

# DISEÑO DE UN PROCESO DE BAJO CONSUMO DE ENERGÍA PARA LA PRODUCCIÓN DE DIFENIL-CARBONATO

ROMERO GARCÍA ANA GABRIELA (1), SEGOVIA HERNÁNDEZ JUAN GABRIEL (2)

<sup>1</sup> [INGENIERÍA QUÍMICA, UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO] | Dirección de correo electrónico: [rom\_gaby10@hotmail.com] <sup>2</sup>  
[DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA, DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS, CAMPUS GUANAJUATO,  
UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO] | Dirección de correo electrónico: [g\_segovia@hotmail.com]

## RESUMEN

Actualmente existe un creciente interés en el área de ingeniería de procesos por generar procesos más baratos, eficientes, fáciles de controlar, amigables con el ambiente y seguros. En este sentido, la intensificación de procesos surge como una consecuencia que trata de solucionar esta problemática volviéndose una de las tendencias más importantes en ingeniería química. Dadas las bondades que ofrece, la intensificación de procesos ha sido aplicada a un sinnúmero de procesos, uno de estos es el de producción de policarbonato, el cual es un polímero con un gran número de aplicaciones. Sin embargo, el uso de fosgeno en el proceso tradicional hace que éste sea muy peligroso y tóxico para el ambiente, por lo que se han buscado alternativas más seguras y amigables con el ambiente. Una de estas alternativas es el uso de difenil carbonato como precursor, sintetizado durante la reacción de transesterificación de dimetil carbonato y acetato de fenilo. Dichas reacciones de transesterificación pueden llevarse a cabo en esquemas intensificados como lo es la destilación reactiva. En el presente trabajo se realizó la optimización de diferentes esquemas de destilación reactiva para la producción de difenil carbonato, teniendo como función objetivo la minimización del consumo de energía.

## ABSTRACT

Nowadays there is a growing interest in the area of process engineering to generate cheaper, efficient, easy to control, eco friendly and safe processes. In this way the Process Intensification arises as a consequence trying to solve this problem becoming one of the most important trends in chemical engineering. Given the advantages offered, intensification process has been applied to a lot of processes; one of these is the production of polycarbonate, which is a polymer with a large number of applications. However, the use of phosgene in the traditional process is very dangerous and toxic to the environment, that is why it have sought safer and environmentally friendly alternatives. One of these alternatives is to use diphenyl carbonate as a precursor, synthesized during the transesterification reaction of dimethyl carbonate and phenyl acetate. Such transesterification reactions may be conducted in intensified schemes as is reactive distillation. In this paper the optimization of different reactive distillation schemes for the production of diphenyl carbonate was conducted, with the objective function minimizing energy consumption.

### Palabras Clave

Destilación Reactiva Convencional (CRD); Destilación Reactiva con Acoplamiento Térmico (TCRD) ; Destilación Reactiva con Recompresión de Vapor (VRRD); Destilación Reactiva con Acoplamiento Térmico y Recompresión de Vapor (VTCD); Difenil carbonato (DPC)

## INTRODUCCIÓN

El policarbonato (PC) es un importante termoplástico en ingeniería y en la vida cotidiana, tiene una aplicación comercial muy extensa gracias a sus múltiples propiedades. Es uno de los principales materiales implementados para la fabricación de discos ópticos (CDs y DVDs), vidrios especiales tales como: vidrios para lentes, ventanas de los aviones, lentes de sol y lentes de seguridad. Otras aplicaciones importantes son: aparatos electrónicos en el hogar, partes de automóviles y equipo de oficina.

Gran parte del PC es producido mediante un proceso con fosgeno, en donde se utiliza monóxido de carbono y cloro como materias primas. El fosgeno reacciona con Bisfenol- A en una solución de cloruro de metileno, el PC producido es lavado y separado. Este proceso es fácil de operar ya que requiere de una temperatura baja de reacción (entre 20°C y 40°C), la materia prima utilizada es barata y fácil de adquirir [1]. Sin embargo, esta ruta presenta más desventajas causar problemas ambientales severos.

Los inconvenientes de este proceso, es que el fosgeno y el cloruro de metileno son altamente tóxicos, los cuales al ser usados en grandes cantidades son una amenaza para el medio ambiente. Por otra parte se considera el uso excesivo de agua para poder realizar la separación y el lavado, entre más compleja sea la separación será necesario el uso de cantidades más grandes de agua, esto significa que se estará contaminando más agua.

Debido a estas razones, el proceso de producción de PC se ha convertido en un reto para la química verde, pues se requiere minimizar el uso y generación de sustancias peligrosas. Por lo tanto, hoy en día es de gran necesidad reemplazar la ruta de fosgeno para producir PC por un proceso alternativo amigable con el ambiente para poder satisfacer la gran demanda creciente de PC.

