-22 i β són preferents respecte les zeolites de tipus Y, tot i que aquesta última es pot utilitzar també en processos en fase mixta líquid-vapor, els processos catalitzats per la zeolita MCM-22 es poden operar amb una relació molar de benzè/etilè més baixa, amb les avantatges que això comporta, mentre que la zeolita β té una major activitat catalítica i major vida útil.

Per tant, com a EBenz s'utilitza el procés catalitzat per zeolites en fase vapor, s'ha optat per l'opció d'utilitzar com a catalitzador, tant en el reactor d'alquilació com en el de transalquilació, zeolites de tipus ZSM-5 degut a que les atribucions i propietats que contè la converteixen en l'alternativa més adient per processos en fase vapor.

1.2.3.2 Regeneració i desactivació del catalitzador

La desactivació del catalitzador comporta una pèrdua de l'activitat catalítica i una pèrdua de la selectivitat, són alguns dels principals problemes que ha d'afrontar l'indústria degut a que la substitució/regeneració del catalitzador implica la parada del procés productiu, el temps de regeneració, on no s'estarà produint el producte desitjat i la realització de la posada en marxa un cop regenerat. Totes aquestes accions suposen uns costos significatius en l'operació de la planta.

Els mecanismes més importants de la desactivació del catalitzador de zeolita en la reacció d'alquilació del benzè són l'enverinament i l'embrutiment.

L'enverinament és la forta quimisorció de reactius, productes o impureses en els llocs actius del catalitzador. Una especie pot actuar com a verí pel catalitzador en funció de la seva força d'adsorció en relació amb altres espècies (reactius) que competeixen pels llocs actius. Els verins dels catalitzadors es poden classificar per la seva composició química i la selectivitat que presentin pels llocs actius.

L'embrutiment del catalitzador consisteix en la deposició física d'espècies sobre la superfície del catalitzador, donant com a resultat una pèrdua del'activitat degut al bloqueig dels llocs acius i dels porus que presenten zeolites a la seva estructura. El motiu pel qual succeeix aquest bloqueig és la formació de substàncies d'un elevat pes molecular que obstrueixen el pas lliure de reactius i productes i, per tant, dificulten el procés de la reacció. Els dipòsits orgànics son de dos tipus: fases lleugeres (benzè, etilè, etilbenzè i dietilbenzè), els quals es desorbeixen fàcilment a temperatures al voltant de 80-350 ºC, mentre que els oligomers pesats, com els PEBs només es poden eliminar per combustió. Els dipòsits d'aquestes substàncies al catalitzador s'anomenenen coc o brea. Si aquestes substàncies no es desorbeixen o s'eliminen per combustió, l'activitat del catalitzador es veu reduida degut a l'augment de dipòsits i també poden arribar a contaminar el producte final [14].

Hi ha dos tipus de regeneració in situ dels catalitzadors de zeolita:

◊ Tractament tèrmic amb gasos

El catalitzador es pot regenerar in situ purgant amb un corrent de gas calent. Aquest gas ha de ser un gas inert, com per exemple nitrogen. El procediment de regeneració consisteix en introduïr el nitrogen al reactor a una temperatura entre 500 i 575 ºC, i mantenir aquesta temperatura durant tot el tractament. Al mateix temps, la concentració d'oxigen (aire) al gas de regenració es va augmentant des del 1% fins al 99%. Quan s'arriba a la concentració del 99% es finalitza l'injecció d'aire i només queda el nitrogen fluint a través del llit. Per ultim, es redueix la temperatura a la temperatura de reacció i (veure patent WO/2005/042159).

◊ Tractament tèrmic amb hidrocarburs aromàtics

Aquest procediment de regeneració consisteix en alternar rentats cíclics a elevades temperatures amb hidrocarburs aromàtics, com per exemple, el benzè. Així doncs, es produeix una reacció amb la brea mitjançant una sèrie de reaccions d'alquilació/transalquilació catalitzades per la pròpia zeolita, transformant així la brea en molècules amb un menor pes molecular, les quals seran solubles en els hidrocarburs aromàtics, permetent que aquestes molècules de menor pes molecular originades puguin difondre a través dels porus de la zeolita (veure patent EP 1 068 898 A2).

Aquest procés funciona per tots el tipus de zeolites utilitzades en els processos de producció d'etilbenzè en fase líquida. Així doncs, com a EBenz s'ha optat per la producció d'etilbenzè utilitzant zeolites com a catalitzador en fase vapor, el mètode de regeneració de catalitzador que s'utilitzarà és el tractament tèrmic amb gasos.

1.2.4 Característiques dels compostos implicats en el procés

Durant els apartats anteriors ja s'han esmentat els reactius i els productes que participen en el procés. L'objectiu d'aquest apartat és caracteritzar-los i especificar les seves propietats físiques.

1.2.4.1 Reactius principals

1.2.4.1.1 Etilè

L'etilè és un compost orgànic gasós, constituït per dos àtoms de carboni enllaçats amb un doble enllaç i quatre àtoms d'hidrògen. Es tracta d'un gas incolor i d'olor agradable que s'obtè mitjançant la ruptura mitjançant vapor (steam cracking) d'hidrocarburs de refineria i a partir del gas natural.

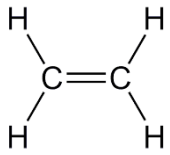


Figura 1.14: *Estructura molecular de l'etilè*

Aquesta molècula ocupa el tercer lloc de la producció en l'indústria química, enrere de l'àcid sulfúric i el nitrogen, convertint-lo així en el producte orgànic de major importància per volum de vendes. Aproximadament el 60% de l'etilè obtingut es destina a la producció de diferents polímers, com per exemple el polietilè d'alta i baixa densitat, l'estirè i el clorur de polivinil (PVC)[15].

Respecte la seva estructura molecular, aquesta no pot rotar al voltant del doble enllaç i tots els àtoms es troben en el mateix pla. L'angle entre els dos enllaços carboni-hidrogen és de 117º, molt proper als 120º corresponents a una hibridació sp^2.

Taula 1.8: *Propietats físiques de l'etilè (condicions estàndard)* [16]

Fórmula	C2H4
Pes Molecular (g/mol)	28,05
Densitat (kg/m3)	1,178
Punt de fusió (ºC)	-169
Punt d'ebullició (ºC)	-104
Pressió crítica (atm)	50,7
Temperatura crítica (ºC)	10
Pressió de vapor a 15ºC (kPa)	8100
Temperatura d'autoignició (ºC)	490

L'exposició a l'etilè pot provocar irritació en el nas i la gola, a més d'efectes en el sistema nerviós central com mal de cap, fatiga, confusió i pèrdua del coneixement. El valor umbral d'olor de l'etilè és de 270 ppm. A més, l'etilè és una substància química sumament inflamable i reactiva. Així, presenta un elevat perill d'incendi i explosió. És per això que cal prendre les mesures de seguretat adients [17].

1.2.4.1.2 Benzè

El benzè és un hidrocarbur aromàtic on cada àtom de carboni ocupa el vèrtex d'un hexàgon. Es tracta d'un líquid incolor en condicions estandard i molt inflamable caracteritzat per una aroma dolça, també es caracteritza per ser un compost volàtil i poc soluble en aigua.

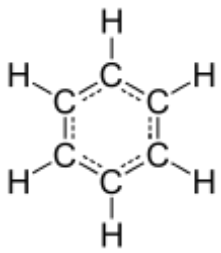


Figura 1.15: *Estructura molecular del benzè*

El benzè es troba en la llista dels 20 productes químics de major volum de producció. Algunes industries utilitzen el benzè com un punt de partida per fabricar altres productes químics com l'òxid de propilè, l'estirè, plàstics, resines, entre d'altres.

Taula 1.9: *Propietats físiques del benzè (condicions estàndard)*[18]

Fórmula	C6H6
Pes Molecular (g/mol)	78,11
Densitat (kg/m3)	878,6
Punt de fusió (ºC)	5
Punt d'ebullició (ºC)	80
Viscositat a 20 ºC (cP)	0,652
Punt d'inflamabilitat (ºC)	-11
Temperatura d'autoignició (ºC)	561

L'exposició en nivells baixos de benzè ocorre habitualment, ja que a l'aire lliure hi ha traçes de benzè provinents del fum del tabac, emissions dels vehicles, estacions de servei, entre d'altres. Tot i així, inhalar nivells elevats de benzè pot produïr somnolència, mareig, acceleració del ritme cardíac, mal de cap, confusió i pèrdua del coneixement. L'ingestió d'aliments o begudes que contiguin nivells elevats de benzè poden produir vòmits, irritació de l'estòmac, mareig, somnolència, convulsions i eventualment la mort.

