

# Simulación del proceso de separación de acroleína presente en una mezcla multicomponente vía Aspen Plus

Hernández Galván Miguel Angel\*, Contreras Larios José Luis, Aguilar González Luis Faith

Universidad Autónoma Metropolitana, Departamento de Energía. Av. San Pablo No. 180, Azcapotzalco, Ciudad de México, C.P. 02200, México.

\*Autor para correspondencia: [mnhg@azc.uam.mx](mailto:mnhg@azc.uam.mx)

## Recibido:

22/abril/2018

## Aceptado:

9/agosto/2012

## Palabras clave:

Acroleína,  
destilación,  
Aspen-Plus

## Keywords:

Acrolein,  
distillation,  
Aspen-Plus

## RESUMEN

Actualmente, en la industria química se presentan diferentes problemas de separación de mezclas multicomponentes, los métodos comúnmente empleados son destilación, absorción, extracción líquido-líquido, etc. El presente trabajo se centra en la destilación, ya que la destilación es el proceso más empleado para la separación de mezclas, el predominio de la destilación sobre otras operaciones unitarias de separación de mezclas obedece fundamentalmente a que se trata de la operación que permite la mayor velocidad de transferencia de masa. El objetivo de este trabajo es realizar el diseño del proceso de separación de la acroleína de una mezcla multicomponente, que permita obtener una pureza de acroleína mayor al 90% mol y llevar a cabo la simulación del proceso de separación con el simulador comercial Aspen Plus. La acroleína se separa de la mezcla multicomponente Agua-Acroleína-Hidroxiacetona-Acetaldehído-Formaldehído que se obtiene a partir de la deshidratación del glicerol.

## ABSTRACT

Now, in the chemical industry exist different difficulties of separation of multicomponent mixtures, the process commonly used are distillation, absorption, liquid-liquid extraction, etc. The present work regard on distillation, since the distillation is the most used process for the separation of mixtures, the acceptance of distillation over other unit operations of mixtures separation, submits to the greater speed of mass transfer. The focus of this work is to design the separation process of acrolein from a multicomponent mixture with a purity greater than 90% mol and develop the simulation of process separation by a commercial simulator Aspen Plus. The acrolein is separated from the multicomponent mixture Water-Acrolein-Hydroxyacetone-Acetaldehyde-Formaldehyde which is obtained from the dehydration of glycerol.

## Introducción

La destilación, como proceso de separación de mezclas líquidas cuyos componentes presenten volatilidades diferentes entre sí, es el método más usado en la práctica industrial. Su objetivo es separar, mediante vaporización, una determinada mezcla en sus componentes individuales o bien, en algunos casos, en grupos de componentes. Durante el proceso, una fase líquida se pone en contacto con una fase vapor, produciéndose una transferencia de masa entre ambas fases, con el efecto, de que en el vapor se concentran los componentes más volátiles, mientras que en el líquido lo hacen los menos volátiles.

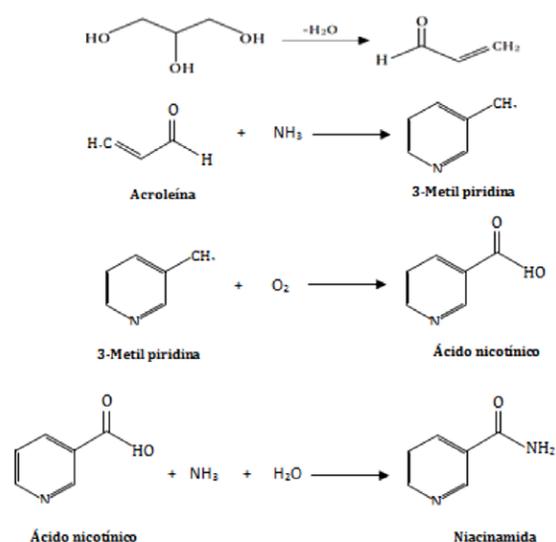
La simulación de procesos se ha convertido en una herramienta eficaz y confiable para el análisis, la síntesis y la optimización de cualquier proceso, lo que permite proponer las diferentes alternativas para resolver los retos modernos. La ventaja que presenta la simulación de procesos radica que a partir de datos reales (los que se utilizarán para obtener un modelo matemático si no existe y/o validar los resultados obtenidos al resolver el modelo o datos experimentales) se pueden obtener información que permitirán el análisis, la síntesis y la optimización. Además, no se requiere una gran cantidad de experimentos (la realización de experimentos incrementa el costo y puede provocar problemas de operación en la planta de proceso) y si el modelo matemático que representa el proceso es el adecuado, la reproducibilidad de los resultados es excelente.

