



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.

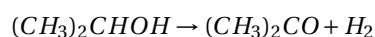
Como solvente, la acetona puede disolver muchos plásticos incluyendo botellas hechas de poliestireno, policarbonato y algunos tipos de polipropileno. Se caracteriza por ser uno de los disolventes orgánicos conocidos más usados, es inmiscible en agua, además es fácilmente biodegradable llegando a ser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

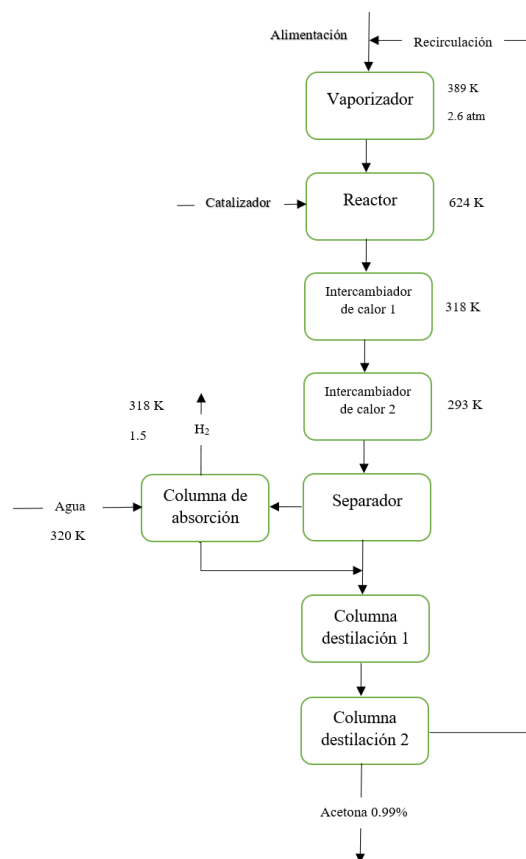


Figura 1: Diagrama de bloques del proceso

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.

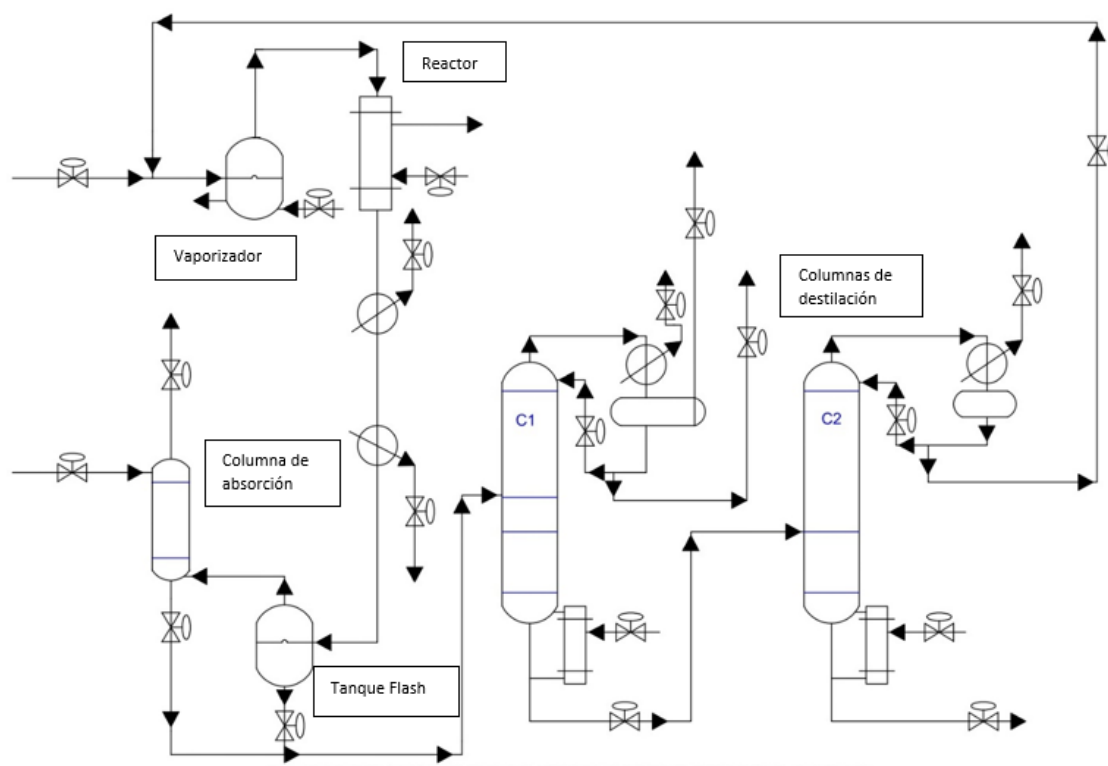
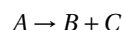


Figura 2: Diagrama del proceso.

