

OPTIMIZACIÓN DE UN PROCESO BASADO EN DESTILACIÓN REACTIVA PARA LA PRODUCCIÓN DE DIFENIL CARBONATO

Vallejo Blancas David (1), Segovia Hernández Juan Gabriel (2)

1 [Licenciatura en Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato] | david.blancas5@gmail.com

2 [Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato] | gsegovia@ugto.mx

Resumen

Los plásticos, de acuerdo a su impacto ambiental, se caracterizan de la siguiente manera: el PVC, es uno de los que presentan más daño ambiental, mientras que los menos nocivos serían los bioplásticos. El policarbonato (PC) se sitúa por debajo del PVC, junto con el poliestireno, el poliuretano y el ABS, es decir no es un polímero tan inocuo como se podría pensar, pero nuevos procesos de síntesis podrían disminuir su impacto ambiental. Para la síntesis de PC se utiliza fosgeno como materia prima, sustancia tóxica derivada del cloro. El policarbonato no necesita aditivos pero necesita disolventes para su producción, como el cloruro de metileno (un carcinógeno). Otros posibles disolventes que se emplean son el cloroformo, 1,2-dicloroetileno, tetracloroetano y clorobenceno. El Policarbonato es un termoplástico con propiedades muy interesantes en cuanto a resistencia al impacto, resistencia al calor y transparencia óptica, de tal forma que el material ha penetrado fuertemente al mercado en una variedad de funciones. Es fácil de trabajar, moldear y termo-formar y es utilizado ampliamente en la manufactura moderna. El nombre "policarbonato" se basa en que se trata de polímeros que presentan grupos funcionales unidos por grupos carbonato en una larga cadena molecular. La obtención de dicho producto con amplia aplicación sigue diversas rutas, por lo cual implementar un proceso sustentable y analizar su producción mediante destilación reactiva es una importante mejora al proceso. Si además se implementa re-compresión de vapor a la destilación reactiva se muestra un claro beneficio frente a una destilación reactiva convencional, en cuanto al ahorro energético. En este trabajo se analiza el desempeño dinámico de una columna de destilación reactiva en comparación con una destilación reactiva con re-compresión de vapor.

Abstract

Reactive Distillation (RD) is one of the most representative examples of Process Intensification (PI) at a functional level; increasing complexity of RD by implementing heat integration to achieve higher energy efficiency and economic advantages compared with conventional reactive distillation can be devised. In this paper, four intensified reactive distillation configurations for the Synthesis of Diphenyl Carbonate are compared. A conventional reactive distillation configuration, a thermally coupling reactive distillation configuration and two novel configurations involving vapor recompression and thermally coupled with vapor recompression are presented. Economic and controllability aspects were evaluated for all of the configurations; the economic comparison was carried out by the estimation of the total annual cost, whereas the controllability was assessed through the singular value decomposition and the condition number calculation. The results show that the new vapor recompression and thermally coupled with vapor recompression configurations provide significant energy savings of 18.8% and 30.8% respectively, compared with the conventional reactive distillation configuration. Also, they offer better control properties, whereas thermally coupled reactive distillation configuration offers 15.9% of energy savings compared with the conventional reactive distillation configuration. In addition, thermally coupled reactive configuration also provides the best control properties and economic benefits.

Palabras Clave

Destilación reactiva, DPC, MA, Policarbonato, Re-compresión de vapor

INTRODUCCIÓN

Gran parte del policarbonato es producido a partir de fosgeno, el cual usa a su vez monóxido de carbono y cloro como materia prima. Sin embargo, este proceso de fosgeno padece una serie de problemas medio ambientales. En particular el altamente tóxico fosgeno es empujado como un monómero, junto a una gran cantidad del igualmente tóxico cloruro de metileno durante la reacción de polimerización. Esto trae como consecuencia durante la parte de separación del proceso, que una gran cantidad de agua sea empleada para la separación del fosgeno y del cloro procedente del cloruro de metileno, para la producción del fenil carbonato, haciendo de este proceso poco sustentable desde el punto de vista ambiental.

