



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA
CENTRO UNIVERSITARIO DE CIENCIAS EXACTAS E INGENIERÍAS
DIVISIÓN DE INGENIERÍAS
INGENIERÍA QUÍMICA
PROTOCOLO DEL PROYECTO (PLAN MODULAR)
Módulo de Avance del Proyecto IV

Alumno	Código	sección	Ingreso
Gaytán Galán Daniel Alejandro	213553459	D-03	16B
Mejía Hernández Judith Ahtziri	216785083	D-03	16B

Simulación del proceso de producción de acetona vía alcohol isopropílico en Aspen Plus con propuesta de un sistema de control para el reactor

Objetivos

Objetivos generales

1. Simular el proceso de producción de acetona por la vía del alcohol isopropilico mediante el simulador Aspen Plus 10.0 con propuesta de control de temperatura para el reactor.

Objetivos específicos

1. Simular el proceso de producción de acetona
 - a) Separador flash
 - b) Reactor
 - c) Intercambiadores de calor
 - d) Torre de absorción
 - e) Torres de destilación
2. Proponer un sistema de control para la temperatura del reactor mediante la temperatura de entrada de la chaqueta.
3. Analizar el impacto económico, social y ambiental de la producción de acetona.

Fundamentos

La acetona (C_3H_6O) o también conocido como dimetil cetona, 2-propanona es un compuesto químico muy versátil, se utiliza como materia prima para la producción de otros compuestos. La acetona tiene uso en un amplio campo de industrias. La Acetona se usa en la fabricación de plásticos, fibras y otros químicos además de usarse como solvente (Quiroz Valiente y Solano Mateo, 2014). Asimismo, es muy usado como componente de cosméticos y como quita esmalte para las uñas. En la industria farmacéutica es muy usado como disolvente para la elaboración de distintos fármacos.

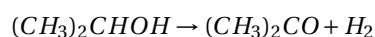
Como solvente, la acetona puede disolver muchos plásticos incluyendo botellas hechas de poliestireno, policarbonato y algunos tipos de polipropileno. Se caracteriza por ser uno de los disolventes orgánicos conocidos más usados, es inmiscible en agua, además es fácilmente biodegradable llegando a ser encontrada en la naturaleza en plantas, árboles e incluso en el cuerpo humano debido a

procesos de degradación de grasas (García Gómez, 2020). En el laboratorio este químico es usado como disolvente aprótico polar en una gran variedad de reacciones orgánicas. En la industria minera es usada ampliamente para el transporte y almacenamiento seguro de acetileno, los tanques que contiene un material poroso primero son llenados con acetona y posteriormente con acetileno que se disuelve en la acetona (Abdullah, Mohamed, y Ali, 2017). En la industria cosmética este producto es ampliamente usado y también está listado como componente en aditivos y envolturas alimenticias. Los dermatólogos la usan con alcohol en tratamientos de acné para desprender la piel muerta. También es usada como agente de secado debido a la facilidad con la que se mezcla en agua. Algo importante a considerar es que la acetona tiende a crear azeotropos con sustancias no polares como alifáticos.

Reacción

La producción de Acetona tiene múltiples formas de obtenerse: Vía cumeno, Oxidación de propeno, deshidrogenación de IPA, Oxidación del diisopropilbenceno, Ácido Acético y mediante acetileno

Se puede obtener acetona mediante la deshidrogenación catalítica de alcohol isopropílico vaporizado, calentado e introducido en un reactor 250-270 ° C (Acevedo, 2016). La reacción se lleva a cabo mediante la siguiente ecuación:



Para la reacción de oxidación del Alcohol Isopropílico se utiliza catalizadores metálicos de Cobre, aleaciones de Cobre y Plata; y óxidos metálicos de Cobre, aleaciones de Cobre y más fácil de regular que la deshidrogenación. La temperatura de la reacción varía en el rango de 200 y 800 (Quiroz Valiente y Solano Mateo, 2014). En la Figura 1 se presenta la secuencia del proceso en forma de un diagrama de bloques.

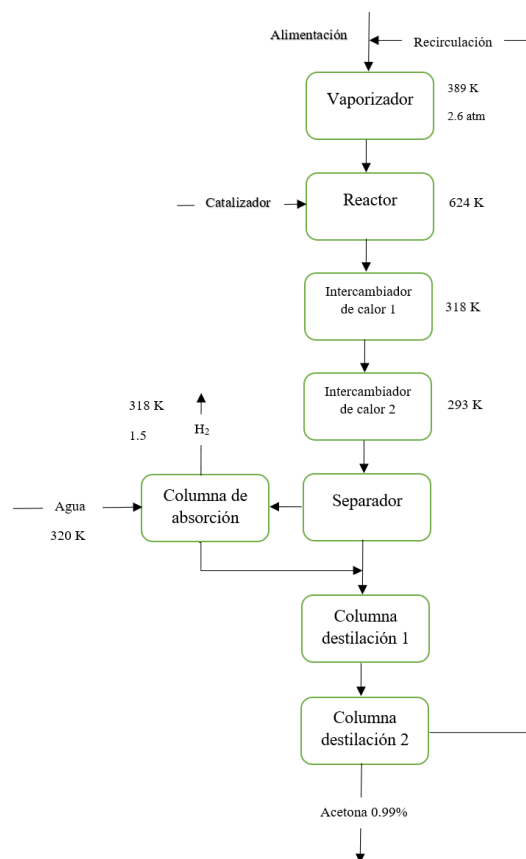


Figura 1: Diagrama de bloques del proceso

La principal ventaja de este proceso es que la acetona producida está libre de trazas de compuestos aromáticos, en particular benceno. Por esta razón la acetona producida a partir de alcohol isopropílico puede ser preferida por la industria farmacéutica, debido a las fuertes restricciones del uso de solventes.

Al comienzo del proceso, la alimentación que contiene alcohol isopropílico y agua, se mezcla con la corriente de reciclaje en el tambor de alimentación. Desde aquí, esta mezcla se envía al vaporizador, para cambiar la fase de la corriente como vapor. Después del vaporizador, la mezcla se calienta hasta la temperatura de reacción en el calentador.

Acetona, hidrógeno gas (H_2) se producen, y se descargan agua y alcohol isopropílico. La mezcla que son acetona, hidrógeno, agua y alcohol isopropílico se envían al enfriador y luego a un condensador. Después del condensador, la mezcla se envía al separador flash. Se obtiene hidrógeno, acetona, alcohol isopropílico y agua como producto superior. Este producto superior se envía a una

torre de absorción para eliminar el hidrógeno. El producto inferior del separador flash que se compone de acetona, agua y alcohol isopropílico se mezclan con el producto de fondo de la columna de absorción antes de la primera columna de destilación. En esta, la acetona se obtiene del producto superior con 99% en peso. La salida de la primera columna se envían a la segunda columna de destilación. Se envía el producto superior de la segunda columna para alimentar el tambor y el producto de fondo se desecha como agua residual (Luyben, 2010).