Actualmente se han estudiado diferentes alternativas para producir PC libre de fosgeno [2]. El Difenil Carbonato (DPC), puede ser utilizado como materia prima en la ruta alterativa para la producción de PC, de modo que se elimina el uso de fosgeno en la etapa de polimerización durante la producción de PC.

Para evitar los problemas ambientales causados por el fosgeno, se han investigado el desarrollo de procesos para la producción de PC libres de fosgenos. El principal punto de enfoque ha sido la creación de una ruta verde en la cual se lleva a cabo la transformación de dimetil carbonato (DMC) a DPC, para posteriormente reaccionar con Bisfenol-A y así producir PC [3].

La ruta más prometedora para la producción de PC emplea una reacción de esterificación entre DMC y fenil acetato (PA) para dar como resultado DPC y acetato de metilo (MA) [4] como se ilustra en la Ecuación 1.



La ventaja de esta reacción es una alta constante de equilibrio, no hay formación de azeótropos, no tiene reacciones laterales (simplificando el proceso de purificación de DPC) [3].

Para la síntesis de estas reacciones se propone un sistema convencional de destilación reactiva [3] en el cual para satisfacer las especificaciones de conversión del PA y pureza del DPC en el fondo, se aumenta la carga térmica y alimentación de DMC a la columna, afectando directamente los costos de operación. De modo que para disminuir el consumo energético y no impactar en los costos de operación, se ha visto la posibilidad de emplear procesos intensificados para la producción de PC a partir de DPC.

La complejidad de estos procesos los convierte en problemas de optimización a ser resueltos. Hasta el momento, no hay ningún trabajo reportado que haga el estudio de optimización simultánea costo-control para el proceso de destilación reactiva para la producción de DPC como precursor del PC.

Como lo muestra la Figura 1, a continuación se presentan cuatro casos de estudio de diferentes esquemas de destilación reactiva para la producción de DPC aun no reportados en la literatura: Destilación Reactiva Convencional (CRD), Destilación Reactiva con Acoplamiento Térmico (TCRD), Destilación Reactiva con Recompresión de Vapor (VRRD), Destilación Reactiva con Acoplamiento Térmico y Recompresión de Vapor (VTCD).

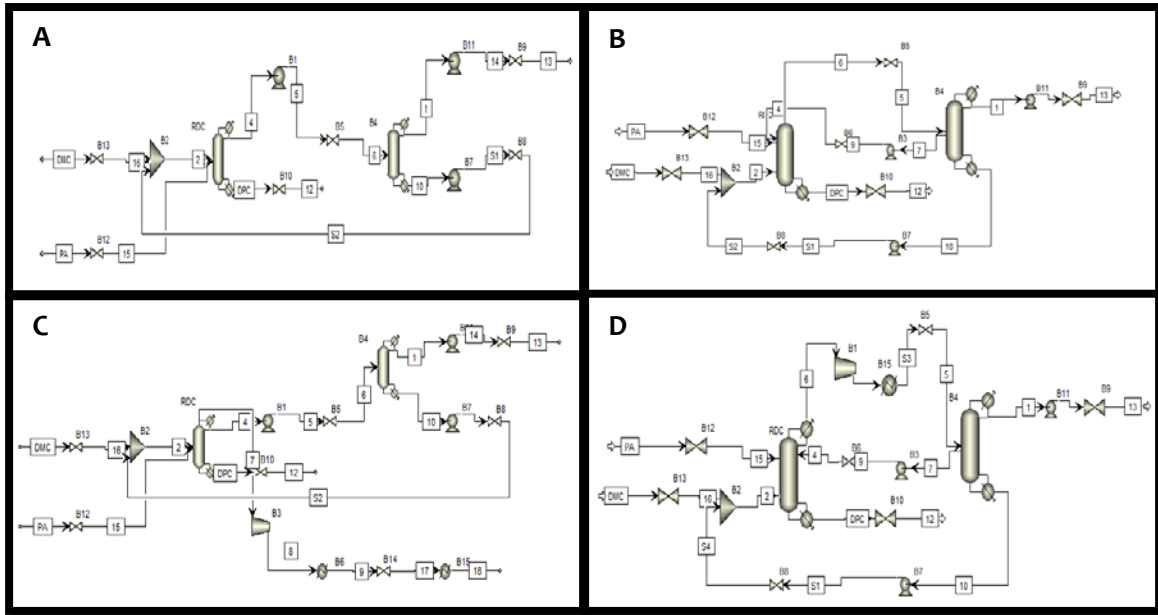


FIGURA 1: Secuencias de destilación reactiva A) CRD, B) TCRD, C) VRRD, D) VTCD.