En sus inicios el proceso empleaba piridina como solvente, el Bisfenol-A (BPA) y el fosgeno reaccionaban en presencia de fenol para producir el policarbonato. Las dificultades que presentaba este método residían en la dificultad para separar y purificar el policarbonato de la piridina. Bayer en 1960 mejoró el proceso eliminando el uso de piridina, de modo que ahora se tenía BPA y fosgeno reaccionando en una solución de cloruro de metileno e hidróxido de sodio. Actualmente el método comercial más utilizado para la producción de policarbonato continúa siendo mediante el uso de fosgeno

Para superar estas dificultades medio ambientales, los esfuerzos en investigación han sido concentrados en desarrollar un proceso de producción de policarbonato libre de fosgeno [1]. El principal foco de atención, para la creación de una ruta verde para la producción de policarbonato, es la reacción de dimetil carbonato (DMC) para producir difenil carbonato (DPC) el cual después reacciona con bisfenol-A y da como resultado policarbonato. Existen diversas rutas para la producción de DPC, la más prometedora de todas es la utilizada por Tunistra y Rand [2], la cual emplea una reacción de esterificación entre DMC y fenil acetato (PA) para dar como resultado difenil carbonato y acetato de metilo (MA).

Estrategias hacia la minimización en el consumo de energía, costos de operación y beneficios ambientales, en plantas de procesos químicos han

sido estudiadas a través de los años. De manera específica una de estas estrategias es la intensificación de procesos aplicada a columnas de destilación mediante la integración de energía.

El nuevo término, y la estrategia como tal de la Intensificación de Procesos (PI), han surgido como una necesidad a la creación de tecnologías más pequeñas, limpias y eficientes. PI ha sido recientemente definida como “cualquier ingeniería de desarrollo que aventaje substancialmente hacia una tecnología más pequeña, limpia, segura y energéticamente eficiente” [3].

Destilación Reactiva

Importantes modificaciones en los procesos utilizados para producir químicos se han centrado en la creación de plantas químicas cada vez más eficientes en el uso de la energía basados en el concepto de PI. En ese sentido la destilación reactiva es un excelente ejemplo de PI. En una planta química convencional hay secciones de reacción y separación. Estas tienen sus propios recipientes y equipos, y a menudo están unidos entre sí por corrientes de material o energía. En la destilación reactiva, la reacción y la separación ocurren en un mismo equipo, esto trae como resultados importantes ahorros en el consumo energético y costos del proceso.

Debido a que la destilación reactiva combina dos equipos en uno, que es menos costoso en comparación con otros métodos que requieren un reactor y una columna de destilación, es también ligeramente más rápida que la destilación tradicional. Por último, la destilación reactiva utiliza menos energía y produce menos residuos y subproductos. Sin embargo, la destilación reactiva no realiza la tarea de destilación tan eficaz como dos dispositivos separados lo hacen; porque en algunos casos la eficiencia se pierde cuando se combinan los dos dispositivos. Además, para ciertas mezclas químicas, las condiciones óptimas para la reacción y la destilación son demasiado diferentes para ser realizadas en una sola unidad, de esta manera la destilación reactiva no es eficaz en estos casos.

Re-compresión de Vapor

El mayor gasto económico en una operación de evaporación, está dado por el consumo de vapor de calentamiento necesario para evaporar el producto en cuestión.

El vapor desprendido por el producto que se está evaporando, se comprime para aumentar su presión (y por ende su temperatura) con objeto de volverlo a utilizar como medio de calentamiento del mismo producto.

El evaporado puede re-comprimirse mediante compresión térmica o mecánica. En la re-compresión térmica, parte del evaporado se comprime en un eyector impulsado por vapor y se utilizan para calentar el evaporador. En la re-compresión de vapor mecánica, se utiliza un ventilador especial para comprimir todo el flujo de vapor, dejando el evaporador a una presión suficiente para calentar el evaporador. De este modo, el evaporador no consume vapor durante su funcionamiento y la compresión se realiza mediante un compresor impulsado por un motor eléctrico [4]. De esta forma se logra un ahorro en el consumo de energía en las columnas de destilación.

MATERIALES Y MÉTODOS

El objetivo de este trabajo consiste en el estudio del desempeño dinámico de una columna de destilación reactiva (Figura 1) y una columna de destilación reactiva con re-compresión de vapor (Figura 2) para la producción de PC a partir de DPC. Para ello se llevó a cabo un estudio a lazo cerrado utilizando controladores PI (de amplio uso industrial) y teniendo como función objetivo la minimización del IAE. Los lazos de control se establecieron teniendo como variables de control las composiciones de los productos de interés y como variables manipulables la relación de reflujo y la carga térmica.