L'efecte principal de l'exposició prolongada del benzè és sobre la sang. El benzè produeix alteracions a la mèdula dels ossos i pot produir una disminució del número de glòbuls vermells, cosa que pot produir anèmia. Altrament, pot produir hemorràgies i pot afectar al sistema immunitari, augmentant la probabilitat de contraure infeccions [19].

1.2.4.2 Productes

1.2.4.2.1 Etilbenzè

L'etilbenzè és un líquid incolor, inflamable i amb un olor similar a la gasolina, es troba en forma natural al quitrà i al petroli, també en productes com pintures i plaguicides. L'etilbenzè s'utilitza principalment per fabricar una altra substància química, l'estirè.

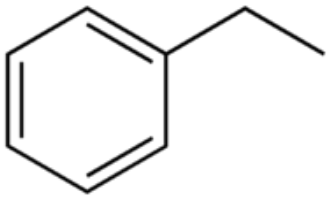


Figura 1.16: *Estructura molecular de l'etilbenzè*

Així doncs, mitjançant la polimerització de l'estirè s'obté poliestirè, el qual s'utilitza per la fabricació de plàstics i resines. A més, l'etilbenzè també s'utilitza com a solvent en combustibles, i per la manufactura d'altres productes químics.

Taula 1.10: *Propietats físiques de l'etilbenzè (condicions estàndard)* [20]

Fórmula	C8H10
Pes Molecular (g/mol)	106,2
Densitat (kg/m3)	866,5
Punt de fusió (ºC)	-94,9
Punt d'ebullició (ºC)	136,2
Pressió crítica (bar)	36,09
Temperatura crítica (ºC)	344
Temperatura d'autoignició (ºC)	460

Les vies d'exposició d'etilbenzè es poden produïr per inhalació del vapor o per ingestió. Els principals efectes d'una exposició de curta durada són irritació als ulls, la gola i la pell. L'ingestió del líquid pot donar lloc a l'aspiració del mateix pels pulmons i la conseqüent neumonitis química. A més, pot afectar al sistema nerviós central disminuit l'estat d'alerta. Pel que fa als efectes d'exposició prolongada o repetida, segons l'Agència Internacional per l'Investigació del Càncer (IARC) ha determinat que l'etilbenzè és possiblement carcinogen en èssers humans, ja que aquesta substànci pot afectar als ronyons i al fetge, provocant alteracions funcionals [21].

1.2.4.3 Subproductes i altres compostos

1.2.4.3.1 Dietilbenzè

El dietilbenzè s'utilitza com a dissolvent i com intermediari en la fabricació d'altres compostos orgànics com agents entrecreuadors,plastics, entre d'altres. El dietilbenzè és insoluble en aigua, però soluble en etanol, benzè i tetraclorur de carboni.

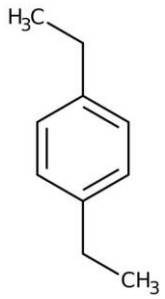


Figura 1.17: *Estructura molecular del 1,4-dietilbenzè*

A EBenz el dietilbenzè (mescla d'isòmers) es forma als reactors d'alquilació com a resultat de la reacció de l'etilbenzè (producte desitjat) amb l'etilè present que no ha reaccionat amb benzè. Així doncs, s'obtè com a subproducte que es separarà a la columna corresponent i es recirculará a un reactor de transalquilació, on en presència de benzè en excès, es formarà etilbenzè.

Taula 1.11: *Propietats físiques del dietilbenzè (condicions estàndard)* [22]

Fórmula	C10H14
Pes Molecular (g/mol)	134,2
Densitat relativa (aigua = 1)	0,86
Punt de fusió (ºC)	-75
Punt d'ebullició (ºC)	182
Pressió de vapor (kPa)	0,13
Punt d'inflamació (ºC)	56
Temperatura d'autoignició (ºC)	430

Les vies d'exposició de l'etilbenzè poden ser per inhalació del vapor i per ingestió. Els efectes d'una exposició de curta durada són irritació dels ulls i la pell. Endemés, el dietilbenzè pot afectar al sistema nerviós central. Si l'exposició a la substància és perllongada o repetida, aquesta pot afectar als ronyons i al fetge [22].

1.2.4.3.2 Toluè

El toluè o metilbenzè és un hidrocarbur aromàtic que es produeix a partir del benzè. Es tracta d'un líquid incolor amb un olor característic. Amb el toluè es pot fabricar TNT (trinitrotoluè), colorants, detergents, entre d'altres. Anualment, es produeixen al voltant d'unes cinc milions de tones de toluè.

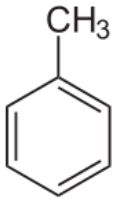


Figura 1.18: *Estructura molecular del toluè*

A EBenz, el toluè arriba com a impuresa procedent del corrent de benzè. Toi i així, en aquest procés el toluè reacciona amb etilè per formar etilbenzè (producte desitjat) i propilè, que seria un altre subproducte del procés.

Taula 1.12: *Propietats físiques del toluè (condicions estàndard)* [23]

Fórmula	C7H8
Pes Molecular (g/mol)	92,10
Densitat relativa (aigua = 1)	0,87
Punt de fusió (ºC)	-95
Punt d'ebullició (ºC)	111
Pressió de vapor (kPa)	3,8
Punt d'inflamació (ºC)	4
Temperatura d'autoignició (ºC)	480

L'exposició a nivells baixos de toluè pot causar mal de cap, mareig, cansament, confusió, pèrdua de la memòria i nàusees. Normalment aquests símptomes desapareixen quan l'exposició es detèn. D'altra banda, l'exposició diària i a llarg termini del toluè pot causar pèrdua d'audició i de visió

del color. Respirar toluè de forma repetitiva, provinent de coles o diluents de pintura podria causar danys permanents al cervell [24].

1.2.4.3.3 Propilè

El propilè és un gas combustible incolor amb un olor natural picant, altament inflamable i no és tòxic. És un producte que sovint s'obtè durant el craqueig tèrmic de diferents combustibles com la nafta i el GLP (gas licuat del petroli). Es tracta d'un dels productes químics més principals de l'indústria, ja que és la matèria prima per la fabricació d'òxid de propile i de polipropliè, entre d'altres.

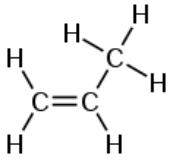


Figura 1.19: *Estructura molecular del propilè*

A EBenz, el propilè s'obtè com a subproducte provinent de la reacció del toluè amb etilè. Així doncs, el propilè surt per caps de la primera columna, amb la resta de gasos no desitjats i s'utilitza com a combustible.

Taula 1.13: *Propietats físiques del propilè (condicions estàndard)* [25]

Fórmula	C3H6
Pes Molecular (g/mol)	42,10
Densitat relativa de vapor (aire = 1)	1,5
Punt de fusió (ºC)	-185
Punt d'ebullició (ºC)	-48
Pressió de vapor (kPa)	1158
Temperatura d'autoignició (ºC)	460

Els riscs associats a l'exposició al propilè poden ser per inhalació o per ingestió. Per una banda, el contacte amb el propilè licuat pot causar lesions per congelació. L'exposició a altes concentracions de propilè pot fer disminuir la quantitat d'oxigen a l'aire i causar asfixia, amb símptomes de mal de cap, mareig, nàusees, vòmits, pèrdua de la coordinació i del judici, i eventualment la mort [25].

1.2.4.3.4 Metà

El metà és un gas natural incolor i inolor que es produeix degut a la desocmposició o a la digestió de matèria orgànica, com les plantes. Una de les propietats més importants del metà és que produeix més calor, llum i la seva combustió és més neta que altres combustibles hidrocarburs, o fòsils, com per exemple el carbó o la gasolina refinada a partir del petroli.

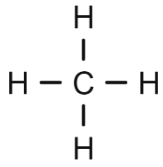


Figura 1.20: *Estructura molecular del metà*

A EBenz, el metà s'obtè del corrent diluit d'etilè, degut a que aquest corrent d'etilè es troba diluït, constituint el 20% en volum de composició de metà, un 30% en volum de composició d'età i el 50% restant de composició en volum d'etilè. El metà no participa en les reaccions que ocorren al reactor d'alquilació. Així doncs, el metà surt per caps de la primera columna, amb la resta de gasos no desitjats i s'utilitza com a combustible.

Taula 1.14: *Propietats físiques del metà (condicions estàndard)* [26]

Fórmula	CH4
Pes Molecular (g/mol)	16,00
Densitat relativa de vapor (aire = 1)	1,5
Punt de fusió (ºC)	-183
Punt d'ebullició (ºC)	-161
Solubilitat en aigua (ml/100 ml)	3,3
Temperatura d'autoignició (ºC)	537

Els riscs associats a l'exposició al metà poden ser per inhalació o per ingestió. Per una banda, el contacte amb el metà liquat pot causar lesions per congelació. L'exposició a altes concentracions de metà pot fer disminuir la quantitat d'oxigen a l'aire i causar asfixia, amb símptomes de mal de cap, mareig, nàusees, vòmits i pèrdua del coneixement [26].