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*.

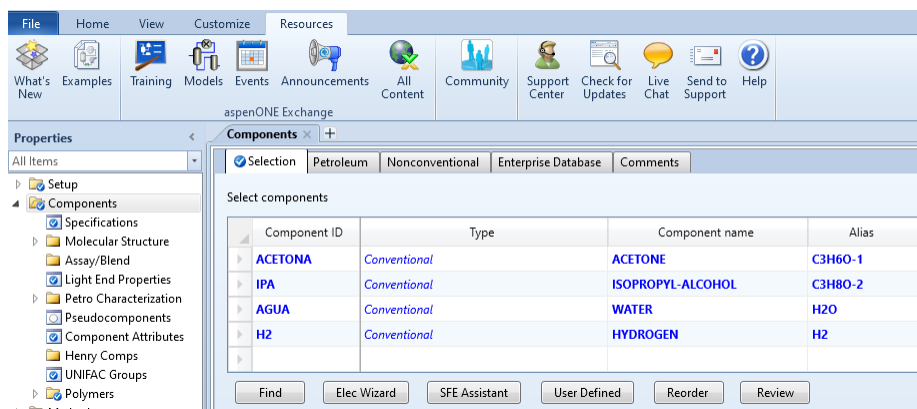


Figura 3: Vista de Aspen Plus donde se introducen los componentes del proceso.

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*

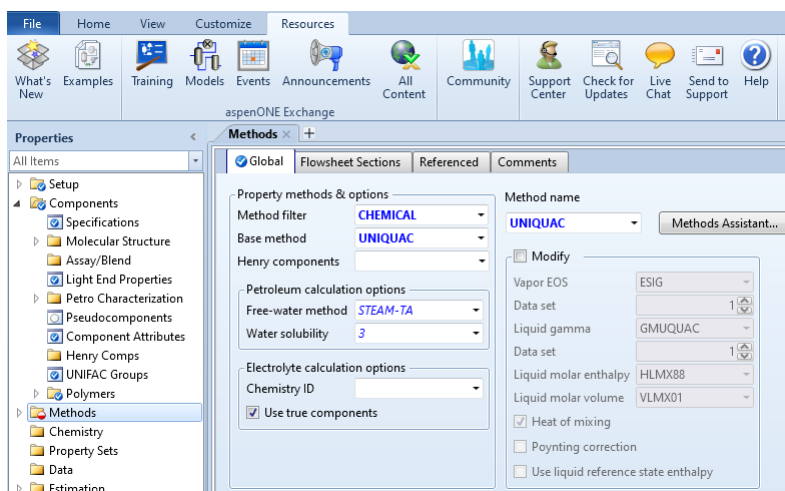


Figura 4: Vista de Aspen Plus donde se muestra la selección del modelo termodinámico adecuado al proceso. Aquí se elige el modelo termodinámico UNIQUAC.

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*).

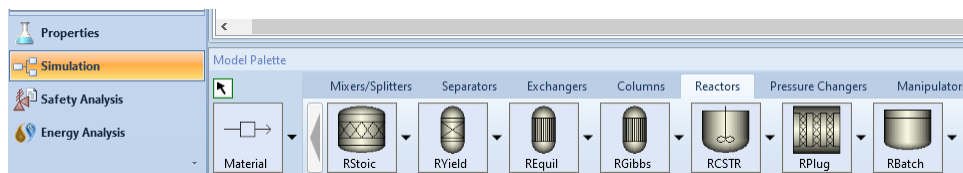


Figura 5: Vista de Aspen Plus para la selección del reactor adecuado al proceso.

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

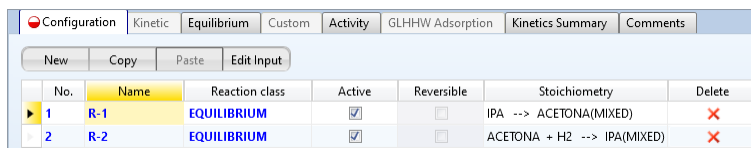


Figura 6: Vista de Aspen Plus para la selección de parámetros cinéticos. Aquí seleccionamos si nuestra reacción es reversible o irreversible.

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).

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.
- 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.

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																					