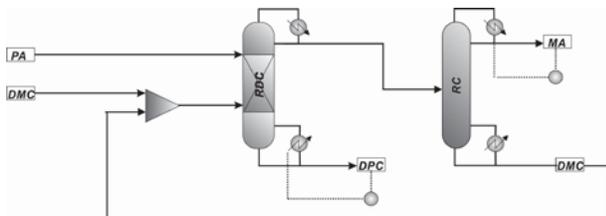


Figura 1: Columna de destilación reactiva convencional.

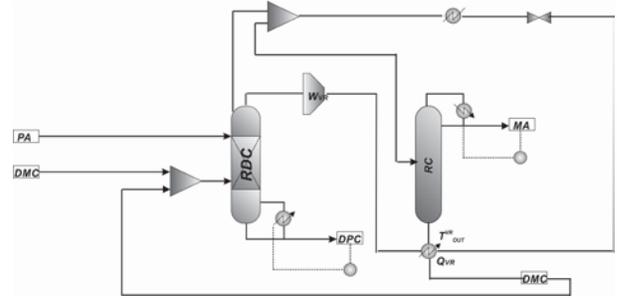


Figura 2: Columna de destilación reactiva con re-compresión de vapor.

El estudio se efectuó utilizando el software Aspen Dynamics. La función objetivo para detectar el mejor desempeño dinámico consistió en detectar los menores valores de IAE en cada uno de los lazos de control para los dos casos de estudio analizados (Figura 3).

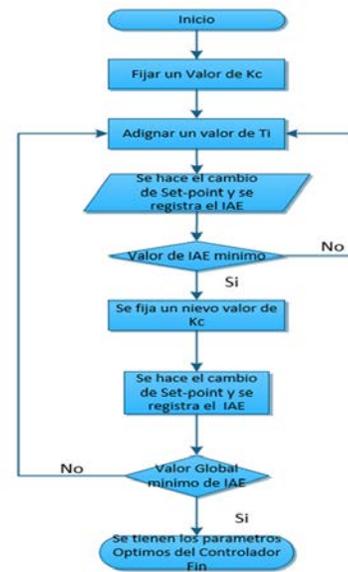


Figura 3: Diagrama de flujo para la sintonización del controlador.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En primera instancia, para la producción del DPC se cuenta ya con una ruta basada en la destilación reactiva, la cual presenta claras desventajas energéticas frente a una destilación reactiva con re-compresión de vapor. El método hasta ahora usado se maneja de manera cotidiana y sin variaciones, porque actualmente ha demostrado ser rentable; sin embargo la optimización tiene

como finalidad la mejora en cuanto al proceso y el aprovechamiento de los recursos. Minimizar el gasto energético es un incentivo para la innovación, puesto que los recursos cada vez son más escasos y la contaminación en el mundo está siendo más notoria.

En la producción del DPC y MA en el proceso convencional y con re-compresión de vapor se efectuó una reducción en la concentración de ambos productos, con el propósito de que la columna reaccione a este cambio de set point por medio de la acción del controlador.

Con el análisis del desempeño dinámico realizado, mediante estudio a lazo cerrado efectuado al proceso reactivo convencional y con re-compresión de vapor en los lazos del DPC y MA se obtuvieron resultados de primordial interés:

En la figura 4 se muestra la respuesta a la perturbación en la columna convencional, la cual logra estabilizarse en 1.8 hrs. con una respuesta suave para una K_c , T_i de 250 y 9 respectivamente, con un IAE de 1.52×10^{-3} .



Figura 4: Respuesta de la columna convencional para el DPC.

Se muestra la respuesta obtenida en el lazo de MA (figura 5) a causa de la perturbación hecha sobre él, es un poco menos relajada; sin embargo el tiempo en el que alcanza el set point está en 1.8 hrs. con los parámetros de controlador K_c , T_i de 14 y 16 respectivamente, con un IAE de 2.8×10^{-3} .



Figura 5: Respuesta de la columna convencional para el MA.