1.2.4.3.5 Età

L'età és un gas incolor i inodor combustible en condidions normals (0 ºC i pressió atmosfèrica), es tracta d'un hidrocarbur alifàtic alcà. L'età es troba en una quantitat apreciable al gas natural. Una de les principals aplicacions industrials de l'età és actuar com a matèria primera per produïr etilè a través de la ruptura mitjançant craqueig, deshidrogenant l'età. En aquest procès, els hidrocarburs lleugers són escalfats amb forns fins a temperatures de 750-950 ºC. Aquesta elevada temperatura produeix la ruptura dels enllaços [27].

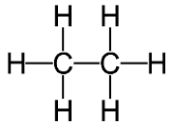


Figura 1.21: *Estructura molecular de l'età*

A EBenz, l'età s'obtè del corrent diluit d'etilè, degut a que aquest corrent d'etilè es troba diluït, constituint el 20% en volum de composició de metà, un 30% en volum de composició d'età i el 50% restant de composició en volum d'etilè. L'età no participa a les reaccions que ocorren al

reactor d'alquilació. Així doncs, l'età surt per caps de la primera columna, amb la resta de gasos no desitjats i s'utilitza com a combustible.

Taula 1.15: *Propietats físiques de l'età (condicions estàndard)* [28]

Fórmula	C2H6
Pes Molecular (g/mol)	30,10
Densitat relativa de vapor (aire = 1)	1,05
Punt de fusió (ºC)	-183
Pressió de vapor (kPa)	3850
Punt d'ebullició (ºC)	-89
Temperatura d'autoignició (ºC)	472

Els riscs associats a l'exposició a l'età poden ser per inhalació o per ingestió. Per una banda, el contacte amb l'età licuat pot causar lesions per congelació. L'exposició a altes concentracions de metà pot fer disminuir la quantitat d'oxigen a l'aire i causar asfixia, amb símptomes de mal de cap, mareig, somnolència, vòmits, pèrdua del coneixement i eventualment la mort [28].

1.3 Diagrama de blocs i explicació detallada del procés

1.3.1 Diagrama de blocs

En aquest apartat es presenta el diagrama de blocs del procès, en el qual s'esquematitza de forma general les diferents etapes del procés. A la Figura 1.22 es pot observar el diagrama de blocs, mentre que més endavant es presentarà el diagrama de procés acompanyat del balanç de matèria pertinent.