El la Figura 2 se muestra un diagrama de proceso que muestra la ruta que sigue a través de los distintos equipos para la producción de acetona.

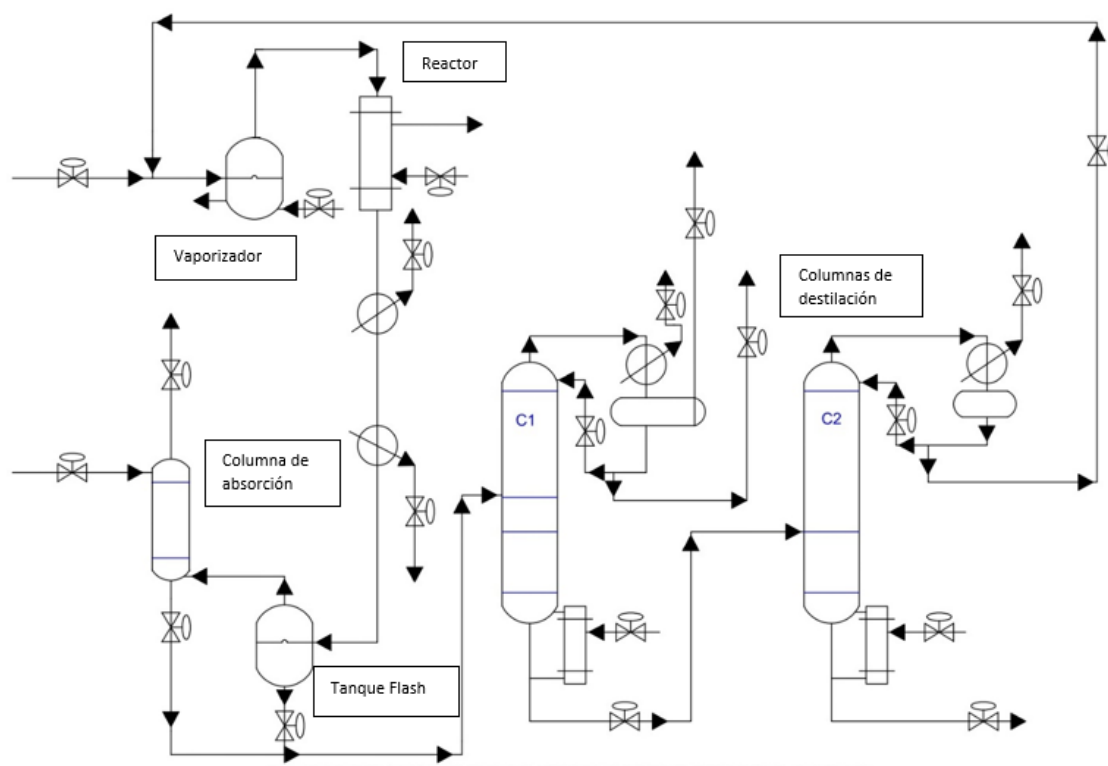
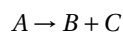


Figura 2: Diagrama del proceso.

Sistema de control

De las posibles opciones de control que existen dentro del sistema, se estudiaron las diversas posibilidades de los equipos de procesos y se toma la decisión de optar por la controlar la temperatura del reactor controlado la apertura de la válvula de la chaqueta.

Para alcanzar los objetivos planteados en cuanto a obtener propuesta de control es necesario tener en consideración el proceso dinámico del sistema. Para lograr el control automático de procesos se requiere del diseño e implementación de un sistema de control (C. A. Smith, Corripio, y Basurto, 2007). Se debe considerar un objetivo de control. En este trabajo se plantea como tal la temperatura del reactor . Se realizara mediante las ecuaciones descritas anteriormente. La reacción del reactor es:



Donde A es IPA, B es la acetona y C es H_2

Los balances de masa y energía son:

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A - \frac{F(C_{A0} - C_A)}{V} \quad (1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -r_A + \frac{F(C_{B0} - C_B)}{V} \quad (2)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = r_A + \frac{F(C_{C0} - C_C)}{V} \quad (3)$$

Para el balance energía se tiene que:

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{F_r(T_f - T_r)}{V_r} + \frac{-\Delta H_{rxn}}{\rho_r C_{pr}} k_0 \exp\left(\frac{-E}{RT_r}\right) C_A - \frac{UA(T_r - T_j)}{V_r \rho_r C_{pr}} \quad (4)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_j(T_{j0} - T_j)}{V_j} + \frac{UA(T_r - T_j)}{V_j \rho_j C_{pj}} \quad (5)$$

Donde:

C_A = Concentración de A	E = Energía de activación
C_B =Concentración de B	R = Constante de los gases ideales
C_C =Concentración de C	V_r = Volumen de reactor
C_{A0} =Concentración inicial de A	V_j = Volumen de la chaqueta
C_{B0} =Concentración inicial de B	ρ_r = Densidad del flujo de entrada al reactor
C_{C0} =Concentración inicial de C	ρ_j = Densidad del flujo de entrada a la chaqueta
U = Coeficiente global de transferencia de calor	C_{pr} = Capacidad calorífica del flujo de entrada al reactor
A = Área del intercambiador	C_{pj} = Capacidad calorífica del flujo de entrada a la chaqueta
T_f = Temperatura de entrada	k_0 = Constante de reacción cinética
T_j = Temperatura de la chaqueta	$\Delta H_{rxn} = \Delta H$ de reacción
F_r = Flujo de entrada del reactor	
F_j = Flujo de entrada de la chaqueta	
T_r = Temperatura del reactor	

Plan de trabajo

En cuanto al objetivo de simulación del proceso es necesario contar con el software de Aspen plus 10.0 además datos importantes como el modelado adecuado para satisfacer los parámetros necesarios que exige el simulador. Se necesita parámetros como flujos de entrada, temperatura de operación, presión de operación, composición de las corrientes de entrada y de salida además el modelo termodinámico. Los equipos cuya información es necesaria son:

1. Separador flash
2. Reactor
3. Intercambiadores de calor
4. Torre de absorción
5. Torres de destilación

Los cuales los podemos encontrar en los distintas referencias de este trabajo.

Para cumplir el objetivo de simular el proceso es necesario iniciar un nuevo proyecto en blanco en Aspen 10.0, ingresar los componentes que se utilizaran en el desarrollo de la simulación, en este caso serán necesarios Alcohol isopropílico (C_3H_8O), acetona (C_3H_6O), hidrógeno (H_2) y agua

(H_2O), los cuales se ingresaran en el área de *components* de la izquierda superior, además se podrá añadir un nombre de reconocimiento de cada componente en este trabajo para dar seguimiento a la simulación se dará el ID de *IPA*, *ACETONE*, *WATER* e *HYDROGEN*, tal como se muestra en la *Figura 3*.