El objetivo del presente trabajo es realizar el diseño del proceso de separación la mezcla agua-acroleína-hidroxiacetona-acetaldehído-formaldehído y obtener acroleína con una pureza mayor al 90 %, para posteriormente utilizarla para los pasos subsiguientes para la producción de Niacinamida, debido a que varios estudios o proyectos arrojan que la producción que se consume en México es de origen extranjero, sin existir un antecedente de su fabricación en este país (Guerra, 2014). Este trabajo forma parte de un proyecto que se está realizando dentro de la Universidad Autónoma Metropolitana para producir Niacinamida, teniendo como meta producirla en el país.

La Niacinamida es un compuesto cuya fórmula es:  $C_6H_6N_2O$ , sólido cristalino e incoloro y proporciona los grupos funcionales necesarios para la formación de las coenzimas esenciales en el metabolismo energético de la célula y reparación del ADN. La ausencia de estos compuestos en la dieta alimenticia genera enfermedades hecho demostrado en 1914 por el bacteriólogo estadounidense Joseph Goldberger.

*Glicerina → Acroleína → 3-Metilpiridina → Ácido Nicotínico → Niacinamida*

La obtención de Niacinamida ( $C_6H_6N_2O$ ) o Vitamina B se obtiene al final de un tren de procesos catalíticos, ya estudiados (García, 2014, Sánchez et al., 2009, Guerra, 2014, Ferrer, 2011, Quintana et al. 2016) y realizados a partir de Propileno ( $C_3H_6$ ) o Glicerina ( $C_3H_8O_3$ ) para la obtención de la Acroleína ( $C_3H_4O$ ), posteriormente se lleva a cabo la reacción entre la Acroleína y el Amoníaco ( $NH_3$ ) para obtener la 3-Metilpiridina ( $C_6H_7N$ ), ésta se oxida con aire para obtener Ácido Nicotínico ( $C_6H_5NO_2$ ) y finalmente se obtiene Niacinamida por neutralización de este ácido con Amoníaco. En la figura 1 se muestran estas reacciones para la obtención de la Niacinamida.



**Figura 1.** Reacciones intermediarias para la obtención de Niacinamida.

Las Vitaminas son esenciales en el metabolismo, necesarias para el crecimiento y para el buen funcionamiento del cuerpo. Solo la Vitamina D es producida por el organismo, el resto se obtiene a través de los alimentos. La vitamina B3 llamada también Niacinamida, Nicotinamida, Vitamina PP, 3-Piridina Carboxinamida es la amida del Ácido Carboxílico de la Niacina, la amida es la parte en donde se llevan a cabo las reacciones óxido-reducción a nivel celular y donde se metabolizan tanto las proteínas como los carbohidratos para obtener energía. Es un vasodilatador que mejora la circulación sanguínea, participa en el mantenimiento fisiológico de la piel, la lengua y el sistema digestivo (Ramírez, 2015).

En Latinoamérica se han visto los mayores casos de enfermedades producidos por carencia de vitamina B3, debido a una dieta a base de maíz, alimento que no

proporciona niacina al organismo ni proteínas a partir de las cuales se produce la vitamina B3. La enfermedad se denomina Pelagra, y se manifiesta con dermatitis, diarrea y demencia.

Es por ello, que con la separación de acroleína que se pretende obtener a partir del diseño del proceso de destilación se desea utilizar dicho compuesto, como se indica en las reacciones de la figura 1, en la producción de niacinamida.