Haciendo un análisis análogo en la columna de re-compresión de vapor, la respuesta obtenida para el lazo de DPC muestra una severa desventaja en cuanto a la columna convencional puesto que se logra estabilizar en un lapso de 12 hrs. aproximadamente con marcadas oscilaciones (figura 6), lo que es una desventaja y símbolo de inestabilidad, los parámetros para el controlador son 25 y 61 para K_c , T_i respectivamente, obteniendo un IAE de 1.3×10^{-2} .

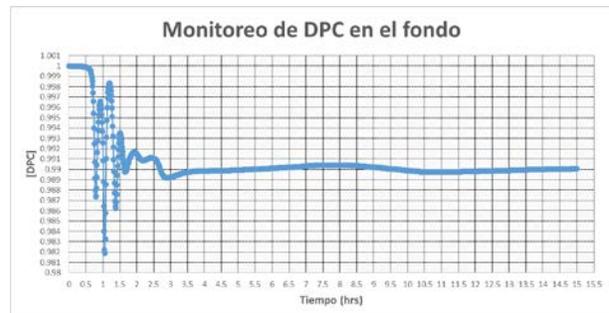


Figura 6: Respuesta para el DPC en la columna con re-compresión de vapor.

Lo visto en el lazo de DPC es muestra de su clara inferioridad con respecto a la columna convencional, sin embargo; para el lazo de MA ocurre totalmente lo contrario puesto que la respuesta en este lazo (figura 7) a causa de la perturbación es suave, si bien muestra una pequeña oscilación, incluso más notoria que en el caso de la columna convencional, el IAE es inferior

con un valor de 1.8×10^{-3} . El controlador ha logrado efectuar dicha estabilización con el par de valores K_c , T_i de 250 y 6, respectivamente.



Figura 7: Respuesta en el lazo de MA para la columna con re-compresión de vapor.

CONCLUSIONES

Es notoria la superioridad que brinda el proceso con re-compresión de vapor en cuanto al ahorro energético, sin embargo que el proceso acople a sí mismo más variables incrementa su sensibilidad a factores externos puesto que depende ahora no sólo de la naturaleza de las reacciones, reactivos y productos como en el proceso convencional; sino también de variables como presión, temperatura, concentración y flujo puesto que es mediante el control de todo este cúmulo de factores como se podría llevar a cabo dicha implementación.

Sin embargo, las ventajas en el rubro energético no satisfacen el control de dicho proceso, en lo cual el proceso convencional muestra una notoria ventaja y satisface las necesidades, si bien no de una manera más eficiente, lo hace de manera segura y en cada uno de los factores por satisfacer cumple necesariamente con lo elemental, lo que hace posible su implementación.

AGRADECIMIENTOS

Tuve la posibilidad de compartir esta experiencia con personas de enormes conocimientos y capacidades, especialmente valoro el ímpetu de los compañeros que colaboramos durante el desarrollo de esta investigación. Son y dan muestra de la perseverancia y paciencia que el camino de la ciencia exige.

Agradezco encarecidamente al doctor Segovia por haberme aceptado para participar en su investigación y ser ejemplo e inspiración constante de lo que es la ingeniería química en sus bastas aplicaciones, esencialmente en el campo de la investigación. De igual manera extendiendo mi agradecimiento a su equipo de alumnos de posgrado que muestran gran dedicación y ahínco en la labor que desempeñan, como factor clave para finiquitar este pasaje por la ciencia del que fui parte y espero seguir siendo.

REFERENCIAS

- [1] Kai Cheng, San-Jan Wang, David S.H Wong (2013) "Steady-state desing of thermally coupled reactive distillation process for the synthesis of diphenyl carbonte" *Comp. Chem. Eng.* 58:263-271
- [2] Tuinstra, H.; Rand, C. L., 1994. Process for the preparation of phenyl carbonate or polycarbonates. US Patent 5349102. Ejemplo: Haner, R. L., Llanos, W. & Mueller, L. (2000). Small volume flow probe for automated direct injection NMR analysis: design and performance. *Journal of Magnetic Resonance*, 143(8), 69-78.
- [3] Rao, S. S. (1996). *Engineering Optimization. Theory and Practice*. EE. UU., John Wiley & Sons.
- [4] KBR Ecoplanning Oy (2016) Líder en tecnología para un crecimiento más ecológico. Recuperado de: <http://www.ecoplanning.fi/index.php/recompresion-del-vapor.html> (17/07/2016 16:35)