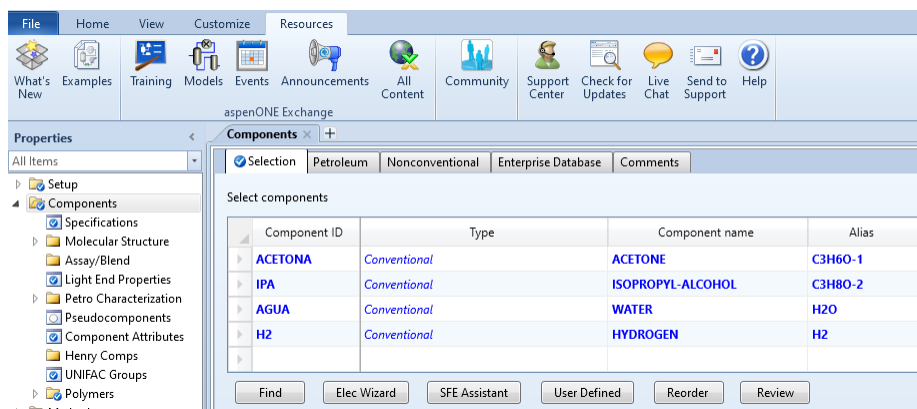


Figura 3: Vista de Aspen Plus donde se introducen los componentes del proceso.

El siguiente paso es seleccionar el método con el que se va a trabajar, según la literatura el método idóneo es UNIQUAC (Luyben, 2010). El método anterior toma en cuenta el tamaño molecular y las diferencias de forma además de un termino residual que toma en cuenta las interacciones moleculares (J. M. Smith, Van Ness, y Abbott, 2007), por lo tanto se especifica en la izquierda superior en el área de *Methods* se selecciona UNIQUAC como en la *Figura 4*

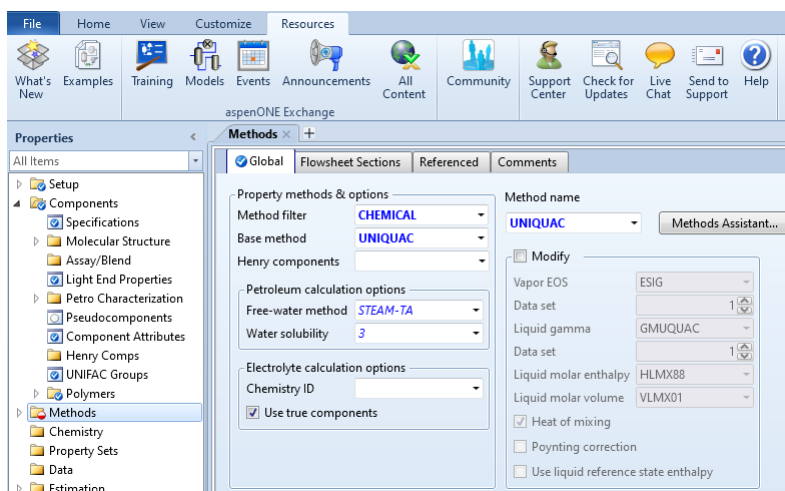


Figura 4: Vista de Aspen Plus donde se muestra la selección del modelo termodinámico adecuado al proceso. Aquí se elige el modelo termodinámico UNIQUAC.

El área para para insertar los reactores, a la izquierda inferior en el área *simulation* en el cual podemos escoger entre diferentes tipos como RCSTR, Rplug, RBatch entre otros (ver *Figura 5*).

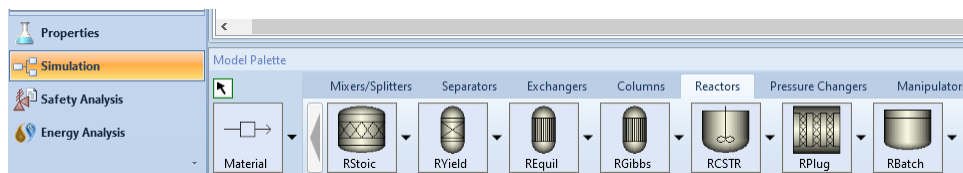


Figura 5: Vista de Aspen Plus para la selección del reactor adecuado al proceso.

Para agregar la reacción en la sección de *Reactions* en la cual agregaremos la reacción en ambos sentidos por ser reversible

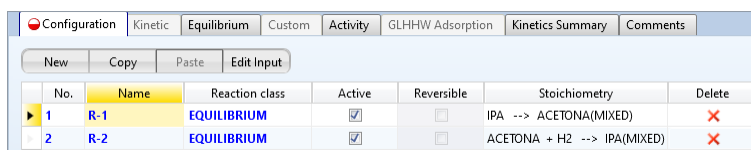


Figura 6: Vista de Aspen Plus para la selección de parámetros cinéticos. Aquí seleccionamos si nuestra reacción es reversible o irreversible.

Para agregar las columnas de destilación así como en el reactor, en la parte inferior donde están las operaciones unitarias (ver Figura 5) se selecciona la pestaña de *Columns* las columnas de destilación y se llenan los datos necesarios como lo es la presión de operación que la literatura marca de 1 atm, la relación de reflujo que es de 2.78 y las distintas etapas necesarias así como la etapa en la que se alimenta. En el proceso de Turton la primera columna tiene 67 etapas y se alimenta en la 54, para la segunda la columna tiene un total de 20 y se alimenta en la etapa 16 (Luyben, 2010).

Desarrollo

Desarrollo de la simulación

Para simular el proceso de producción de acetona vía alcohol isopropílico se propone una alimentación del 50% respecto a la que una Turton et al en su proceso, así tenemos una alimentación de 25.98 kmol/h y fracciones mol de 0.67 IPA y 0.33 agua, a esta corriente (ALIM) se le une la corriente de circulación que sale por la parte de arriba de la segunda torre de destilación (DSTL-2) la cual contiene IPA y agua. Una vez que se han unido estas dos corrientes en un mezclador, la corriente resultante (S2) se alimenta al vaporizador (VAP) para pasar de una fase líquida a gas donde este opera 389 K y 2.6 atm. Después, esta corriente se alimenta al reactor donde este opera a 2atm y 636 K. Una vez que sale del reactor, la corriente pasa por dos intercambiadores de calor, uno que opera a 318 K y el otro a 293 K, ambos a 1 atm de presión. Ya que se enfría la corriente, esta se alimenta a un tanque flash (FLASH) que opera a 1.5 atm y 293 K, de este sale una corriente de hidrógeno por la parte de arriba la cual se conecta a una torre de absorción (ABSOR), además a esta torre se alimenta una corriente de 10 kmol/h de agua. La corriente que sale por el fondo de la torre de absorción y el tanque flash, se mezclan y alimentan a la primer torre de destilación (DSTL-1), esta torre consta de 32 etapas (las cuales se determinaron previamente en una simulación con torres DSTWU), se alimenta en la etapa 17, opera a 1atm y tiene un condensador parcial-líquido-vapor con una relación de reflujo de 2.8 y una relación de destilado a alimentación de 0.45. La corriente que sale por la parte de arriba de la columna DSTL-1 (14) es la de mayor importancia ya que es la que contiene la acetona. La corriente que sale por el fondo de la columna DSTL-1 se alimenta a una segunda columna de destilación que consta de 3 etapas, alimentación en la etapa 2, condensador total, relación de reflujo de 0.845 y una relación de destilado a alimentación de 0.128 a 1 atm. La Figura 7 muestra el diagrama general del proceso simulado en Aspen Plus especificando los equipos y corrientes del proceso.