La acroleína es un importante intermediario para la industria química es el más simple de los aldehídos insaturados, en la literatura se encuentran como separar la acroleína de diferentes procesos (Steven, 2003; George, 2009). A causa de su estructura química, la acroleína tiene un alto poder reactivo debido a sus compuestos conjugados vinilo y carbonilo, esto conlleva a reacciones características de compuestos insaturados y aldehídos. La conjunción entre el doble enlace C=C y el grupo carbonilo incrementa la reactividad de ambos grupos, los cuales pueden reaccionar juntos o separados. Por tal motivo la acroleína se encuentra en muchas aplicaciones como compuesto intermediario en la síntesis de niacinamida o vitamina B3, pesticidas, picolinas, ácido acrílico, metionina, además como agente desinfectante y esterilizador químico para instalaciones hospitalarias. Es un líquido incoloro, altamente volátil, de olor desagradable, muy soluble en agua y en disolventes orgánicos como el etanol y el dietiléter. La acroleína es altamente toxica por sus propiedades lacrimógenas.

La fórmula molecular de la acroleína es  $C_3H_4O$  y su estructura molecular se muestra en la siguiente figura:

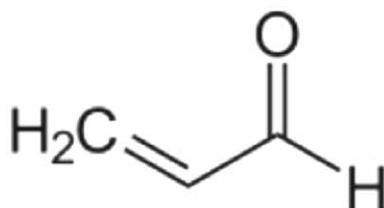


Figura 2. Molécula de acroleína.

La acroleína es producida industrialmente por oxidación del propileno en la fase gaseosa a través del oxígeno del aire con vapor de agua en la presencia de un catalizador basado en una mezcla de óxidos, pero en la actualidad la acroleína se puede fabricar a partir de glicerina (Aguilar et al., 2016; Cecilia et al., 2013; Dávila, 2016; Domínguez

y Aguilar, 2016; Navarrete, 2012), que abunda como subproducto de la fabricación del biodiesel.

### Metodología

El presente trabajo consiste en diseñar el proceso de separación de la acroleína a partir de la mezcla Agua-Acroleína-Hidroxiacetona-Acetaldehído-Formaldehído que forma parte de los productos de reacción en la de la deshidratación del glicerol para la obtención de la acroleína. La composición de la mezcla consiste de 80% mol de agua, 10% de acroleína, 5% de hidroxiacetona, 2.5% de acetaldehído y 2.5% de formaldehído, la acroleína que se desea obtener deberá de contar con una pureza mayor del 90% para ser empleada en las reacciones subsecuentes para la obtención de la Niacinamida.

En la tabla 1 se dan las propiedades físicas como son su punto de ebullición, densidad, presión de vapor a temperatura ambiente de los componentes que forman parte de la mezcla.

Tabla 1. Propiedades físicas de los componentes de la mezcla a separar.

Tabla de propiedades físicas					
Nombre común	Agua	Acroleína	Acetol	Acetaldehído	Formaldehído
Nombre IUPAC	Oxidano	Prop-2-enal	1-hidroxipropan-2-ona	Etanal	Metanal
CAS	7732-18-5	107-02-8	116-09-6	75-07-0	50-00-0
PM (g/mol)	18.016	56.06	74.08	44.05	30.026
Formula	H <sub>2</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	C <sub>1</sub> H <sub>2</sub> O
Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	1	0.0008427	1.059	0.788	0.82
P. de ebullición (°C)	100	52.5	145-146	20	-20
Presión de vapor (KPa)	2.34 (20°C)	29 (20°C)	0.75 (20°C)	101 (20°C)	437.97 (20°C)

La simulación del proceso de separación de la mezcla se llevó a cabo empleando el simulador Aspen Plus. En la tabla 1 se observa que la acroleína la cual deseamos separar es un compuesto con una presión de vapor intermedia de los cinco componentes presentes en la mezcla, la presión de vapor de la acroleína es mayor que la del acetaldehído y formaldehído y menor que la del agua y el acetol o hidroxiacetona. Para conseguir la separación de la acroleína de la mezcla químicamente se probaron diferentes configuraciones, en la figura 3 se muestra la configuración seleccionada para llevar a cabo dicha separación. Para llevar a cabo la simulación se ingresaron los componentes que forman la mezcla, en donde se empleó el buscador de compuestos de Aspen en su base de datos, ingresando cada uno de los compuestos con su identificador CAS.

