DIQUIMA

Proyecto 1 de la asignatura de Modelado y Simulación de procesos químicos. Curso 2006-2007

FABRICACIÓN DE ANHIDRIDO ACÉTICO

Debido a las necesidades de demanda local se quiere llevar a cabo un proyecto para construir una planta de producción de anhídrido acético. Este proceso se realizará mediante un craqueo de la acetona a cetena y una posterior reacción de esta con ácido acético para producir el anhídrido.

Para poder tener un mayor conocimiento del proceso se ha propuesto desarrollar un modelo en estado estacionario empleando el programa Aspen Plus.

A continuación se describe el proceso mencionado así como las condiciones de operación relativas al caso base de estudio.

Descripción del proceso

Química del proceso

Las especies que participan en el proceso son: Acetona (dimetil cetona)(CH_3COCH_3), cetena (CH_2CO), ácido acético (CH_3COOH), anhídrido acético ($(CH_3CO)_2O$), monóxido de carbono, etileno (C_2H_4) y metano.

La reacción de craqueo de la acetona es la siguiente:

$$CH_3COCH_3 \rightarrow CH_2CO + CH_4$$

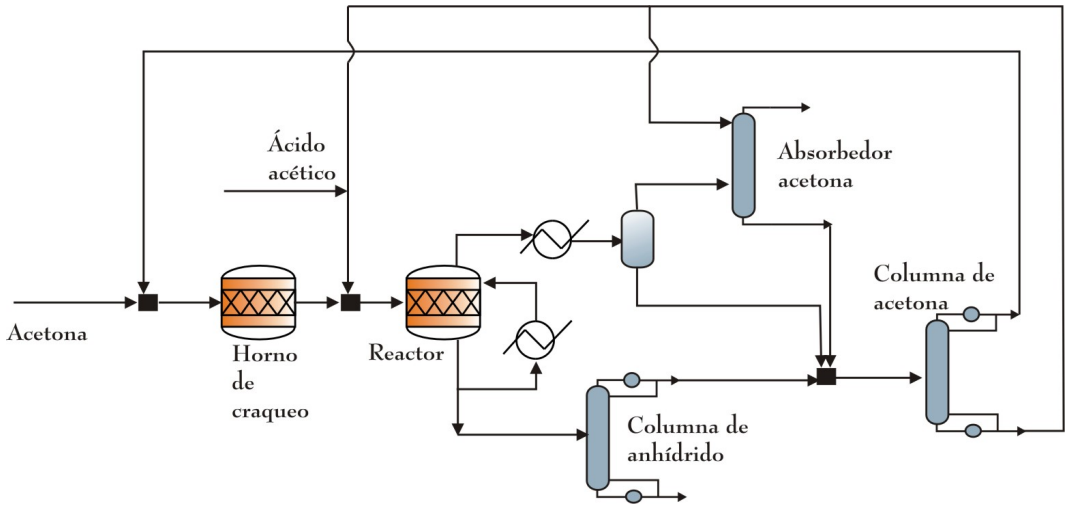
La cetena a su vez se descompone según la siguiente reacción:

$$CH_2CO \rightarrow CO + \frac{1}{2}C_2H_4$$

Finalmente la reacción de síntesis del anhídrido acético es:

$$CH_2CO + CH_3COOH \rightarrow (CH_3CO)_2O$$

La figura 1 muestra el diagrama de flujo del proceso.Se puede considerar que todo el proceso opera prácticamente a presión atmosférica. El proceso debe producir alrededor de 75000t/año.



Corrientes de alimentación y servicios auxiliares

- La acetona está disponible como líquido a 30°C y presión atmosférica, considérese pura.
- El ácido acético está disponible como líquido a 30°C y presión atmosférica, considérese puro.
- El agua de refrigeración se suministra a 30°C siendo la temperatura máxima de retorno de 45°C .
- Se dispone de vapor, fuel gas y electricidad según las necesidades del proceso.

Horno de craqueo de acetona

La acetona fresca se mezcla con la acetona reciclada de la columna de acetona y se alimenta al horno de craqueo. La mezcla es vaporizada y calentada a 700°C donde se produce la descomposición térmica de la acetona, según la primera reacción expuesta. Dado que la cetena es un compuesto inestable a esas temperaturas se produce también su descomposición según la segunda reacción.

El caso base requiere una conversión de acetona de un 15 % para lo cual según estudios de planta piloto se obtiene una conversión de cetena en la reacción secundaria de un 20 %.