Tabla 1: Add caption

	Feb	Mar					Abr					May					Jun				
	26	5	12	19	26	2	9	16	23	30	7	14	21	28	4	11	18	25			
Título																					
Objetivos	Generales																				
	Específicos																				
Fundamentos	Descripción del proceso																				
	Rutas de reacción																				
	Diagrama de bloques																				
	Propuesta de control																				
Viabilidad																					
Estrategias																					
Cronograma																					
	Flash																				
	Reactor																				
Simulación	Intercambiador de calor																				
	Torres de absorción																				
	Torres de destilación																				
Resultados																					
Viabilidad sustentable																					
Conclusiones																					
Presentación																					

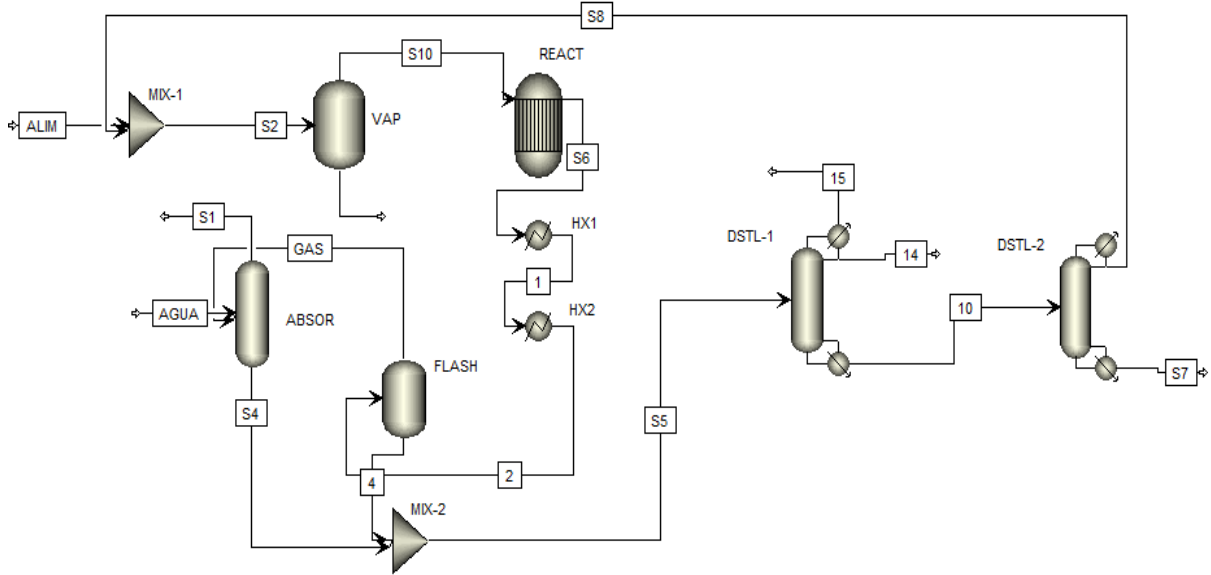


Figura 7: Diagrama general del proceso simulado en Aspen Plus.

Desarrollo del sistema de control

Para el sistema de control es necesario obtener las funciones transferencia a partir de las ecuaciones de balance de masa del reactor además de los valores en estado estacionario e iniciales.

Debido a que solo nos interesa la temperatura del flujo de entrada, nos centraremos en los balances para A , T_r y T_j . Una vez que se tienen las ecuaciones se procede a linealizar las mismas.

Se definen las variables de desviación:

$$\bar{C}_A = C_A - C_{As}, \quad \bar{T} = T - T_s, \quad \bar{T}_j = T_j - T_{js} \text{ y } \bar{F}_j = F_j - F_{js}$$

Los valores de nuestro sistema son:

$$F_{rs} = 0.0972 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$F_j = 0.01 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$k_0 = 3.51 \times 10^5 \text{ l/s}$$

$$UA = 1668431 \text{ J/s}$$

$$E = 72380 \text{ J/mol K}$$

$$C_{pr} = 2500 \text{ J/Kg K}$$

$$C_j = 1700 \text{ J/Kg K}$$

$$V_r = 3 \text{ m}^3$$

$$V_j = 1 \text{ m}^3$$

$$\Delta H_{rxn} = 70000 \text{ J/mol}$$

$$\rho_r = 785 \text{ Kg/m}^3$$

$$\rho_j = 970 \text{ Kg/m}^3$$

$$R = 8.314 \text{ J/mol K}$$

$$T_s = 624 \text{ K}$$

$$T_{j0} = 427 \text{ K}$$

$$T_j = 327 \text{ K}$$

$$C_{A0} = 526 \text{ mol/m}^3$$

$$C_{As} = 50.3168 \text{ mol/m}^3$$

Sustituyendo los valores en las ecuaciones 1, 4 y 5, los balances quedan de la siguiente manera:

$$\frac{\partial(1)}{\partial C_A} = -\frac{F_r}{V_r} \bar{C}_A = -0.0324 \bar{C}_A$$

$$\frac{\partial(4)}{\partial C_A} = -\frac{\Delta H_{rxn} k_0 e^{-\frac{E}{RT_{rs}}}}{C_{pr} \rho_r} \bar{C}_A = -0.0109 \bar{C}_A$$

$$\frac{\partial(5)}{\partial C_A} = 0$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(1)}{\partial T_r} &= -\frac{Ek_0 e^{-\frac{E}{RT_{rs}}}}{RT_{rs}^2} \bar{T}_r = -0.0068 \bar{T}_r \\
\frac{\partial(4)}{\partial T_r} &= -\frac{F_r}{V_r} - \frac{UA}{C_{pr} V_r \rho_r} - \frac{C_{As} \Delta H_{rxn} Ek_0 e^{-\frac{E}{RT_{rs}}}}{C_{pr} RT_{rs}^2 \rho_r} \bar{T}_r = -0.3281 \bar{T}_r \\
\frac{\partial(5)}{\partial T_r} &= \frac{UA}{C_{pj} V_j \rho_j} \bar{T}_r = 1.0118 \bar{T}_r \\
\frac{\partial(1)}{\partial T_j} &= 0 \\
\frac{\partial(4)}{\partial T_j} &= \frac{UA}{C_{pr} V_r \rho_r} \bar{T}_j = 0.2834 \bar{T}_j \\
\frac{\partial(5)}{\partial T_j} &= -\frac{F_j}{V_j} - \frac{UA}{C_{pj} V_j \rho_j} \bar{T}_j = -1.0218 \bar{T}_j \\
\frac{\partial(1)}{\partial F_j} &= 0 \\
\frac{\partial(4)}{\partial F_j} &= 0 \\
\frac{\partial(5)}{\partial F_j} &= -\frac{T_j - T_{j0}}{V_j} \bar{F}_j = 88 \bar{F}_j
\end{aligned}$$