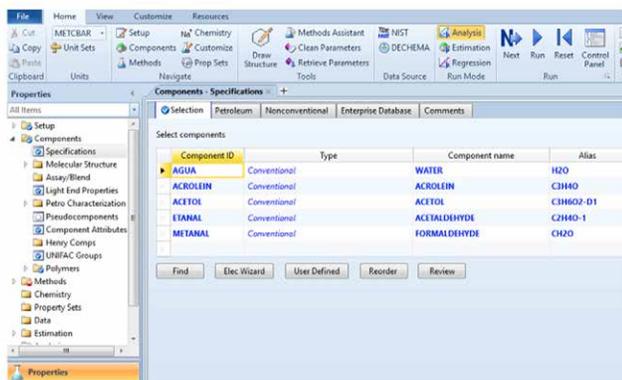


Figura 3. Selección de los componentes.

Posteriormente se seleccionó el modelo termodinámico que se empleó en la simulación, tomando en cuenta las propiedades físicas de miscibilidad y volatilidad de los componentes de la mezcla. Para la generación de los diagramas y el cálculo de los azeótropos se utilizó el modelo NRTL mostrado en la figura 4.

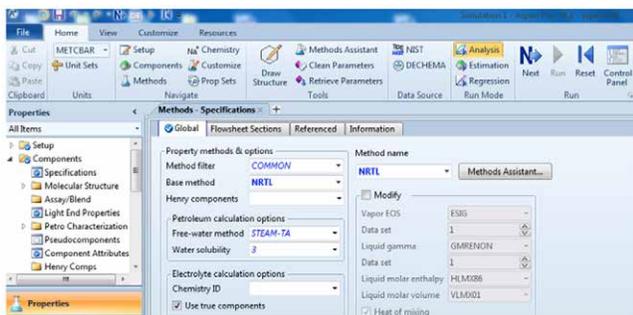


Figura 4. Selección del modelo termodinámico.

Para esta mezcla multicomponente se determinaron mediante el simulador Aspen Plus las diferentes combinaciones de mezclas binarias que se pueden presentar y determinar de las diferentes mezclas binarias cuáles presentan azeótropos en un proceso isobárico a una presión de 101.325 KPa. El simulador mostró que el sistema binario que presenta azeótropo es el sistema binario formado por la mezcla acroleína (1)-agua (2) que se muestra en el diagrama T-x-y en la siguiente figura 5, en donde se utilizó el modelo de coeficientes de actividad del modelo NRTL.

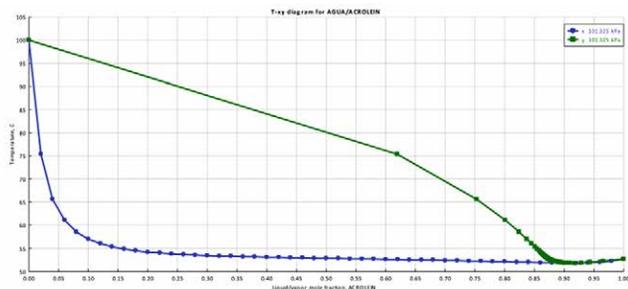


Figura 5. Diagrama T-x-y del sistema acroleína (1)- agua (2). De la gráfica se puede ver que la composición del punto azeotrópico es de aproximadamente 0.9 fracción mol de acroleína, lo que indica que este valor representa la pureza máxima que se puede obtener de la acroleína en un proceso de destilación en el que se encuentre la mezcla binaria acroleína-agua. Utilizando el modelo NRTL se determinó el valor exacto de la composición y la temperatura azeotrópica, en donde se obtuvo que la composición azeotrópica es 0.9120 en acroleína a una temperatura de 51.89 °C. Con el simulador Aspen Plus se determinó si la mezcla quinario presenta azeótropos ternarios o cuaternarios, que al realizarlo mostró que no existen. Lo que nos muestra que no existe problema para obtener una composición mayor al 90% mol de acroleína.