En este trabajo se optimizaron diferentes esquemas de destilación reactiva para la producción de DPC, teniendo como función objetivo el consumo de energía a fin de determinar cuál es el mejor proceso. Se espera que la optimización de los parámetros de diseño y operación de los procesos intensificados (basados en destilación reactiva) para la producción de DPC, dará como resultado menores consumos de energía con respecto a su contraparte convencional.

## MATERIALES Y MÉTODOS

Para esta sección se utilizó el software de simulación Aspen Plus V8.4®. Antes de comenzar propiamente con el diseño de las secuencias, se debe considerar la cinética del proceso.

Para la Ecuación 1 se propuso el comportamiento cinético de la reacción DMC con PA, siendo la Ecuación 2 la expresión correspondiente a la velocidad de reacción para la Ecuación 1 [5].

$$r_1 = k_1 C_{PA} C_{DMC} - k_{-1} C_{MPC} C_{MA} \dots\dots (2)$$

Para este trabajo, los parámetros cinéticos utilizados se encuentran reportados en el trabajo de Cheng et al [3].

## Diseño de secuencias de destilación reactiva para la producción de dpc.

Estas configuraciones están conformadas por una columna de destilación reactiva (RDC) y una columna de separación (RC). Donde el reactivo más pesado (PA) se alimenta en la parte superior de la zona reactiva mientras que el reactivo más ligero (DMC) es alimentado en el fondo de la zona reactiva.

## Optimización de secuencias de destilación reactiva para la producción de dpc.

Para la parte de optimización se pretende comparar las secuencias VRRD y VTCD con las propuestas por Cheng et al [3].

### Optimización de secuencia de crd

La secuencia CRD no se optimizó ya que es el punto de referencia para el resto de las secuencias, fue tomada directamente de trabajo realizado por Cheng et al [3].

#### *Optimización de secuencia tcrd*

Se consideró el flujo de interconexión como la variable a manipular, ya que las variaciones de este afectan directamente al consumo energético del sistema. Se varió la corriente del flujo de interconexión entre las columnas RDC y RC y se registró la carga térmica de ambas columnas para poder determinar la carga térmica total.

#### *Optimización de secuencia vrrd*

La presión de salida del compresor se consideró como variable a manipular, ya que esta afecta directamente al consumo energético al actuar como bomba de calor en el sistema. Se varió la presión del compresor a la salida (entre 1 y 4 atm) y se registró la carga térmica de la RDC y carga térmica del compresor.

#### *Optimización de secuencia vtcr*

También se consideró la presión de salida del compresor y el flujo de interconexión como variables a manipular, ya que para este sistema tanto la presión en el compresor como el flujo de interconexión afectan directamente al consumo energético del sistema.

#### **Análisis de costos**

Cuando el proceso está en desarrollo, no está disponible la información sobre el costo de inversión. En estos casos es necesario tener alguna estimación razonable del potencial económico del proceso en desarrollo. Por lo que el cálculo del costo de equipos es indispensable, para realizar dicho cálculo se emplea el Método de Guthrie [6].

#### **Análisis de las propiedades de control mediante la descomposición en valores singulares (SVD)**

El uso de SVD en ingeniería química sirve como guía comparativa entre dos o más sistemas para determinar cuáles presentan mejor controlabilidad.

Su aplicación proporciona una medida de las propiedades de control de un sistema dinámico.

En esta sección se realizó un análisis SVD a frecuencia cero con la finalidad de evaluar las propiedades de control de cada uno de los sistemas propuestos con el fin de establecer cuál sistema presenta mejor control, alrededor del punto nominal de operación. Las secuencias con menor número de condición y mayor valor singular mínimo, serán las secuencias que presenten mejores propiedades dinámicas a primera instancia.

## **RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

En esta sección presentan los resultados obtenidos en los diferentes estudios que se le realizaron a las secuencias de destilación reactiva propuestas. En cada una de las secciones se hace una comparación de las secuencias optimizadas en comparación de su secuencia convencional y sus diseños originales no optimizados para determinar que secuencia es la que aporta menor consumo energético, presenta menor costo y mejores propiedades de control.

#### *Optimización de las secuencias de destilación reactiva*

De la Tabla 1 se puede observar que la secuencia con mayor ahorro energético con respecto a la CRD es la secuencia VTCD con un 58.08% de ahorro. Se podría suponer que esta es la mejor secuencia para la síntesis de DPC al ser la de menor consumo energético. Sin embargo para poder considerarla como la mejor, es necesario realizar un análisis global de consumo energético, costos y propiedades de control para poder determinar cuál es la mejor secuencia de todas.