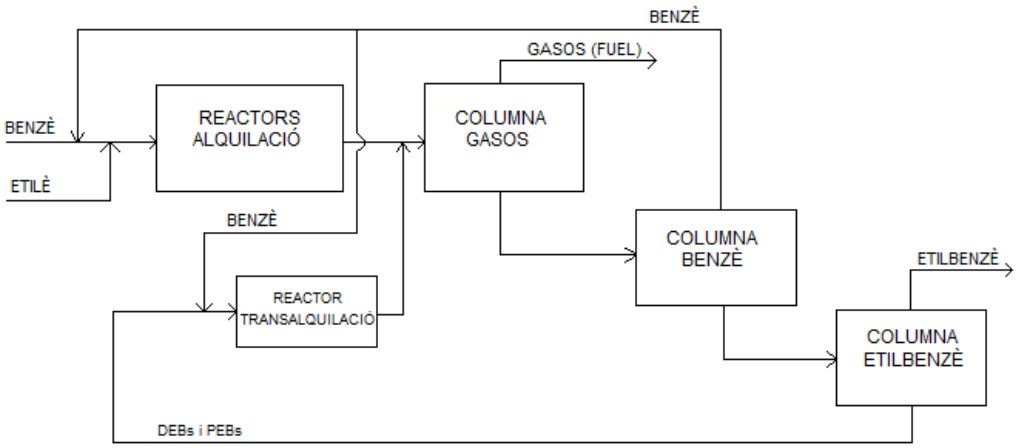


Figura 1.22: *Diagrama de blocs del procés de producció d'etilbenzè a EBenz*

1.3.2 Diagrama de flux de procés i balanç de matèria

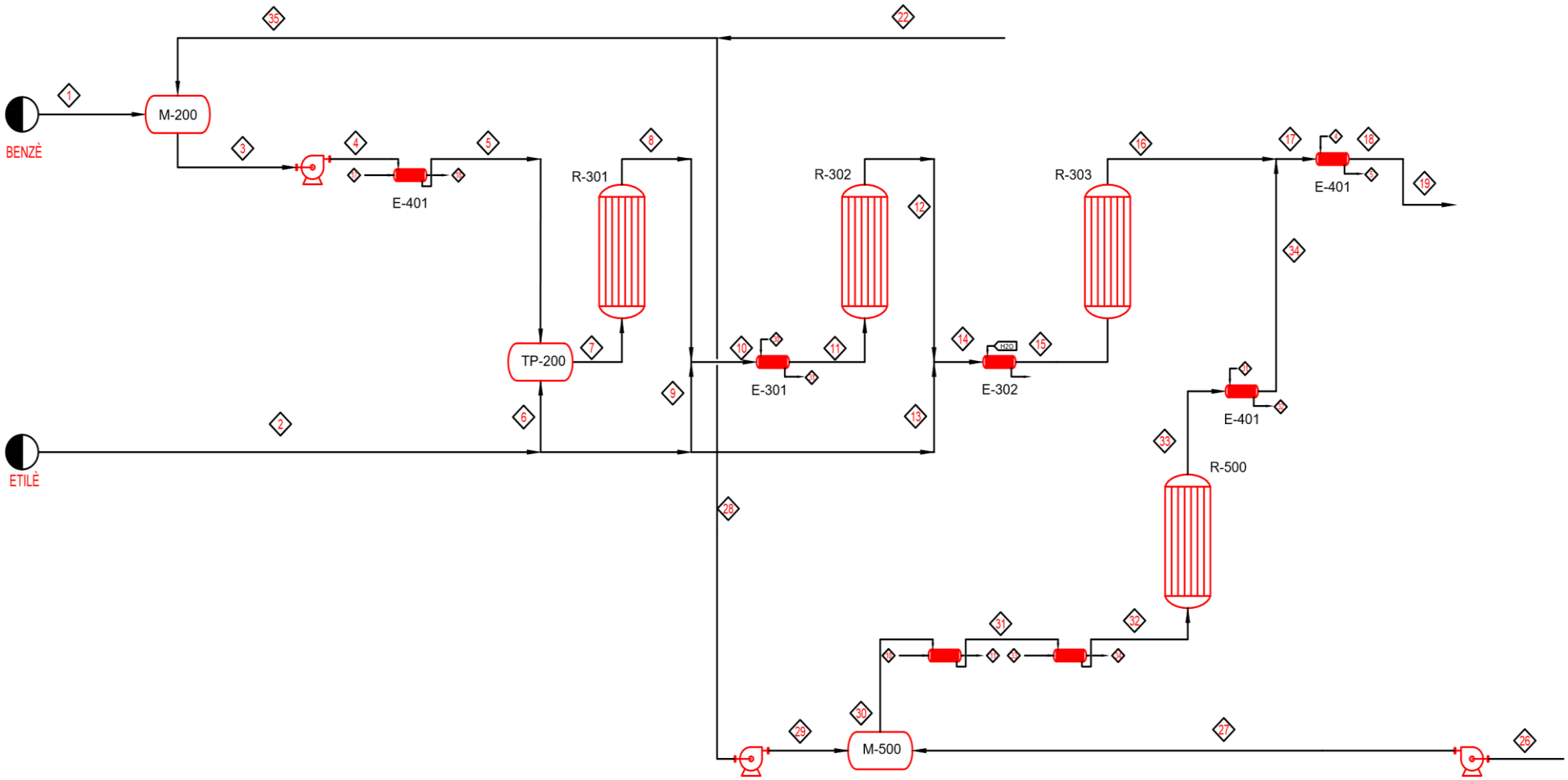


Figura 1.23: *Diagama de flux de procés (1/2)*

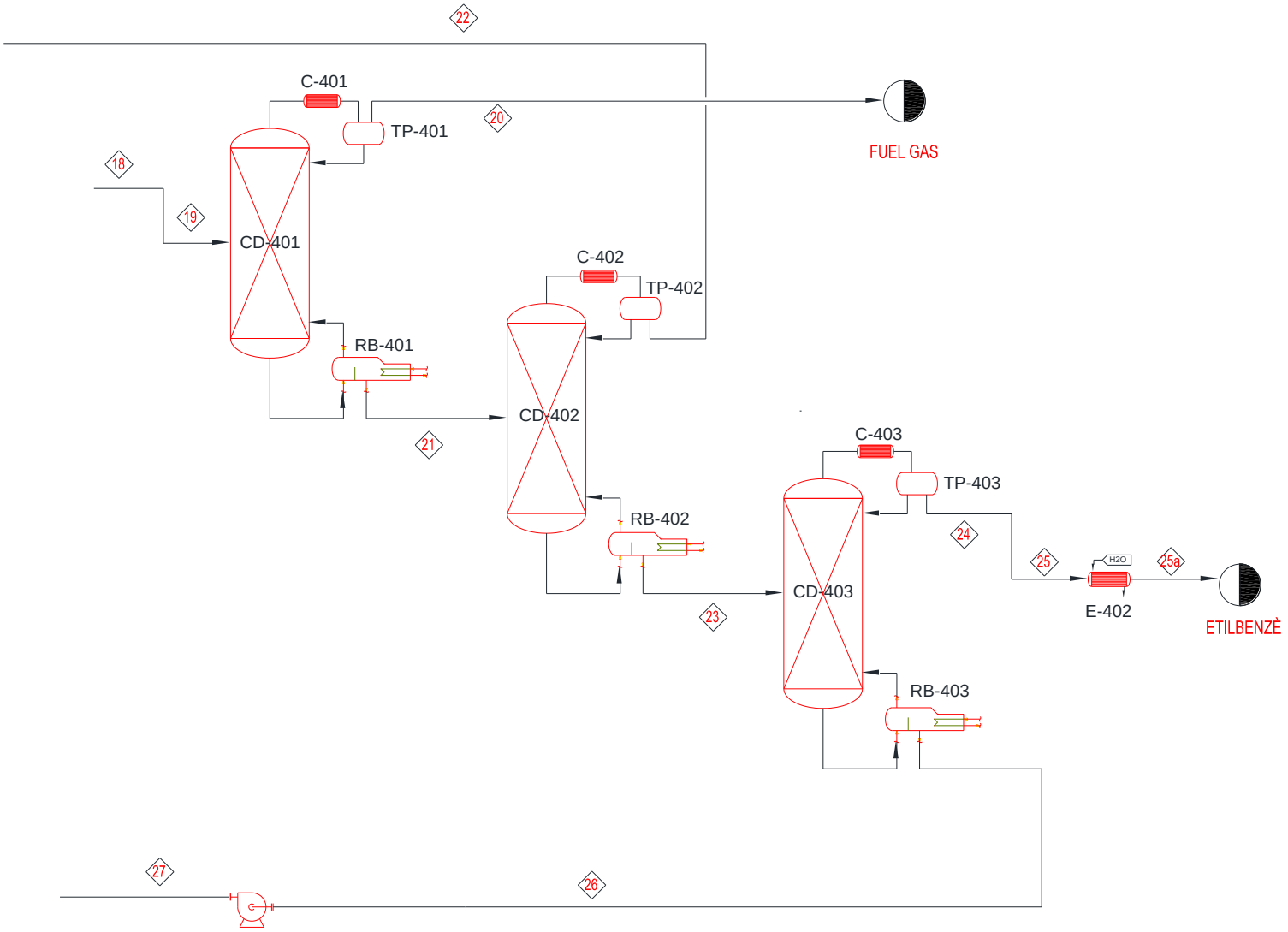


Figura 1.24: *Diagama de flux de procés (2/2)*

Taula 1.16: *Balanç de matèria de la planta de producció d'etilbenzè 1/4*

Número de corrent	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Temperatura (ºC)	25	25	127.1	127.8	436.1	25	400	462.2	25	432.5
Pressió (kPa)	920	2000	920	2000	1974	2000	1974	1959	2000	1959
Fracció molar de vapor	0.000	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
kmol/h totals	416.4	882.3	1178.6	1178.6	1178.6	308.8	1487.3	1345.0	264.7	1609.7
kg/h totals	32575.6	23166.5	92113.5	92113.5	92113.5	8102.0	100215.4	100215.4	6950.1	107165.5
Fraccions molars										
Etilè	0.000	0.500	0.000	0.000	0.000	0.500	0.104	0.006	0.500	0.087
Età	0.000	0.300	0.000	0.000	0.000	0.300	0.062	0.069	0.300	0.107
Metà	0.000	0.200	0.000	0.000	0.000	0.200	0.042	0.046	0.200	0.071
Benzè	0.991	0.000	0.997	0.997	0.997	0.000	0.790	0.774	0.000	0.647
Toluè	0.009	0.000	0.003	0.003	0.003	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000
Propilè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.002
Etilbenzè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.098	0.000	0.082
Dietilbenzè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.000	0.003

Taula 1.17: *Balanç de matèria de la planta de producció d'etilbenzè 2/4*

Número de corrent	11	12	13	14	15	16	17	18	19
Temperatura (ºC)	400	447.1	25	416.7	400	451.5	449.9	203.95	185
Pressió (kPa)	1945	1930	2000	1930	1910	1895	1895	1887	920
Fracció molar de vapor	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.786	0.786
kmol/h totals	1609.7	1490.9	308.8	1799.7	1799.7	1655.1	1761.4	1761.4	1761.4
kg/h totals	107165.5	107165.6	8108.3	115273.8	115273.8	115273.8	125832.5	125832.5	125832.5
Fraccions molars									
Etilè	0.087	0.015	0.500	0.098	0.098	0.019	0.018	0.018	0.018
Età	0.107	0.115	0.300	0.147	0.147	0.160	0.150	0.150	0.150
Metà	0.071	0.077	0.200	0.098	0.098	0.107	0.100	0.100	0.100
Benzè	0.647	0.627	0.000	0.519	0.519	0.491	0.477	0.477	0.477
Toluè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Propilè	0.002	0.002	0.000	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
Etilbenzè	0.082	0.152	0.000	0.126	0.126	0.196	0.230	0.230	0.230
Dietilbenzè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.000

Taula 1.18: *Balanç de matèria de la planta de producció d'etilbenzè 3/4*

Número de corrent	20	21	22	23	24	25	25a	26	27	28
Temperatura (ºC)	31.98	191.6	173.5	245.5	241.6	135	30	298.5	300.8	173.5
Pressió (kPa)	920	920	920	920	920	101.3	101.3	920	2000	920
Fracció molar de vapor	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
kmol/h totals	487.0	1274.4	828.5	445.9	405.9	405.9	405.9	40.0	40.0	66.3
kg/h totals	12650.4	113179.8	64715.0	48464.8	43091.8	43091.8	43091.8	5373.0	5373.0	5177.2
Fraccions molars										
Etilè	0.065	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Età	0.544	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Metà	0.362	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Benzè	0.022	0.651	1.000	0.004	0.005	0.005	0.005	0.000	0.000	1.000
Toluè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Propilè	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Etilbenzè	0.000	0.317	0.000	0.905	0.994	0.994	0.994	0.000	0.000	0.000
Dietilbenzè	0.000	0.032	0.000	0.091	0.002	0.002	0.002	1.000	1.000	0.000

Taula 1.19. *Balanç de matèria de la planta de producció d'etilbenzè 4/4*

Número de corrent	29	30	31	32	33	34	35
Temperatura (ºC)	174.5	241	432.1	500	503.9	434.35	173.5
Pressió (kPa)	2000	2000	1996	1991	1976	1972	920
Fracció molar de vapor	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.000
kmol/h totals	66.3	106.3	106.3	106.3	106.4	106.4	762.2
kg/h totals	5177.2	10550.2	10550.2	10550.2	10550.2	10550.2	59537.8
Fraccions molars							
Etilè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Età	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Metà	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Benzè	1.000	0.623	0.623	0.623	0.247	0.247	1.000
Toluè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Propilè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Etilbenzè	0.000	0.000	0.000	0.000	0.751	0.751	0.000
Dietilbenzè	0.000	0.377	0.377	0.377	0.002	0.002	0.000

1.3.3 Comprovació del balanç de matèria

En aquest apartat es comprova el balanç de matèria que governa el disseny dels diversos equips i canonades de la planta. Per realitzar la comprovació es comprova el cabal màssic total introduït al procés i s'ha de comprovar que coincideix amb el cabal total que surt.

A EBenz, les entrades del procés corresponen a l'aliment de benzè (corrent 1) i a l'aliment d'etilè (corrent 2). Les sortides del procés corresponen a la sortida de gasos (corrent 19) i a la sortida d'etilbenzè (corrent 23).