## Resultados y discusión

Es importante la selección del diseño del proceso de separación que permita una separación de acroleína con una pureza del 90%mol, para utilizarla en el conjunto de reacciones de la figura 1, para la obtención de Niacinamida. Para esto se realizaron diferentes configuraciones con diferentes números de columnas de destilación. En el caso de una mezcla de cinco componentes se tienen 14 diferentes combinaciones con cuatro columnas de destilación, por lo que se probaron diferentes configuraciones hasta que se propone un arreglo mínimo de columnas de forma que el proceso cumpla con los objetivos. En el diseño del proceso de separación, se empleó el modelo solución NRTL, como se había mencionado anteriormente conteniendo una columna de tipo flash y dos columnas Radfrac como se muestra en la figura 6.

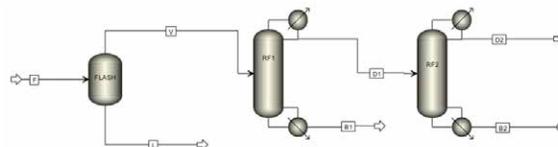


Figura 6. Simulación en Aspen Plus para separar la acroleína de la mezcla multicomponente.

Una vez introducido los componentes y el modelo termodinámico a utilizar en la pestaña de propiedades del Aspen Plus, se ingresaron las especificaciones de la corriente de alimentación y las especificaciones del proceso en la pestaña de simulación del Aspen Plus. La corriente de alimentación es una corriente de líquido saturado de la mezcla multicomponente antes mencionada con un flujo molar propuesto de 100 kmol/h y una presión de 101.325 KPa, en la figura 7 se muestra el llenado de las especificaciones en el simulador.

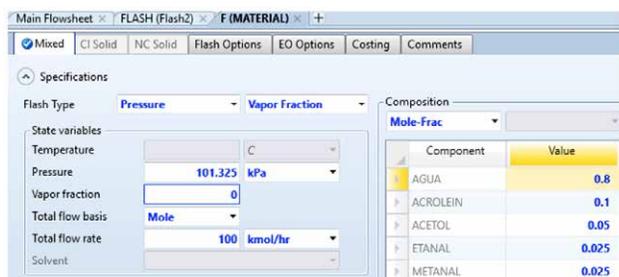


Figura 7. Especificaciones de la corriente de alimentación.

El diagrama de proceso de la figura 6 fue elaborado en el simulador para posteriormente indicar en el programa los parámetros de operación. Posterior a ello, se ingresó al simulador algunos parámetros en los que se está llevando a cabo el proceso.

La columna flash opera a la presión a la que se alimentó la mezcla (101.325 KPa), vaporizando el 40 % del flujo de alimentación; en la figura 8 se muestra cómo se ingresaron estas especificaciones de operación al simulador.

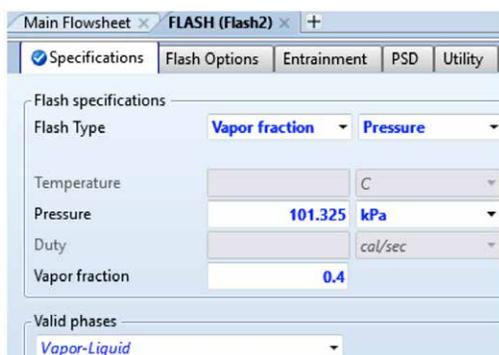


Figura 8. Especificaciones de la columna Flash.

Las dos columnas tipo RadFrac operan con un condensador total y un rehervidor parcial a la presión de 101.325 KPa. La primera columna RadFrac 1, opera con 13 etapas alimentando en la etapa 11 con una razón de reflujo de 6.21 y con un flujo en el destilado de 14.26 kmol/hr, que se introducen en el simulador como se muestra en la figura 9.