En forma de matriz de tiene:

$$\begin{bmatrix} s + 0.0324 & 0.0068 & 0 \\ 0.0109 & s + 0.3281 & -0.2834 \\ 0 & -1.0118 & s + 1.0218 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 88 \end{bmatrix}$$

Realizando las transformadas de Laplace correspondiente se tiene que la funciones transferencia es:

$$G(s) = \frac{88s^2 + 31.72s + 0.929}{s^3 + 1.382s^2 + 0.09217s + 0.001495}$$

Para proponer el controlador se va a utilizar el método de Cohen-Coon por ser un lazo abierto y además se agrega un escalón unitario para tener un delay, por lo tanto, para calcular los parámetros de los diferentes controladores se utilizan las ecuaciones que se muestran en la *Tabla 2*.

Tabla 2: Ecuaciones para el calculo de los valores de distintos tipos de controladores por el método de Cohen-Coon

Controlador	K_c	τ_D	τ_I
P	$\frac{\tau}{K t_d} \left(1 + \frac{t_d}{3\tau} \right)$	-	-
PI	$\frac{\tau}{K t_d} \left(0.9 + \frac{t_d}{12\tau} \right)$	$t_d \frac{30+3(t_d/\tau)}{9+20(t_d/\tau)}$	
PID	$\frac{\tau}{K t_d} \left(4/3 + \frac{t_d}{4\tau} \right)$	$t_d \frac{32+6(t_d/\tau)}{13+8(t_d/\tau)}$	$t_d \frac{4}{11+2(t_d/\tau)}$

donde t_d es el delay, K se calcula mediante: B/S donde S es la pendiente a la tangente de la curva de reacciona lazo abierto y B y el escalón en señal de control, A es la magnitud del escalón.

Desarrollo de la viabilidad sustentable

En cuanto al objetivo de analizar el impacto económico, social y ambiental de la producción de acetona es necesario conocer las normas que regulan las concentraciones de acetona en distintos

ambientes, descargas industriales en agua, suelo y aire. Así como los aspectos que alteren el entorno social de los alrededores de la ubicación de la planta. El cumplimiento de los objetivos para este proyecto es una serie de pasos para alcanzar la meta principal que es un análisis de la producción de acetona, tomando en cuenta que no solo este proceso afecta al sitio donde se lleva a cabo la producción, si no que afecta de diversas maneras a su entorno y a una parte de la sociedad

Viabilidad sustentable económica

Importaciones y exportaciones de acetona

Las importaciones realizadas en los últimos 5 años vienen principalmente de Estados Unidos, Taiwán y Bélgica. En la *Figura 8* se muestran los respectivos porcentajes.



Figura 8: Origen importaciones acetona

Del 2015 al 2020 el valor de las importaciones a México asciende a \$ 351,868,389 USD y las exportaciones a \$ 13,166,844, cantidades que indican que las importaciones han sido mayores y esto indica que hay un amplio campo de aprovechamiento en la producción de acetona nacional para crecer en el mercado internacional.

Capacidad de la planta

En México la producción de acetona cae en la categoría de producción de petroquímicos intermedios. El último dato que se encontró registrado por el INEGI de la capacidad instalada para producción de acetona fue en 2007 de 24,113 ton/año (INEGI, 2009)

Con base al estudio de mercado y tomando en cuenta las tendencias de consumo se estima que la capacidad de la planta sería de 6,660.2 ton/año de acetona, cubriendo, un 18.5% de la producción anual de acetona estimada en el 2020 según las tendencias de demanda y crecimiento de este producto.

Se establece que el tiempo de operación anual es de 300 días al año y operando un proceso continuo de 24 horas al día, se alcanzará una producción de 22.2 toneladas al día, que será la capacidad nominal de los equipos que se utilizaran en la planta.

La capacidad se establece basándose en plantas ya existentes productoras de acetona, tomando en cuenta que una sobreproducción nacional puede causar pérdidas económicas.

Costos de los equipos

Para calcular la sustentabilidad económica del proyecto utilizamos el **análisis económico de Aspen** el cual nos calcula los costos de los equipos, servicios, instalación y operación del proyecto,

estos se muestran en las Tablas 9, 10, 11, 12 y 13 en la sección de resultados, cabe destacar que la acetona se vende aproximadamente en 2.00 USD por kg.

Viabilidad sustentable ambiental

Aguas residuales

La corriente que sale por el fondo de la segunda torre de destilación es la única que contiene "agua residual", sin embargo, gracias a la tecnología seleccionada y al elevado porcentaje de rendimiento donde se obtiene un producto de alta pureza, esta corriente tiene una fracción mol de 0.9961 agua, por lo tanto, con un adecuado sistema es posible recircularla a nuestro proceso.

Residuos atmosféricos

Los principales contaminantes atmosféricos que se pueden producir en planta son:

Emisiones directas

Son producidas en el reactor donde se producen vapores orgánicos volátiles cetónicos o alcohólicos, estos pueden ser tratados en una columna de desorción de gases donde se recupere materia prima o producto principal emitiendo gases al ambiente con el límite máximo permisible.

Emisiones indirectas

Son las que produce la combustión de gas natural, es un combustible más limpio que los combustibles derivados de petróleo. Una solución es alimentar aire en exceso para evitar las combustiones incompletas que emiten compuestos nitrogenados, sulfúricos, etc.

Viabilidad sustentable social

La acetona es un solvente esencial para la industria cosmética y del cuidado personal. Se espera que el rápido crecimiento de la industria del cuidado personal en los países en desarrollo impulse la demanda del mercado de acetona. Se prevé que la industria mundial del cuidado personal crezca con una tasa compuesta anual de casi el 5,78% en los próximos años. Las economías emergentes, como los países de Asia-Pacífico y América Latina, tienen un enorme potencial de crecimiento para la industria del cuidado personal.

Resultados

Los parámetros de operación de las torres de destilación a partir de su simulación en columnas DSTWU se muestran en las Tablas 3 y 4.