Taula 1.20: *Comprovació del balanç de matèria*

ENTRADES		SORTIDES	
Corrent	**Cabal (kg/h)**	**Corrent**	**Cabal (kg/h)**
1	32575.64	**20**	12650.37
2	23166.49	**25a**	43091.76
TOTAL	**55742.13**	**TOTAL**	**55742.13**

A la **Taula 1.20** es pot observar que el balanç de matèria establert és correcte ja que el cabal màssic d'entrada és pràcticament equivalent al cabal màssic de sortida del procés

1.3.4 Descripció detallada del procés

A la **Figura 1.23 i 1.24** es pot observar el diagrama de flux de procés. Així doncs, en primer lloc el benzè arriba a l'àrea d'emmagatzematge de reactiu dissenyada a partir de les necessitats operacionals de benzè al procés. El benzè s'emmagatzema a partir de la descàrrega de cisternes, utilitzant una mànega que s'acobla a una canonada amb una vàlvula de papallona, la qual permet el pas de benzè als tancs d'emmagatzematge. D'altra banda, l'etilè provè per canonada des d'un polígon proper. Per tant, no serà necessari disposar de tancs d'emmagatzematge d'aquest reactiu, ja que mitjançant vàlvules es pot controlar l'aliment del mateix.

Tot i que el balanç de matèria s'ha realitzat en continu, que és el regim d'operació de la planta, a l'hora de realitzar la posada en marxa cal afegir una major quantitat de benzè fresc fins que la recirculació de benzè procedent de la columna de benzè recirculi el cabal necessari segons la relació benzè/etilè establerta (7,5:1) per tal que es pugui operar amb aquesta relació amb un menor cabal de benzè fresc.

El benzè procedent dels tancs d'emmagatzematge, el qual es troba a pressió atmosfèrica, s'incrementa la seva pressió fins als 9.2 bar i es mescla en un tanc amb el benzè recirculat del procès a aquesta mateixa pressió. Seguidament, s'augmenta la pressió de l'efluent d'aquest tanc (M-200) a 20 bar, que és la pressió d'operació. A més, per assolir la temperatura d'operació, a EBenz s'ha optat per aplicar l'aprofitament energètic en diversos punts del procés, consistint aquest en fer circular corrents del procés els quals es trobin a una temperatura elevada i es vulgui disminuir mitjançant l'intercanvi de calor amb el corrent a baixa temperatura el qual es vol escalfar. Disminuint així les necessitats d'aigua de refrigeració amb l'estalvi energètic que comporta.

En aquest cas, per tal d'escalfar el corrent de benzè que entra al procès s'aprofita un dels corrents del procés que es vol refredar; concretament la sortida del R - 303. Així doncs, al bescanviador de calor E-401 es fa circular benzè per escalfar fins a la temperatura d'operació i l'efluent de la sèrie de reactors per a ser refredat mitjançant l'bescanvi de calor amb el corrent de benzè i, així, alimentar aquest corrent a les columnes a una temperatura d'operació adequada.

Així doncs, el benzè s'alimenta a 127.8ºC degut a que es troba mesclat amb el benzè recirculat, que es trovava a una major temperatura, i el corrent de benzè surt del bescanviador E-401 a una temperatura de 436.1 ºC, el qual un cop es mescla amb l'aliment d'etilè en TP-200, el corrent resultant es troba a una temperatura de 400ºC i 20 bar de pressió, les quals són les condicions d'operació per alimentar el corrent al reactor i dur a terme la reacció d'alquilació en 3 reactors de llit fix.

Cal destacar que l'aliment d'etilè al procés es dosifica entre l'aliment dels 3 reactors, en el primer reactor un 35% de l'aliment d'etilè al procés, un 30% d'aliment d'etilè al segon reactor i l'aliment del 35% restant d'etilè s'atribueix al tercer reactor. El corrent d'etilè que provè de la canonada es troba diluït amb altres productes, és per això que el tipus de procés utilitzat a EBenz és un procés catalitzat per zeolites en fase vapor.

L'àrea de reacció d'alquilació consisteix en 3 reactors de llit fix, tots ells catalitzats mitjançant zeolites sintètiques de tipus ZSM-5. Entre reactor i reactor, a part d'afegir etilè dosificat, hi ha intercanviadors de calor per tal de refredar l'efluent del reactor (escalfat degut a que es tracta d'una reacció exotèrmica) per facilitar les condicions d'operació del procés. El primer dels bescanviadors (E-301) entre reactors refreda l'efluent del reactor mitjançant aprofitament energètic, ja que l'efluent es refreda gràcies a l'intercanvi de calor entre aquest i el corrent d'aliment al reactor de transalquilació, el qual es vol escalfar.

Pel que fa al segon bescanviador (E-302), l'efluent del segon reactor es refrigera amb aigua. Tot i així, cadascun dels reactors contè un sistema de seguretat per controlar la temperatura en cas necessari. Es basa en un sistema multitubular pel qual pot circular aigua de refrigeració a través del reactor, el qual només s'acciona en cas de detectar un augment de la temperatura als reactors significativament superior a la temperatura d'operació habitual.

A l'efluent del sistema de 3 reactors, es troba el bescanviador de calor E-401 el qual ja s'ha comentat anteriorment que el seu objectiu és refredar l'efluent de la sèrie de reactors (inclòs el de transalquilació) per alimentar-lo a la columna fent circular el corrent de benzè que s'alimenta als reactors, el qual es vol escalfar. En aquest cas, el corrent de sortida dels reactors s'alimenta al bescanviador a una temperatura de 449.9ºC i es refreda fins als 203.95ºC. Tot seguit, es redueix la pressió del corrent de 20 bar a 9.20 bar mitjançant una vàlvula reductora de pressió, degut a que les columnes operen a una pressió de 9.20 bar. El corrent resultant es troba a 185ºC i 9.20 bar de pressió

L'efluent de reacció ja refredat i a 9.20 bar entra a l'àrea de separació, on en primer lloc s'utilitza una columna de gasos on es separen per caps els gasos més lleugers, els quals s'utilitzen com a fuel per la caldera d'oli tèrmic, fluid que un cop escalfat a la caldera, s'utilitza en el calderí de cadascuna de les tres columnes. A més, la resta de gas s'envia a una turbina de gas, on es realitza la cogeneració. Pel que fa a la resta de compostos més pesats, els quals van a parar a la columna

de benzè. En aquesta columna es separa per caps el benzè, el qual la major part es recircula cap a l'inici del procés per a reutilitzar-se com a reactiu als reactors d'alquilació. La resta de benzè s'alimenta com a reactiu en un reactor de transalquilació. Així doncs, per cues surten els productes més pesats, els quals van a parar a la columna d'etilbenzè.

En aquesta columna es separa per caps l'etilbenzè, que és el producte desitjat, el qual es redueix la seva pressió fins l'atmosfèrica amb una vàlvula reductora de pressió i es refreda el corrent fins a 30ºC per ser emmagatzemat com a producte final, mentre que per cues surten els subproductes més pesats, com el dietilbenzè, el qual es recircula en la seva totalitat, es mescla amb part del benzè provinent de la columna de benzè, havent incrementat prèviament la pressió d'ambdós corrents a la pressió d'operació del reactor de transalquilació. És a dir, 20 bar.

Tot seguit, s'alimenta la mescla a un sistema de 2 bescanviadors en sèrie per augmentar la temperatura del corrent a la temperatura necessària per dur a terme la reacció de transalquilació. Aquest bescanviadors de calor també són una font d'aprofitament energètic, ja que el primer dels bescanviadors escalfa l'aliment del reactor de transalquilació a partir de l'efluent del primer reactor d'alquilació, mentre que el segon bescanviador escalfa l'aliment del reactor de transalquilació a partir de l'efluent del mateix.

A l'entrada dels bescanviadors en sèrie, el corrent circula a una temperatura de 241ºC, mentre que a la sortida dels bescanviadors, és a dir, a l'aliment del reactor de transalquilació (corrent 32), aquest es troba a una temperatura de 500ºC i 20 bar de pressió, aquestes són les condicions d'operació del reactor de transalquilació. Com també es tracta d'una reacció exotèrmica, és per això que s'ha optat per realitzar un aprofitament energètic en aquest reactor, aprofitant que l'efluent tindrà una temperatura superior a l'aliment es podria escalfar l'aliment i, a la vegada, refredar l'efluent.

El reactor de transalquilació consisteix d'igualment en un reactor de llit fix catalitzat per zeolites de tipus ZSM-5 en fase vapor. L'efluent del reactor de transalquilació es mescla amb l'efluent dels reactors d'alquilació just abans de l'E-401 ja comentat anteriorment.intercanviadors de calor i de l'àrea de separació.

1.4 Especificacions i necessitats de serveis de planta

A EBenz, per tal de dur a terme l'operació de la planta satisfactòriament, es requereixen una sèria de serveis de planta, els quals consisteixen en operacions auxiliars que satisfan les necessitats de la planta a efectes de que permetin la seva operació. Per tant, cal realitzar els càlculs dels serveis de planta que es requereixen, els quals es mostren al Capítol 11. Manual de càlculs.

Els principals serveis de planta que hi haurà a EBenz són l'aigua de xarxa, contra incendis, descalcificada, oli tèrmic, aire comprimit, nitrogen i electricitat.