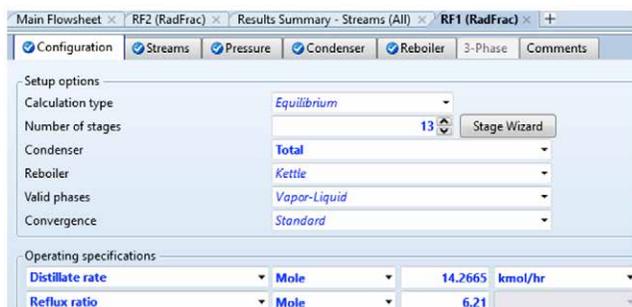


Figura 9. Parámetros de operación de la columna RadFrac 1.

De igual forma, se ingresaron datos de las condiciones a las que opera la segunda columna de destilación tipo RadFrac para llevar a cabo la operación unitaria. La segunda columna tipo RadFrac opera con 21 etapas de equilibrio, de las cuales se alimenta en la etapa 13 con un flujo en el destilado de 4.76 kmol/hr a una razón de reflujo de 3, como se muestra en la figura 10.

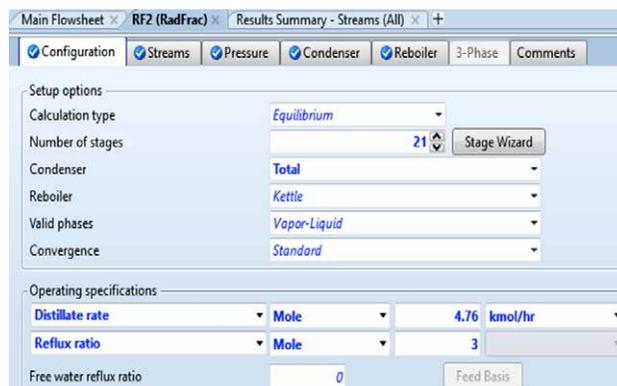


Figura 10. Parámetros de operación de la columna RadFrac 2.

La configuración mostrada permite obtener en el residuo de la segunda columna acroleína con una pureza del 92.78 % con un número de etapas de 13 y 21 respectivamente. En la tabla 2 se muestran los resultados obtenidos en Aspen Plus en donde se muestran los flujos y las composiciones presentadas en cada una de las corrientes involucradas en este proceso de separación.

Tabla 2. Flujos y composiciones de las corrientes del proceso de destilación.

Nombre de la Corriente	Unidades	Material						
		F	L	V	B1	D1	B2	D2
Fase		Líquido	Líquido	Vapor	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
Temperatura	C	52.775	89.4618	89.4618	74.6549	21.2856	51.8131	-6.14424
Flujos Mol	kmol/hr	100	60	40	25.7385	14.2665	9.5065	4.76
AGUA	kmol/hr	80	54.88010	25.11990	24.43940	0.68048	0.68039	8.42E-05
ACROLEINA	kmol/hr	10	0.48023	9.51977	0.68660	8.83316	8.82049	0.01268
HIDROXIACETONA	kmol/hr	5	4.39570	0.60430	0.60430	3.47E-16	0	0
ACETALDEHIDO	kmol/hr	2.5	0.07377	2.42623	0.00189	2.42434	0.00562	2.41872
FORMALDEHIDO	kmol/hr	2.5	0.17021	2.32979	0.00127	2.32852	9.28E-07	2.32852
Fraciones Mol								
AGUA		0.8	0.91467	0.62800	0.94971	0.04770	0.07157	1.77E-05
ACROLEINA		0.1	0.00800	0.23799	0.02668	0.61915	0.92784	0.00266
HIDROXIACETONA		0.05	0.07326	0.01511	0.02348	2.43E-17	0	0
ACETALDEHIDO		0.025	0.00123	0.06066	7.35E-05	0.16993	0.00059	0.50813
FORMALDEHIDO		0.025	0.00284	0.05824	4.92E-05	0.16322	9.76E-08	0.48919

En la tabla 2 se observa en los flujos molares que en la primera destilación (flash), en el destilado representado por la corriente V se obtiene la mayor cantidad de acroleína, acetaldehído y formaldehído, separando la hidroxiacetona en los fondos del resto de la mezcla; en la primera destilación RadFrac, se separa el agua con la hidroxiacetona en los fondos representada por la corriente B1 y obteniendo la mayor parte de la acroleína en la corriente de destilado D1; y posteriormente en la

segunda columna de destilación RadFrac se obtiene la acroleína con una concentración del 92 % mol y el resto agua en la corriente B2.