Tabla 3: Parámetros de DSTWU-1

DSTWU-1		Unidades
Relación mínima de reflujo	1.9446	
Relación de reflujo real	2.7800	
Número mínimo de etapas	18.2820	
Número de etapas reales	31.8299	
Etapas de alimentación	16.5290	
Número de etapas reales por encima de la alimentación	15.5290	
Requerimiento del hervidor	129264.7000	cal/s
Requerimiento del condensador	112396.9630	cal/s
Temperatura del destilado	47.2418	C
Temperatura inferior	81.3112	C
Fracción para alimentación de destilado	0.4468	

Tabla 4: Parámetros de DSTWU-2

DSTWU-2		Unidades
Relación mínima de reflujo	0.1209	
Relación de reflujo real	0.8450	
Número mínimo de etapas	1.7836	
Número de etapas reales	2.9400	
Etapas de alimentación	2.2000	
Número de etapas reales por encima de la alimentación	1.9448	
Requerimiento del hervidor	14712.0420	cal/s
Requerimiento del condensador	13522.2045	cal/s
Temperatura del destilado	76.9745	C
Temperatura inferior	94.9141	C
Fracción para alimentación de destilado	0.1478	

Una vez realizada la simulación, se obtuvieron los valores que se muestran en las Tablas 5, 6 y 7 para cada una de las corrientes y el gráfico que se muestra en la *Figura 9*. Este gráfico nos muestra el número de etapas en la columna DSTL-1 y la fracción mol de acetona, agua, IPA e hidrógeno. La línea en color rosa nos representa la relación de fracción mol líquida de acetona respecto al número de etapa, es por ello que en la etapa número uno se tiene una fracción mol de aproximadamente 0.99 de acetona, ya que es por la parte superior de nuestra columna por donde sale nuestra corriente de interés que es la acetona. Conforme avanza el número de etapas esta línea va hacia bajo hasta llegar a cero, esto se debe a que no hay pérdida de acetona en el fondo de nuestra columna. Por el contrario, la corriente que sale por el fondo y conecta a nuestra columna de destilación DSTL-2 es 0.946 fracción mol de agua y 0.054 fracción mol de IPA. La segunda columna de destilación nos permite recuperar el IPA por la parte de arriba de nuestra columna la cual es recirculada al inicio de nuestro proceso, mientras que en el fondo se obtiene una fracción mol de 0.996 de agua.

Tabla 5: Tabla de resultados de las corrientes del proceso.

Reporte de corrientes						
Descripción	Unidades	1	2	4	10	14
Proviene		HX1	HX2	FLASH	DSTL-1	DSTL-1
Hacia		HX2	FLASH	MIX-2	DSTL-2	
Fase				Liquido	Liquido	Liquido
Temperatura	K	318	293	293	356.2272693	320.39
Presión	atm	1	1	1.5	1	1
Densidad	gm/cc	0.0014	0.0025	0.8206	0.8955	0.7622
Flujo molar	kmol/hr	45.8038	45.8038	25.8715	19.7348	16.1244
WATER	kmol/hr	10.1073	10.1073	9.9230	18.6759	0.1593
IPA	kmol/hr	1.1010	1.1010	1.0597	1.0589	0.0376
ACETONE	kmol/hr	17.2977	17.2977	14.8835	0	15.9268
HYDROGEN	kmol/hr	17.2977	17.2977	0.0054	0	0.0007
Frac mol						
WATER		0.2207	0.2207	0.3836	0.9463	0.0099
IPA		0.0240	0.0240	0.0410	0.0537	0.0023
ACETONE		0.3776	0.3776	0.5753	0	0.9877
HYDROGEN		0.3776	0.3776	0.0002	0	0
m másico	kg/hr	1287.7751	1287.7751	1106.8919	400.0852	930.1604
WATER	kg/hr	182.0861	182.0861	178.7664	336.4521	2.8700
IPA	kg/hr	66.1665	66.1665	63.6829	63.6330	2.2572
ACETONE	kg/hr	1004.6523	1004.6523	864.4317	0.0001	925.0318
HYDROGEN	kg/hr	34.8701	34.8701	0.0108	0	0.0013
Frac masa						
WATER		0.1414	0.1414	0.1615	0.8410	0.0031
IPA		0.0514	0.0514	0.0575	0.1590	0.0024
ACETONE		0.7801	0.7801	0.7810	0	0.9945
HYDROGEN		0.0271	0.0271	0	0	0
Q	l/min	15246.244	8637.2997	22.4819	7.4461	20.3397

Tabla 6: Continuación Tabla 3

heightDescripción	15	AGUA	ALIM	GAS	S1	S2
Proviene	DSTL-1			FLASH	ABSOR	MIX-1
Hacia		ABSOR	MIX-1	ABSOR		VAP
Fase	Vapor	Liquido	Liquido	Vapor	Vapor	Liquid
Temperatura	320.39	320	320	293	318.7346	322.5447
Presión	1	1.5	1	1.5	1.5	0.9869
Densidad	0.0016	0.9726	0.7879	0.0006	0.0004	0.7874
Flujo molar	0.0223	10	25.9800	19.9322	19.9242	28.5061
WATER	0.0001	10	8.5734	0.1843	1.2731	10.1073
IPA	0	0	17.4066	0.0413	0.0047	18.3987
ACETONE	0.0161	0	0	2.4143	1.3555	1.36E-06
HYDROGEN	0.0060	0	0	17.2924	17.2910	0
Frac mol						
WATER	0.0055	1	0.3300	0.0092	0.0639	0.3546
IPA	0.0009	0	0.6700	0.0021	0.0002	0.6454
ACETONE	0.7219	0	0	0.1211	0.0680	4.79E-08
HYDROGEN	0.2717	0	0	0.8676	0.8678	0
m másico	0.9492	180.1528	1200.5178	180.8833	136.7977	1287.7751
WATER	0.0022	180.1528	154.4522	3.3197	22.9345	182.0861
IPA	0.0012	0	1046.0656	2.4836	0.2805	1105.6889
ACETONE	0.9335	0	0	140.2206	78.7261	7.93E-05
HYDROGEN	0.0122	0	0	34.8593	34.8566	0
Frac masa						
WATER	0.0023	1	0.1287	0.0184	0.1677	0.1414
IPA	0.0013	0	0.8713	0.0137	0.0021	0.8586
ACETONE	0.9835	0	0	0.7752	0.5755	6.16E-08
HYDROGEN	0.0128	0	0	0.1927	0.2548	0
Q	9.7558	3.0871	25.3945	5324.6572	5789.9982	27.2580