Taula 1.21: *Classificació dels serveis de planta*

Servei	Classificació	Localització	Àrea/Servei
Aigua de xarxa	Matèria	Externa	Escomesa a peu de parcel·la
Aigua contra incendis	Matèria	Interna	A-1100
Aigua descalcificada	Matèria	Interna	A-1000
Aigua de refrigeració	Matèria	Interna	A-1000
Nitrogen	Matèria	Externa	Proveït per Linde
Oli tèrmic	Matèria	Interna	A-1000
Aire comprimit	Matèria	Interna	A-1000
Electricitat	Energia	Externa	A peu de parcel·la
Gas natural	Energia	Externa	A peu de parcel·la

Tot seguit, es realitza la descripció de cadascun dels serveis de planta i es quantifican els requeriments de cadascun.

1.4.1 Aigua de xarxa

A EBenz es disposa d'aigua que provè de la xarxa a través d'una canonada escomesa a peu de parcel·la de 200mm de diàmetre. Aquesta aigua principalment s'utilitza a l'àrea 1200, és a dir, per les oficines, vestuaris, oficines i el laboratori, a més, es pot utilitzar com aigua de reg per les zones verds de la planta.

A efectes d'utilitzar aquesta aigua en el procés, per tal d'evitar la generació d'incrustacions en canonades i equips degut a la precipitació de sals s'haurà de dur a terme un procés de descalcificació, un cop l'aigua s'hagi descalcificat, serà utilitzada en el procés com aigua descalcificada, per cadascuna de les diferents aplicacions en el procés segons calgui.

Durant la posada en marxa, el cabal d'aigua de xarxa necessari per fer circular a través del descalcificador és de 3000 m^3/h, un cop s'ha descalcificat el corrent, es tancarà el circuit de refrigeració i únicament serà necessària una reposició d'aigua de xarxa d'aproximadament 60 m^3/h, corresponent a un 2% del cabal per cada 10ºC de salt tèrmic per compensar l'efecte de l'evaporació de l'aigua a la torre de refrigeració.

1.4.2 Aigua contra incendis

L'aigua contra incendis provè de l'aigua de xarxa i s'utilitza per subministrar als equips antiincendis. Aquesta aigua s'emmagatzema en una balsa de reserva a l'àrea 1100. Aquesta balsa

de reserva ha de tenir una capacitat de 1903,05 m^3 d'aigua. Aquesta capacitat és suficient per subministrar aigua als equips antiincendis per un periode determinat de temps segons la normativa vigent.

L'aigua contra incendis provè a una pressió de 4 bar. Per tant, per a poder bombejar a altres punts de la planta a la pressió requerida en cas d'incendi o explosió, s'utilitza un sistema de bombeig dissenyat per cobrir aquesta necessitat a efectes de seguretat a la planta.

1.4.3 Aigua descalcificada

Per tal d'evitar problemes amb els equips i canonades produïdes per incrustacions de cal de l'aigua, cal descalcificarla per allargar la vida útil d'aquests. Aquesta aigua originalment provindrà de l'aigua de xarxa i es tractar mitjançant un descalcificador de la marca IONCAL model E-1000 el qual s'encarrega de descalcificar l'aigua, fent-la circular a través d'una resina de bescanvi iònic. Els detalls sobre aquest descalcificador s'especifica al Capítol 2 del projecte.

Normalment, s'utilitza constantment el descalcificador degut a que es tracta d'un circuit tancat d'aigua de refrigeració i s'haurà d'utilitzar la descalcificadora pel cabal d'aigua de reposició que entra a la torre de refrigeració per compensar l'efecte de l'evaporació d'aquesta. Durant la posada en marxa, aquest funcionaria a una major capacitat, amb la finalitat de descalcificar tota l'aigua que estigui entrant en el procés. Un cop s'hagi descalcificat tota l'aigua de xarxa, es tanca el circuit i únicament es descalficifica l'aigua corresponent al corrent de reposició de la torre de refrigeració, corresponent a uns 60 m^3/h.

El volum de les carcasses dels reactors i, per tant, el volum d'aigua d'emergència necessària per refrigerar els reactors són: 164,24 , 174,21 , 208,73 i 17,29. Tenint en compte que es requereix un temps d'ompliment i, per tant d'actuació, d'uns 45 minuts des de que s'activa l'alarma. Aquest temps és en cas de que en el transcurs que es va omplint el reactor la temperatura no es controli. Un cop controlada, el cabal s'atura i no té perquè omplir-se fins a dalt sinó fins que la temperatura es pugui controlar. Les necessitats d'aigua, en cas d'emergència són: 58, 64, 77 i 6 L/s.

El descalcificador té connexions tancades a cadascun dels reactors les quals configuren aquest sistema de refrigeració d'emergència. Quan s'activa l'alarma d'un determinat reactor, augmenta la demanda de l'aigua de xarxa segons les necessitats d'aigua configurades per cadascun dels reactors, aquesta aigua de xarxa es descalcificará per posteriorment refrigerar el reactor en qüestió a través de l'obertura de la vàlvula que connecta el circuit tancat amb la canonada de refrigeració de reactors d'emergència, aquestes vàlvules normalment estaran tancades fins que no s'activi una alarma i comenci el protocol d'emergència.

1.4.4 Aigua de refrigeració

La planta te unes necessitats de refrigerar els fluids de procés mitjançant aigua la qual es refreda mitjançant una torre de refrigeració.

A EBenz, la temperatura requerida del refrigerant per refredar tots els equips es troba en la gran majoria a 30ºC, per tant es requereix una torre que refredi l'aigua contínuament segons el salt tèrmic desitjat. El salt tèrmic establert de l'aigua de refrigeració determinarà el disseny dels bescanviadors de calor que utilitzin l'aigua com a fluid refrigerant.

En aquestes torres de refrigeració, l'aigua calenta es posa en contacte en contracorrent amb aire no saturat, de manera que una petita fracció de l'aire absorbeix calor del propi corrent d'aigua, refredant-lo, de manera que l'aigua refredada s'absorbeix a la fase gas. Un cop l'aigua s'hagi refredat, es diposita en una balsa, la qual s'encarrega de distribuir el corrent d'aigua requerit per tal de satisfer les necessitats dels equips.

També, cal considerar com s'ha comentat anteriorment, que l'aigua que s'utilitza en el procés per refrigerar i circular a través de les canonades corresponents, ha d'estar prèviament descalcificada mitjançant un sistema de descalcificadors. A més, pel funcionament de les torres de refrigeració, una part del corrent d'aigua s'evapora, per tant s'ha de considerar un cabal adicional de reposició d'aigua de xarxa, havent de passar també pel procès de descalcificació. Aquest cabal de reposició haurà de ser d'aproximadament el 2% del cabal d'aigua de refrigeració total per cada 10ºC de salt tèrmic. En aquest cas, aproximadament uns 60 m^3/h d'aigua de reposoció.

El equips els quals contenen un corrent a la sortida de cadascun que requereixen refredar aigua a la torre són els que es mostren en la Taula **1.22**.

***Taula 1.22**: Càlcul dels requeriments d'aigua de refrigeració*

Equip	Calor bescanviat (kW)	Cabal d'aigua (m^3/h)
E-302	1.292,00	108,15
E-402	2.330,00	195,02
C-401	11.307,60	946,45
C-402	13.338,90	1.116,46
C-403	7.564,80	633,18
Total	35.833,30	2.999,27

Per tant, s'ha d'escollir una torre de refrigeració la qual sigui capaç de bescanviar un total de 35.833,30 kW. Per tal de satisfer aquestes necessitats s'ha decidit posar 4 torres de refrigeració de la marca LIANGKEN model LRN-800L/S, els detalls d'aquesta es poden apreciar al Capítol 2: Equips.

1.4.5 Electricitat, estació transformadora i grup electrogen

L'energia elèctrica fa funcionar tots els equips i serveis del procés que requereixin electricitat, incloent les oficines. Per tal de determinar el consum elèctric anual que necessitarà la planta es realitza un recompte dels equips els quals requereixen de potència elèctrica i la zona d'oficines.

A més, determinar els requeriments de potència elèctrica a les que caldrà transformar al voltatge requerit pels equips és necessari per assegurar el subministrament elèctric en cas de fallada a la xarxa de subministrament o l'estació transformadora a través d'un grup electrogen. Aquest grup electrogen consisteix en un motor de combustió interna que consumeix gas natural en cas de que s'hagi de posar en marxa, i el seu objectiu es proveïr d'electricitat als equips crítics del procés (sistemes de refrigeració, control, etc.) per tal d'evitar accidents a causa de la falta de subministrament elèctric amb la pèrdua del control del procès que això implicaria.

