INSTITUTO TECNOLÓGICO DE DURANGO
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍAS QUÍMICA Y BIOQUÍMICA
SEMESTRE ENERO-JUNIO 2006

Diseño de Procesos 2 (8X) – Examen CHEMCAD
Titular: Dr. Carlos Francisco Cruz Fierro

Nombre: _____ Control:_____

INDICACIONES

Para el proceso descrito a continuación, preparar un diagrama de flujo preliminar usando CHEMCAD. Donde sea necesario, asumir caídas de presión razonables. En base a la simulación, completar la información pedida al final del examen. Se entregará el examen y copia de los archivos producidos con CHEMCAD.

INFORMACIÓN GENERAL

El proceso más empleado actualmente para la producción de acetona es como sub-producto de la producción de fenol, donde el benceno es alquilado a cumeno, que es oxidado a hidroperóxido de cumeno, y finalmente descompuesto para dar fenol y acetona. Sin embargo, el proceso presentado aquí usa alcohol isopropílico (AIP) como materia prima. Ésta es una alternativa comercialmente viable y algunas plantas continúan produciendo acetona de este modo. La principal ventaja de este proceso es que la acetona producida es 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 impuestas sobre el uso de solventes. La reacción para producir acetona a partir de alcohol isopropílico es:

$$\underset{\text{Alcohol isopropílico}}{(CH_3)_2CHOH} \longrightarrow \underset{\text{Acetona}}{(CH_3)_2CO} + H_2$$

DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

Una mezcla de alcohol isopropílico y agua (88% en peso de AIP, a 25°C y 1.01 bar, flujo total de 52 kmol/h) se mezcla con el alcohol isopropílico recirculado. La corriente resultante se bombea a 2.3 bar y se vaporiza antes de entrar al reactor, que opera isotérmicamente a 350°C y 2 bar. La corriente de salida del reactor, conteniendo acetona, hidrógeno, agua y AIP se enfría a 20°C antes de entrar a un flash adiabático para separar el hidrógeno formado, que se descarta.

El producto de fondo del flash se hace entrar a una columna de destilación operando a 1.5 bar y con reflujo 1.05 veces el reflujo mínimo, donde se recupera el 99% de la acetona en el producto destilado y el 99.5% del alcohol isopropílico en el producto de fondo. El producto de fondo de esta columna pasa a una segunda columna de destilación operando a 1.2 bar y 1.2 veces el reflujo mínimo donde se recupera el 99.9% del alcohol isopropílico en el producto destilado y el 99.9% del agua en el producto de fondo. El agua se descarta mientras que el alcohol isopropílico se recircula.

CINÉTICA DE LA REACCIÓN

La reacción para formar acetona a partir de alcohol isopropílico (isopropanol) es endotérmica con un calor estándar de reacción de 62.9 kJ/mol. La reacción es controlada por la cinética y ocurre en fase vapor sobre un catalizador. La reacción es de primer orden con respecto a la concentración de alcohol y se representa adecuadamente con la siguiente ecuación de velocidad:

$$-r_{AIP} = k_0 \exp\left[-\frac{E_a}{RT}\right] C_{IPA} \qquad \text{[kmol/m}^3\cdot\text{s]}$$

con E_a = 72.38 MJ/kmol, k_0 = 3.51 × 10^5 s^{-1}, y con C_{IPA} dado en kmol/m³.

El reactor está forrmado por tubos de 2 plg (50.4 mm) de diámetro y 20 pies (6.096 m) de longitud. Se desea obtener una conversión de 90% de AIP en el reactor, por lo que se necesita determinar el volumen del reactor.

EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR

El sistema alcohol isopropílico-agua forma un azeótropo de punto de ebullición mínimo con una composición de 88% en peso de AIP y 12% en peso de agua. El modelo termodinámico seleccionado deberá reflejar correctamente la composición del azeótropo.

RESULTADOS

Modelo termodinámico seleccionado para equilibrio L-V	
Composición del azeótropo isopropanol-agua (mol%) a 1.2 bar	
Volumen requerido del reactor para 90% conversión (m³)	
Calor requerido en el reactor (MJ/h)	
Columna de destilación 1: Número de platos teóricos	
Plato de alimentación	
Calor requerido en el hervidor (MJ/h)	
Columna de destilación 2: Número de platos teóricos	
Plato de alimentación	
Calor requerido en el hervidor (MJ/h)	
Cantidad de acetona perdida junto con el hidrógeno (kmol/h)	
Composición de la acetona producto (% peso)	