Tabla 7: Continuación Tabla 3

Descripción	S4	S5	S7	S8	S10
Proviene	ABSOR	MIX-2	DSTL-2	DSTL-2	VAP
Hacia	MIX-2	DSTL-1		MIX-1	REACT
Fase	Liquido		Liquido	Liquido	Vapor
Temperatura	303.7686	299.3965	369.6689	352.9200	389
Presión	1.5	1.5	0.9869	0.9869	2.6
Densidad	0.9178	0.8275	0.9185	0.7835	0.0037
Flujo molar	10.0080	35.8814	17.2087	2.5261	28.5061
WATER	8.9112	18.8354	17.1420	1.5339	10.1073
IPA	0.0367	1.0964	0.0667	0.9921	18.3987
ACETONE	1.0588	15.9429	1.16E-07	1.36E-06	1.36E-06
HYDROGEN	0.0014	0.0067	0	0	0
Frac mol					
WATER	0.8904	0.5249	0.9961	0.6072	0.3546
IPA	0.0037	0.0306	0.0039	0.3928	0.6454
ACETONE	0.1058	0.4443	6.76E-09	5.40E-07	4.79E-08
HYDROGEN	0.0001	0.0002	0	0	0
\dot{m} másico	224.2384	1331.1947	312.8279	87.2573	1287.7751
WATER	160.5380	339.3243	308.8182	27.6339	182.0861
IPA	2.2031	65.8914	4.0097	59.6232	1105.6889
ACETONE	61.4945	925.9654	6.75E-06	7.93E-05	7.93E-05
HYDROGEN	0.0027	0.0135	0	0	0
Frac masa					
WATER	0.7159	0.2549	0.9872	0.3167	0.1414
IPA	0.0098	0.0495	0.0128	0.6833	0.8586
ACETONE	0.2742	0.6956	2.16E-08	9.08E-07	6.16E-08
HYDROGEN	1.22E-05	1.02E-05	0	0	0
\dot{Q}	4.0721	26.8117	5.6762	1.8561	5832.7416

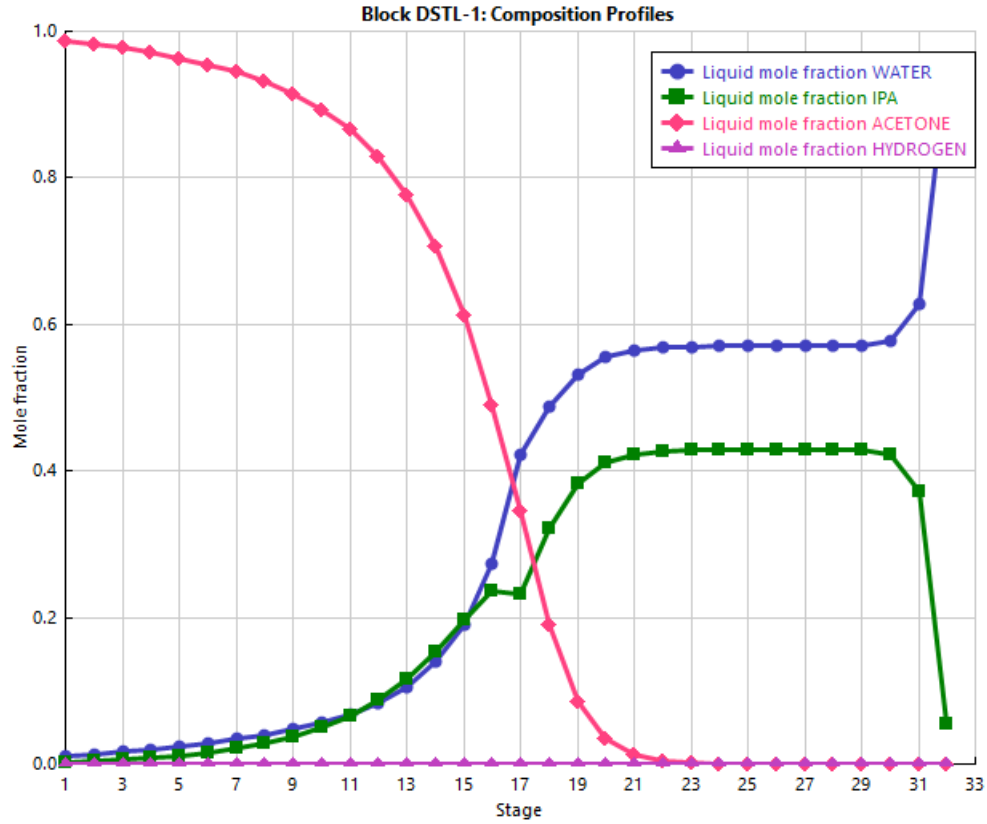


Figura 9: Etapas vs Fracción mol de la acetona, agua, IPA e hidrógeno.

Para proponer nuestro sistema de control en el reactor mediante la relación de la temperatura del reactor y la temperatura de la entrada de la chaqueta, se determinó que la entrada manipulable es la temperatura de la chaqueta T_j . En este caso como lo indica el ΔH_{rxn} positivo, la reacción es endotérmica, por lo tanto es necesario calentar el reactor para llevarlo a la temperatura deseada. Con el balance de energía del reactor se logró determinar la función de transferencia de nuestro proceso y mediante el método de Cohen-Coon; ya que teníamos una función de transferencia a lazo abierto, se logró observar la estabilidad de nuestro reactor haciendo uso del software MATLAB como se muestra en la Figura 10.