A EBenz, el subministrament elèctric del que es disposa a peu de parcel·la consisteix en una connexió des d'una línia de mitja tensió, específicament de 20 kV. Així doncs, cal disposar a la planta d'una estació transformadora que permeti convertir el voltatge al necessari per l'alimentació a les diferents àrees i equips de la planta que ho requereixin. A la Taula 1.23 s'aprecia que el consum total anual de la planta és proper als 3 000 000 kW. A aquest valor s'ha d'aplicar un factor de correcció, ja que els equips no consumeixen el 100% de la seva potència, sino que s'aplica un factor del 60%. Així doncs, el consum total anual a EBenz serà d'aproximadament 1 800 000 kW. Es poden observar els valors amb exactitud a la Taula 1.23.

Taula 1.23: *Consum elèctric anual de cada equip.*

Equip	Consum anual (kWh)
Agitadors	110.006,40
Bombes	1.541.568,00
Compressor d'aire comprimit	252.000
Descalcificador	3.150
Torre de refrigeració	739.200
Oficines	264.592,44
Total	2.910.516,84

Pel que fa a l'estació transformadora, es determina la potència elèctrica consumida dels equips o parts de la planta que requereixen l'aliment elèctric a un voltatge determinat, es calcula el total i es sobredimensiona com s'especifica al Capítol 11: Manual de Càlcul. A més, es determina la potència necessària a subministrar per part de l'estació transformadora en kVA, com es pot observar a la Taula 1.24.

Taula 1.24: *Potència elèctrica consumida dels diferents equips i àrees d'EBenz*

Equip	Potència (kW)
Agitadors	13,09
Bombes	183,52
Compressors	30,000
Descalcificadors	9,000
Torre de refrigeració	88,000
Oficines	32,36
Total	355,97
Total amb sobredimensionament	409,37

Així doncs, la potència que ha de subministrar l'estació transformadora en kVA és de 511.71 kVA. Per tant, el transformador de marca ORMZABAL model transforma.smart que té una potència de fins 630 kVA. Aquest marge pot resultar útil en cas de que es vulgui realitzar ampliacions a la planta i, fins i tot, habilitar un espai on colocar una altra estació transformadora en cas de que els requeriments operacionals eventualment ho demanin.

1.4.6 Oli tèrmic

La caldera és l'equip encarregat de subministrar energia calorífica als fluids calefactors per a que puguin aportar aquesta calor als equips necessaris. A EBenz s'utilitza una caldera d'oli tèrmic degut a les característiques del procés i dels equips. Aquesta subministrarà el cabal d'oli tèrmic necessari als RB - 401 , RB – 402, i RB - 403.

L'oli tèrmic necessari, el qual circularà a través d'un circuit tancat, inicialment es necessitarà aproximadament 13.500 kg d'oli tèrmic per alimentar al circuit tancat per tal de complir el caudal de circulació nececessari segons l'equip al que s'hagi de proveïr amb aquest servei. A més, aquest circuit tancat d'oli tèrmic s'ha de renovar cada 2 anys degut a la degradació de les propietats de l'oli tèrmic.

A EBenz, la temperatura requerida de l'oli tèrmic per satisfer les necessitats de tots els equips es troba en gairebé tots a 370ºC, per tant es requereix una caldera bescanvïi tot el calor alliberat durant el procés. Aquest corrent principal prové de la caldera d'oli tèrmic i es divideixen en diferents corrents per tal de satisfer les necessitats del equips.

El equips els quals s'han d'esclafar mitjançant oli tèrmic tenen les següents necessitats mostrades en la Taula 1.25.

Taula 1.25: *Requeriments d'oli tèrmic dels equips*

Equip	Calor bescanviat (kW)	Oli tèrmic (kg/h)
RB-401	1.739,80	19.175,76
RB-402	14.242,90	192.868,20
RB-403	7.816,40	176.553
Total	23.799,10	388.596,96

Com es pot observar a la Taula 1.25, es necessita un cabal d'oli tèrmic d'aproximadament 390.000 kg/h. És per això que s'ha escollit un proveïdor que té un model que satisfa les nostres necessitats, com és el cas del proveïdor HTT, amb el model WTÖ. Comentar que és un circuit tancat que requerirà d'una primera càrrega i es canviarà quan així ho indiqui el proveïdor.

1.4.7 Aire comprimit

L'aire comprimit és un servei de planta indispensable, el qual s'utilitza com a actuador de les vàlvules de control per fer arribar les senyals pneumàtiques a aquestes. L'aire comprimit es produirà fent passar l'aire a través d'un compressor, el qual elevarà la pressió d'aquest fins a 6 bars. L'aire comprimit arribarà a les vàlvules mitjançant canonades associades a l'àrea de serveis de planta.

Les vàlvules requereixen d'un mínim de 1,5 m^3/h i d'un màxim de 3 m^3/h d'aire comprimit per al seu funcionament òptim. Per lo tant, s'escull el cas més desfavorable i amb el número de vàlvules automàtiques que es te en la planta s'estima les necessitats d'aire comprimit de la planta.

Taula 1.26: Requeriments d'aire comprimit de les vàlvules

Nº total de vàlvules	Cabal màxim d'aire (m^3/h)	Cabal total d'aire (m^3/h)
92	3	276

Com es pot apreciar a la Taula 1.26 es requereix un cabal total d'aire comprimit de 276 m^3/h. Per tant, s'ha escollit com a proveïdor la marca CompAir i el model L29RS. Per obtindre més detalls sobre aquest compressor consultar el Capítol 2: Equips.

També, cal tenir en compte que l'aire que serà impulsat a través de la xarxa d'aire comprimit pot contindre impureses sòlides o líquides. Per tant, cal tractar aquest aire mitjançant assecadors i prefiltres per eliminar-ne la humitat i les micropartícules sòlides que pugui arrossegar. L'objectiu d'això és allargar la vida útil del compressor i de les vàlvules de control que reben l'aire comprimit com a actuador.

1.4.8 Nitrogen

El nitrogen s'utilitza a EBenz degut a que és un gas inert que és adequat per inertitzar atmosferes on s'emmagatzemen substàncies inflmables i així minimitzar el risc de creació d'una atmosfera explosiva.

La seva principal aplicació serà garantitzar un emmagatzemament segur dels reactius i dels productes mitjançant l'inertització d'aquests tancs, a més d'interitzar tots els equips després d'un rentat amb aigua durant la posada en marxa. S'ha establert que el procés d'inertitzar tots els equips durarà 8 hores. Així doncs, el caudal de nitrogen líquid a subministrar a tota la planta per inertitzar tots els equips serà per tant de 1.417,4 dm^3/h i, conseqüentment, es necessitaran en total 11.339,10 dm^3 de nitrogen líquid.

La gestió relacionada amb aquest tanc d'emmagatzemament de nitrogen líquid es delega a Linde, aquesta empresa s'encarregarà del seu disseny, instal·lació, subministrament i manteniment. Linde proveirà nitrogen líquid en els seus tancs del model Cryogenic Standard Tank 200.

1.5 Planificació temporal

Per dur a terme el projecte de la planta de producció d'etilbenzè a EBenz, es realitza la planificació de la construcció de la planta mitjançant la planificació temporal del mateix amb *OpenProj*. Així doncs, s'especifiquen les tasques a realitzar durant el projecte, la seva duració i la precedència de les mateixes, com es pot observar a la **Taula 1.27.** A més, s'ha realitzat un diagrama de Gantt per tal de representar gràficament les tasques a realitzar durant el projecte.

Taula 1.27: *Planificació temporal de la construcció d'EBenz*

nº de Tasca	Tasca	Duració (Dies)	Precedència
1	Enginyeria bàsica	60	-
2	Llicència d'obres i activitats	150	-
3	Enginyeria de detall	120	1
4	Demanda d'equps	120	3
5	Neteja del terreny	30	2
6	Excavacions i cimentació	60	5
7	Instal·lació de subministres	30	6
8	Vials i voreres	30	6
9	Aparcament	15	8
10	Edificació oficines i zona social	120	7
11	Edificació taller i laboratori	90	7
12	Garita de seguretat	5	7
13	Balsa contra incendis	30	7
14	Instal·lació d'equips	90	4,7
15	Calibratge d'equips	30	14
16	Instal·lació suports, escales, plataformes i baranes	30	14
17	Instal·lació de les canonades del procés	60	14
18	Connexió de les canonades de procés amb els equips	30	15,17
19	Instal·lació de les canonades de serveis	60	14
20	Connexió de canonades de serveis amb el procés	30	15,19
21	Instal·lació de l'instrumentació	60	15,17,19
22	Connexió de l'instrumentació amb els equips	30	21
23	Instal·lació sistema elèctric	60	10
24	Connexió elèctrica als equips	30	15,23
25	Prova d'equips	30	21,22
26	Pintura	30	25
27	Neteja	15	26