Reactor

Para enfriar rápidamente y parar la descomposición térmica de la cetena (quench) se mezcla con ácido acético líquido. La mezcla gaseosa resultante se alimenta al reactor donde se ponen en contacto con una lluvia de spray compuesta de acetona, ácido y anhídrido. Una vez la cetena ha condensado se produce la reacción de formación del anhídrido acético según la tercera reacción descrita. Estudios previos en planta piloto indican que el reactor debe operar a unos 80°C . Para conseguir una conversión total de la cetena la relación de ácido acético a cetena debe ser de al menos 6 a 1. El calor se elimina del reactor mediante la recirculación y enfriamiento de una fracción del líquido que abandona el reactor. Este reciclo es el spray que enfría los gases de entrada. Esta corriente dado su bajo caudal puede despreciarse en cuanto al balance de materia, pero su efecto en el balance de energía debe de tenerse en cuenta.

Condensador de acetona y flash

Los productos gaseosos que abandonan el reactor a 80°C contienen todavía bastante acetona. Esta acetona debe de recuperarse y reciclarse al proceso. Como primer paso el gas se enfría a 40°C en un condensador parcial y la mezcla bifásica resultante se separa en un flash.

Absorbedor de acetona

El vapor que deja el flash de acetona todavía tiene un alto contenido en la misma. Para recuperarla se alimenta a un columna de absorción de platos donde se pone en contacto con una corriente líquida compuesta predominantemente de ácido acético. Éste absorbe la mayoría de la acetona. Cálculos preliminares indican que la columna puede funcionar con siete platos teóricos. El vapor que abandona la columna de absorción va a una unidad para recuperar el ácido acético (no incluido en el proceso). Para ello es necesario que la fracción molar de acetona en esta corriente vapor sea inferior a 0.01.

Columna de anhídrido acético

La corriente líquida que abandona el reactor contiene la mayor concentración del producto deseado anhidrido. Esta columna separa este producto del resto de componentes. El producto se obtiene por el fondo de la columna. Se requiere anhídrido acético de 99.9 % de pureza. Para el caso base la columna fue diseñada para recuperar el 99 % del anhídrido acético alimentado a la columna.

Columna de acetona

El destilado de la columna anterior se mezcla con las dos corrientes líquidas (la salida del flash de acetona y los fondos del absorbedor) y la nueva corriente es alimentada a la columna de acetona. Esta mezcla contiene acetona y ácido principalmente aunque también hay anhídrido y trazas de las especies gaseosas. La columna separa esta mezcla produciendo un destilado rico en acetona y unos fondos ricos en ácido acético. El destilado se recicla al horno de craqueo y los fondos se emplean como alimentación al absorbedor y se reciclan a la alimentación del horno. La columna para el caso base fue diseñada para recuperar por los fondos el 99 % del ácido acético alimentado a la misma y por la cabeza el 99 % de la acetona alimentada.

Resultados

Se debe realizar el balance de materia y de energía del diagrama de flujo propuesto. Se pueden realizar las suposiciones y simplificaciones que se considere oportuno pero siempre justificándolas. De igual manera se puede alterar (si se considera necesario y de forma justificada) la estructura del diagrama para obtener la producción pedida.

Se debe entregar un informe con los siguiente apartados:

- Descripción del particionado del sistema y de los conjuntos de corte posibles.
- Resumen y análisis de los resultados obtenidos, que debe incluir:
  - Indicar el modelo de Aspen empleado en la simulación de cada equipo, así como sus condiciones de operación
  - Poner la tabla resumen con los resultados de las corrientes
- Dificultades (y soluciones en su caso) durante el desarrollo de la simulación.
- Suposiciones y/o simplificaciones realizadas (en caso de hacerlas)
- Archivos .inp y .bkp de Aspen con el modelo.

Notas para la realización de la simulación:

1. Desarrollar la simulación de forma gradual (grabar cada versión con un nombre diferente antes de cualquier modificación importante).
2. Simular primero el proceso sin reciclos e irlos añadiendo progresivamente.
3. Emplear los cálculos de simulaciones anteriores como estimaciones para las siguientes simulaciones (especialmente en el caso de reciclos).
4. Empezar por modelos más sencillos (por ejemplo en el caso de las columnas se puede empezar por separadores o por modelo DISTL) y posteriormente pasar a los más rigurosos.
5. Considerar la posibilidad de dar valores iniciales a ciertas corrientes que tome como estimación para el comienzo del cálculo.
6. Considerar la posibilidad de cambiar el método de integración así como la tolerancia, el número de iteraciones que realiza,... (por ejemplo, emplear el algoritmo de Broyden en lugar del de Wegstein)