Tabla 8: Valores para distintos tipos de controladores

Controlador	K_c	τ_D	τ_I
P	0.0064	-	-
PI	0.0016	1.5023	-
PID	0.0048	7.5045	0.0032

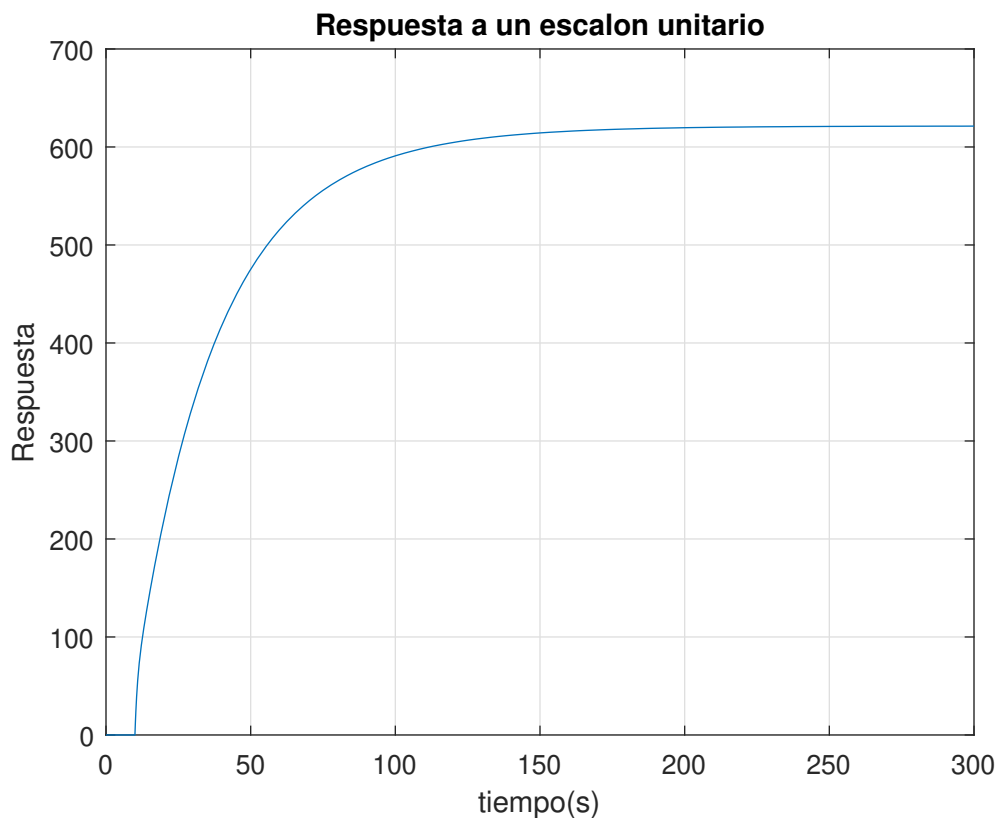


Figura 10: Respuesta del sistema ante un escalón unitario

Para determinar la viabilidad económica del proyecto se tomó en cuenta el costo de los equipos, su instalación, servicios, mano de obra operativa y de mantenimiento que nos ofrece el análisis económico de Aspen que se muestra en las Tablas 9, 10, 11, 12 y 13, por nuestra parte determinamos el costo total de la materia prima y con base en el análisis de mercado se determinaron las ventas totales del producto, una vez determinada la tasa de retorno TIR se obtiene una tasa positiva lo cual indica que hemos tenido unos beneficios mayores a la inversión realizada y por tanto hemos obtenido ganancias.

Tabla 9: Costo de equipos e instalación

Equipo	Costo (USD)	Costo de instalación (USD)
Vaporizador	15,600.00	103,100.00
Reactor	100,000.00	250,000.00
Enfriador	9,900.00	99,600.00
Condensador	10,000.00	66,500.00
Separador flash	15,600.00	96,000.00
Columna de absorción	41,300.00	169,500
Columna de destilación 1	233,200.00	652,600.00
Columna de destilación 2	56,900.00	382,400.00
Total	482,500.00	1,819,700.00

Tabla 10: Servicios

Nombre	Fluido	Velocidad	Unidades de velocidad	Costo por hora (USD/H)
Electricidad		53.532	KW	4.14873
Agua de enfriamiento	Agua	0.019092	MMGAL/H	2.29104
Refrigerante - Freon 12	Refrigerante	8.414624	KLB/H	0.715243
Vapor 100PSI	Vapor	2.532263	KLB/H	20.612621

Tabla 11: Costo de servicios por año

Servicio	USD/año
Electricidad	36,367.8
Servicios del proceso	207,043
Total	243,411

Tabla 12: Costo de mano de obra operativa y mantenimiento

Mano de obra		
Operadores por turno		2
Costo unitario	Costo/Operador/h	20
Total (USD)	Costo/año	350,640.00
Mantenimiento		
Costo/8000 h		29100
Total (USD)	Costo/año	31,886.3
Supervisión		
Supervisores por turno		1
Costo unitario	Costo/Supervisor/h	35
Total (USD)	Costo/año	306,810

Tabla 13: Resumen de resultados del proyecto

Costo de capital total del proyecto [USD]	5,673,990
Costo total de operación [USD/año]	1,557,120
Costo total de mano de obra operativa y mantenimiento [USD]	689,336
Costo total de materia prima [USD/año]	708,644
Ventas totales de producto [USD/año]	13,320,400
Costo total de servicios [USD/año]	243,411
Costo de equipo [USD]	482,500
Costo total de instalación [USD]	1,819,700

La tasa de retorno TIR a un periodo de 2 años es de: **2.104**

$$0 = -5,673,990 + \frac{13,320,400}{1 + TIR} + \frac{13,320,400}{(1 + TIR)^2}$$

Despejando para TIR se obtiene los 2.104

Conclusiones

El presente proyecto tuvo como base el proceso para producción de acetona descrito por Turton et al. Las condiciones de operación ahí planteadas para cada uno de los equipos resultaron útiles para la simulación del mismo proceso a excepción de las columnas de destilación; estas tuvieron que ser primero simuladas como columna DSTWU para una vez obtenidos los datos ser integradas en el proceso, además de realizar una modificación en la corriente de entrada del 50% menos en la alimentación. Una vez llevada a cabo la simulación se logró obtener un producto con 99% de pureza, con esto podemos decir que nuestro primer objetivo estaba cumplido.

En cuanto al sistema de control se logro realizar una propuesta de control, mediante la relación de la temperatura del reactor y el flujo de entrada de la chaqueta, por lo tanto la entrada manipulable es el flujo de entrada de la chaqueta F_j . En este caso como lo indica el ΔH_{rxn} positivo, la reacción es endotérmica, por lo tanto es necesario calentar el reactor para llevarlo a la temperatura deseada. Por esta razón el balance de energía del reactor es muy importante para controlar el proceso. Para realizar los cálculos de los diferentes controladores (P,PI,PID) se logro realizar mediante el método de Cohen-Coon, el cual consideramos el mas sencillo para este caso, ya que teníamos la función de transferencia a lazo abierto. En este trabajo no se realizo un análisis profundo sobre el comportamiento del sistema, es necesario un análisis posterior para tener una perspectiva más completa de este proceso.

Respecto a la viabilidad sustentable de nuestro proyecto en el ámbito económico, ambiental y social consideramos que en general la producción de acetona a partir de alcohol isopropílico es una opción viable ya que representa un método amigable con el ambiente gracias a que los productos de desecho son mínimos y para la corriente que sale por el fondo de la segunda torre de destilación que es relativamente agua se podría proponer una torre de enfriamiento para recircularla al proceso. Con base al estudio de mercado, la producción de acetona es de importancia para producir otros productos de uso cotidiano, por lo tanto, el impacto social es positivo. Finalmente con los resultados obtenidos en el análisis económico; aunque la tasa de retorno resultó positiva, concluimos que sería posible optimizar nuestro proceso y así elevar la tasa de retorno.

Referencias

- Abdullah, A. M., Mohamed, M. E., y Ali, M. F. (2017). production of acetone from iso-propanol.
- Acevedo, F. J. V. (2016). *Ingeniería conceptual de una planta de producción de acetona* (Tesis Doctoral no publicada). Escuela Técnica Superior de Ingeniería Universidad de Sevilla.
- García Gómez, R. (2020). Ingeniería básica de una planta de producción de acetona a partir de isopropanol.
- INEGI. (2009). La industria química en México 2009.
- Luyben, W. (2010, 03). Design and control of the acetone process via dehydrogenation of 2-propanol. *Industrial Engineering Chemistry Research - IND ENG CHEM RES*, 50.
- Quiroz Valiente, L. A., y Solano Mateo, A. R. (2014). Diseño de una planta industrial para la producción de acetona a partir de alcohol isopropílico.
- Smith, C. A., Corripio, A. B., y Basurto, S. D. M. (2007). *Control automático de procesos: teoría y práctica*. Limusa México.
- Smith, J. M., Van Ness, H. C., y Abbott. (2007). Introducción a la termodinámica en ingeniería química.