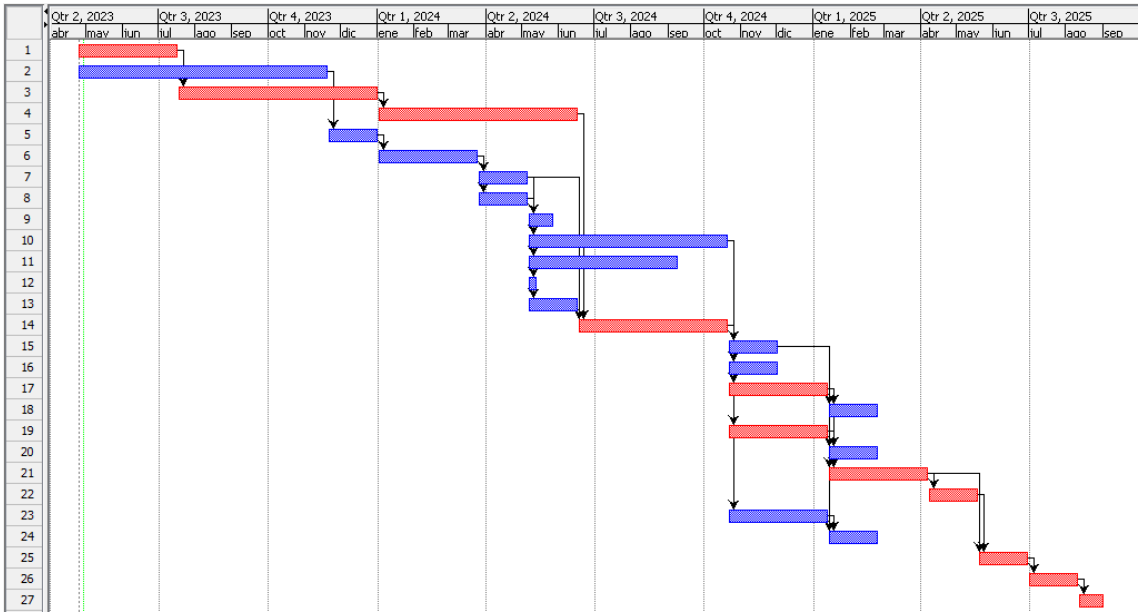


Figura 1.24: *Diagrama de Gantt de la planificació temporal de la construcció d'EBenz*

A la **Figura 1.24** es pot observar que les tasques en color vermell indiquen el camí crític, el qual estableix la duració del projecte. L'acceleració d'aquestes tasques afecten directament a la duració del projecte. En canvi, les tasques que no són critiques, la seva acceleració no afectaria a la duració total del projecte. Segons la planificació temporal realitzada, la duració total de la construcció de la planta de producció d'etilbenzè EBenz trigarà al voltant de 2 anys i 4 mesos.

1.6 Bibliografia

[1] Colaboradores de Wikipedia. (2023, 29 marzo). *Tarragona. Wikipedia, la enciclopedia libre.*

https://es.wikipedia.org/wiki/Tarragona

[2] Wikipedia.org. (2018). *Autopista del Mediterráneo - Wikipedia, la enciclopedia libre*.

https://es.wikipedia.org/wiki/Autopista_del_Mediterr%C3%A1neo

[3] C. (2006). *Autopista de Zaragoza a Barcelona y Tarragona*.Wikipedia.org.

https://es.wikipedia.org/wiki/Autopista_Zaragoza-Mediterr%C3%A1neo

[4] Pau, V. and Novials (2016). *Articles d'economia El tràfic marítim als ports de Barcelona i Tarragona l'any 2015*.

https://economia.gencat.cat/web/.content/70_economia_catalana/arxius/articles-economia/16_07_El-trafic-als-ports-de-Barcelona-i-Tarragona-lany-2015.pdf

[5] La Vanguardia. (2017). *La robusta salud de las principales rutas de El Prat y las que se esperan en 2017*.

https://www.lavanguardia.com/economia/20170116/413324191459/rutas-aeropuerto-el-prat-barcelona-2017.html

[6] E.Cobertera, (n.d.)-los suelos cultivados de la provincia de tarragona.

https://www.dipta.cat/RBIV/biblioteca/sueloscultivados/files/assets/common/downloads/sueloscultivadosdetarragona.pdf

[7] aguas.igme.es. (n.d.). *ACUIFERO DEL CAMPO DE TARRAGONA*.

https://aguas.igme.es/igme/publica/libros1_HR/libro68/lib68.htm

[8] www.icgc.cat. (n.d.). *Avaluació del rísc sísmic a Catalunya. Institut Cartogràfic i Geològic de Catalunya*.

https://www.icgc.cat/Administracio-i-empresa/Descarregues/Cartografia-geologica-i-geotematica/Mapes-geofisics-i-sismics/Avaluacio-del-risc-sismic-a-Catalunya

[9] Richard Turton. Richard C. Bailie. Wallace B. Whiting. Joseph A. Shaeiwitz. (2012). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. Fourth Edition.

[10] Vincent A. Welch, Kevin J. Fallon (2002). *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry – Ethylbenzene*. Sixth Edition.

[11] Weimin Yang, Zhendong Wang, Hongmin Sun, Bin Zhang (2016). *Advances in development and industrial applications of ethylbenzene processes*.

[12] Pau Pascual Colomina (2021). *Diseño y estudio económico de un proceso de producción de Etilbenceno utilizando ProMax.*

[13] Batyr Orazbayev, Dinara Kozhakhmetova, Ryszard Wójtowicz (2020). Modeling of a Catalytic Cracking in the Gasoline Production Installation with a Fuzzy Environment.

[14] Morris D. Argyle, Calvin H. Bartholomew (2015). Heterogeneous Catalyst Deactivation and Regeneration: A Review.

[15] Almela, A. F. R. (s. f.). *Etileno – Academia de Ciencias de la Región de Murcia*.

https://www.um.es/acc/etileno/#:~:text=El%20etileno%20es%20un%20compuesto,y%20a%20partir%20del%20gas%20natura

[16] *ICSC 0475 - ETILENO, PURO*. (s. f.).

https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_lang=es&p_card_id=0475&p_version=2

[17] Departamento de Salud y Servicios para Personas Mayores de New Jersey (2002). *Hoja informativa sobre substancias peligrosas. Etileno*.

https://nj.gov/health/eoh/rtkweb/documents/fs/0873sp.pdf

[18] *ICSC 0015 - BENZENE*. (s. f.).

https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0015&p_version=2&p_lang=en

[19] *ToxFAQsTM: Benceno (Benzene) | ToxFAQ | ATSDR*. (s. f.).

https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es_tfacts3.html#:~:text=El%20benceno%20produce%20alteraciones%20en,la%20probabilidad%20de%20contraer%20infecciones.

[20] *ICSC 0268 - ETILBENCENO*. (s. f.).

https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0268&p_version=2&p_lang=es

[21] *ToxFAQsTM: Etilbenceno (Ethylbenzene) | ToxFAQ | ATSDR*. (s. f.).

https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es_tfacts110.html

[22] *ICSC 0445 - DIETILBENCENO (Mezcla de isómeros)*. (s. f.).
https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0445&p_version=2&p_lang=es

[23] *ICSC 0078 - TOLUENO*. (s. f.).
https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0078&p_version=2&p_lang

=es#:~:ext=ICSC%200078%20%2D%20TOLUENO&text=Altamente%20inflamable.,producir%20chispas%20y%20NO%20fumar.

[24] *Tolueno (Toluene) | ToxFAQ | ATSDR*. (s. f.-b).

https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es_tfacts56.html#:~:text=obtener%20m%C3%A1s%20informaci%C3%B3n,%C2%BFQu%C3%A9%20es%20el%20tolueno%3F,al%20producir%20coque%20de%20carb%C3%B3n

.

[25] *Propileno y derivados del propileno: usos y propiedades* | Repsol (2021).

https://www.repsol.com/es/productos-y-servicios/quimica/productos/propileno/index.cshtml#:~:text=El%20propileno%20es%20un%20gas,(gas%20licuado%20del%20petr%C3%B3leo).%20https://nj.gov/health/eoh/rtkweb/documents/fs/1609sp.pdf

[26] *ICSC 0291 - METANO*. (s. f.).

https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0291&p_version=2&p_lang=es#:~:text=ICSC%200291%20%2D%20METANO&text=Extremadamente%20inflamable.,producir%20chispas%20y%20NO%20fumar.

[27] *Etano*. (s. f.). Oiltanking.

https://www.oiltanking.com/es/publicaciones/glosario/etano.html

[28] Praxair (2014). *Hoja de Datos de Seguridad de Producto de Praxair – Etano.*

https://www.linde.mx/-/media/corporate/praxair-mexico/documents/safety-data-sheets/etano-hds-p4592e-2009.pdf