#### *Análisis de costos*

Se aplicó el Método de Guthrie a las secuencias originales y a las secuencias optimizadas para finalmente poder hacer un análisis comparativo. Para la aplicación del Método de Guthrie se tomó un tiempo de recuperación de 10 años, así mismo se utilizó un CEPCI de 557.9 el cual equivale a un ajuste de año del 2015, por último se consideraron 8400 horas de operación por año.

Tabla 1: Análisis comparativo de consumo energético, TAC y número de condición entre los sistemas originales y los optimizados.

Configuración	Tipo de Secuencia	Consumo Energético (kW)	TAC ( \$/y )	Número de Condición y
CRD	Original	945.08	899,317.82	2179.96
TCRD	Original	794.8	786,435.71	45.32
	Optimizada	734.45	765,524.35	1030.78
VRRD	Original	766.94	1,035,794.6	284.17
	Optimizada	757.06	929,090.50	131.58
VTCR	Original	653.7	887,478.64	164.5
	Optimizada	396.16	760,847.10	15110.37

Como se observa de la Tabla 1 las secuencias optimizadas presentaron menor costo en comparación de su correspondiente diseño original. La secuencia VTCR fue la secuencia que presentó mayor ahorro económico en comparación con su diseño original así como con respecto a la secuencia convencional. Por otra parte la secuencia VRRD representa más gasto que la secuencia convencional. Se puede decir que la secuencia VTCR presentó un mayor ahorro económico tanto contra su diseño original como contra el resto de las secuencias optimizadas y la convencional.

#### ANÁLISIS DE CONTROL (ANÁLISIS SVD).

En la Tabla 1 el sistema que presenta mejores propiedades de control es el sistema TCRD no optimizado. En ese sentido, hablando sobre las secuencias optimizadas, a partir del análisis de SVD la secuencia que presenta mejor controlabilidad es la VRRD, debido a que este tipo de secuencias no pierden sus propiedades de control al ser optimizadas. La degradación en puntos de control sólo es aplicable para secuencias con acoplamiento térmico [7], de modo que se puede observar que la secuencia VTCR es la que presenta peores condiciones de control.

## CONCLUSIONES

Analizando todo en conjunto se puede decir que tanto económicamente como energéticamente la secuencia VTCR es una buena propuesta a implementar para la síntesis de DPC, sin embargo presenta malas propiedades de control. La secuencia que le sigue en ahorro económico y energético es la secuencia TCRD. Haciendo una comparación entre ambas se puede decir que la diferencia en TAC entre ambas secuencias es de sólo 0.61% el cual es una diferencia casi nula. Ahora en términos energéticos, la secuencia TCRD consume 734.45 KW y la secuencia VTCR consume 396.16 KW, por lo que la diferencia entre ambas es del 46%, esta diferencia si es considerable sin embargo al analizar las propiedades de control, se puede decir que la secuencia TCVD presenta mucho mejores propiedades que la VTCR.

Después de haber realizado un análisis final, se comprobó, que el ahorro económico y energético son proporcionales; sin embargo, las propiedades de control son inversamente proporcionales (para las secuencias con acoplamiento térmico). Debido a que estos objetivos se encuentran en competencia el uno con el otro, es evidente que debería de haber un punto de equilibrio entre ambos objetivos en donde el control no sea tan malo y los gastos tanto energéticos como económicos no sean tan elevados.

## REFERENCIAS

[1] Serini Volker, (2000) "Polycarbonates" in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim.

- [2] Zhang Wei (2014). "Sustainable Polycarbonate Nanocomposites: Impact of Production Method and Composition" *Journal of Chemical Information and Modeling* 53(9): 1689-99.
- [3] Cheng Kai, Wang San-Jan, Wong David S.H (2013) "Steady-state desing of thermally coupled reactive distillation process for the synthesis of diphenyl carbonte" *Comp. Chem. Eng.* 58:263-271
- [4] Tuinstra, H.; Rand, C. L. (1994). Process for the preparation of phenyl carbonate or polycarbonates. US Patent 5349102.
- [5] Shen, R.C., Fang, Y. J., Xiao, W. D., y Zhu, K. H. (2002). "Syntesis of diphenyl carbonate from dimethyl carbonate and phenyl acetate". *Petrochemical Technology*, 31, 897-900 (in Chinese).
- [6] Jiménez A.,(2003) "Diseño de procesos en Ingeniería Química", Ed. Reverte. México.
- [7] Márquez-Muñoz, J. G. Segovia-Hernández y S. Hernández.(2005). "Propiedades de control de esquemas de destilación alternativos a las secuencias termicamente acopladas con columnas laterales para la separación de mezclas ternarias". *Revista Mexicana de Ingeniería Química*. vol. 4, núm. 3, 2005, pp. 231-240