## Conclusiones

De la deshidratación del glicerol se obtiene la mezcla agua-acroleína-hidroxiacetona-acetaldehído-formaldehído, con la que se desea separar la acroleína para realizar el conjunto de reacciones que den lugar a la producción de la Niacinamida, la cual no se produce en México. Para la separación de la acroleína se propone el diseño del proceso de separación, que consta de un tanque flash y de dos columnas de destilación de 13 y 21 etapas teóricas respectivamente. Esta configuración permite obtener en la corriente de fondo B2 la acroleína con una pureza del 92% mol, cumpliendo con la premisa de conseguir una pureza mayor al 90%. Para realizar la separación la simulación del proceso de separación se llevó a cabo la simulación del proceso en el simulador comercial Aspen Plus.

Como modelo termodinámico se utilizó el modelo de NRTL, el simulador Aspen Plus permite identificar si el sistema multicomponente presenta azeótropos que compliquen el proceso de separación. Al realizar el cálculo se encontró que solo la mezcla binaria agua-acroleína forma azeótropo, pero cuando se mezcla con los demás componentes no se presenta azeótropo ternario o cuaternario, por lo que facilitó la separación de la mezcla.

## Referencias

Aguilar J., Pérez J., Martínez M. (2016). Obtención de acroleína a partir de glicerol utilizando como catalizador pt/alumina mesoporosa. Proyecto de Integración en Ingeniería Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

Cecilia J., Moreno A., Garcia C., Moreno R., Mérida J., Santamaria J., Maireles P. (2013).  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  soportado en SBA-15 para la deshidratación de glicerol a acroleína. Artículo de Investigación, Universidad de Málaga, Sevilla, España.

Damián A., Espinoza E., Torres G.A. (1998). Incidencia de las variables operativas de una destilación por carga sobre la calidad y rendimiento de los productos., Centro de Información Tecnológica, Vol.9, No. 4 pp 370.

Dávila P. (2016). Estudio teórico del mecanismo de formación de acroleína a partir de la deshidratación del glicerol. Proyecto de Integración, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

Domínguez V.D., Aguilar J. (2016). Obtención de acroleína a partir de la deshidratación catalizada de glicerol por medio del empleo de la teoría de funcionales de la densidad. Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales septiembre 2016.

Ferrer V. (2011). Obtención de Niacinamida a partir de ácido nicotínico. Proyecto de Integración, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

García, D. (2014), Obtención de 3-Metilpiridina a partir de glicerina obteniendo como producto intermedio la ACROLEINA. Proyecto de Integración, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

George G., Patrick R., Michel G. (2009). Method for the purification of acrolein. United States Patent Office, Adisseo Ireland Ltd., Dublin (IE).

Guerra M.N. (2014). Proceso de obtención y purificación de niacinamida a partir de ácido nicotínico. Proyecto de Integración, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

Navarrete L.M. (2012). Obtención de acroleína mediante la deshidratación de glicerina usando catalizadores de níquel y paladio soportados en tungstofosfato de cesio. Proyecto de Integración, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

Quintana B., Nuño L., Luna R., Contreras J.L., Tapia C.R. (2018). Desarrollo de catalizadores para producir niacinamida a partir de glicerina. Proyecto de investigación, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

Ramírez J. (2015). Diseño de una columna de destilación para la separación de la mezcla Piridina- 3-Metilpiridina. Proyecto de Integración, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, México.

Sánchez J. L., Nuño L., Luna R., Contreras J. L. (2009). Evaluación de catalizadores óxidos en un sistema de reacción mejorado para la síntesis de la 3-metilpiridina. XXX Encuentro Nacional de la AMIDIQ del 12 al 19 de Mayo del 2009, Mazatlán, Sinaloa.

Steven G. S., Samuel M. D., Richard A. S. (2003). Process for recovering acrolein or propionaldehyde from aqueous streams. United States Patent Office, Atofina Chemicals, Inc., Philadelphia.